

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу

Семеновой Марии Николаевны «Свойства делокализованных нелинейных колебательных мод треугольной решетки Морзе и графена», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Актуальность темы диссертации. Колебания кристаллических решеток определяют такие важные свойства материалов как теплопроводность, теплоемкость, тепловое расширение и многие другие, поэтому их изучение является **важной задачей**.

В идеальных условиях наличие межатомного взаимодействия делает невозможными независимые смещения отдельных атомов, и их коллективное движение приобретает характер колебательного процесса, распространяющегося в виде гармонических волн по кристаллу. В действительности колебания кристалла не являются строго гармоническими. Несмотря на малость ангармонизма, даже при слабых возбуждениях нормальные колебания кристалла оказываются связанными друг с другом. При сильном возбуждении смещения атомов уже достаточно велики и описывающие их уравнения становятся строго нелинейными. В таких условиях появляются колебания, существенно отличающиеся от гармонических.

Наряду с экспериментальными методами изучения нелинейной динамики кристаллической решетки, широко используются эффективные методы компьютерного моделирования, такие как первопринципное моделирование и метод молекулярной динамики. Первый из этих методов основан на теории функционала плотности и значительно более точен, поскольку он учитывает электронную структуру вещества. Однако, для моделирования этим методом необходимы значительные компьютерные ресурсы. В данной диссертации предпочтение отдано более быстрому молекулярно-динамическому моделированию, которое заключается в том, что для описания межчастичного взаимодействия используются либо модельные, либо эмпирические потенциалы.

Молекулярно-динамическое изучение свойств делокализованных нелинейных колебательных мод (ДНКМ) в двумерных кристаллах определенно

Входящий ИПСМ

№ 303

от 18.05.21

является *актуальной* проблемой физики твердого тела поскольку существует тесная связь ДНКМ с пространственно-локализованными нелинейными колебательными модами, известными как дискретные бризеры. Недавно было открыто и показано, что дискретные бризеры могут быть реализованы путем наложения локализующей функции на ДНКМ при условии, что частота ее колебаний лежит выше фононного спектра решетки. Кроме того, дискретные бризеры могут также возникать спонтанно из ДНКМ, имеющих частоту выше фононного спектра, в результате развития модуляционной неустойчивости ДНКМ.

Структурно диссертация включает введение, четыре главы, основные результаты и выводы, список литературы из 122 наименований. Работа занимает 107 страниц машинописного текста, содержит 3 таблицы, 37 рисунков.

Во введении обосновывается актуальность исследования ДНКМ, формулируется цель и задачи исследования, приводятся утверждения, касающиеся научной новизны и практической значимости диссертационной работы, а также представлены основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе описана изучаемая проблема, приведен обзор работ по нелинейной динамике кристаллической решетки, включающий исследования делокализованных и пространственно-локализованных нелинейных колебательных мод. Описаны методы исследования нелинейных колебаний кристаллов, включая экспериментальные методы и методы компьютерного моделирования. Более подробно описан метод молекулярной динамики с использованием модельного и эмпирического потенциалов, которые используются в данной работе. В конце главы указаны открытые проблемы и сформулированы основные цели и задачи диссертационного исследования.

Во второй главе диссертации изучены свойства всех восьми однокомпонентных ДНКМ треугольной модельной решетки с потенциалом Морзе. Молекулярно-динамические расчеты велись с использованием оригинальной программы, написанной на языке программирования C++. Исследовалась расчетная решетка, содержащая 12×12 трансляционных ячеек,

то есть 144 атома. Границные условия вдоль обоих координатных направлений периодические.

В третьей главе рассмотрены одно- двух- и трехкомпонентные ДНКМ в гексагональной решетке графена. Расчетная решетка содержала 12×12 примитивных ячеек и состоит из 288 атомов углерода. Границные условия вдоль направлений x и y также периодические. Использовался NVE ансамбль. Уравнения движения атомов интегрировались методом Штурмера шестого порядка с шагом интегрирования 0,1 фс.

Четвертая глава посвящена анализу устойчивости ДНКМ в треугольной решетке Морзе и в графене. Были найдены условия устойчивости всех рассмотренных ДНКМ, а также описан механизм развития модуляционной неустойчивости ДНКМ.

В конце каждой главы представлены выводы.

В заключении сформулированы основные результаты диссертационной работы, сформулированные в виде пяти положений.

К числу наиболее существенных результатов диссертации, на мой взгляд, следует отнести следующее:

1. Было показано, что все исследованные ДНКМ устойчивы при достаточно малых значениях амплитуд и становятся неустойчивы при превышении некоторого порогового значения амплитуд, индивидуального для каждой ДНКМ.

2. Среди восьми однокомпонентных ДНКМ в треугольной решетке Морзе имеется одна, частота которой целиком лежит выше фононного спектра и ещё три, частоты которых выходят выше спектра при достаточно больших амплитудах.

3. Все двухкомпонентные и трехкомпонентная ДНКМ генерируют в графене вторую гармонику, и для некоторых ДНКМ частота второй гармоники может лежать значительно выше максимальной частоты фононного спектра.

4. Две из двухкомпонентных ДНКМ создают в листе графена отрицательное давление, что связано с наличием врачающихся шестиугольников углерода в картине атомных колебаний.

Таким образом, в диссертации Семёновой М.Н. получен ряд новых и интересных результатов, играющих важную роль физике кристаллов в целом и теории делокализованных и пространственно-локализованных нелинейных колебаний в частности. Их достоверность не вызывает сомнений, поскольку в исследовании использовались апробированные и хорошо зарекомендовавшие себя методы и потенциалы.

Полученные результаты имеют фундаментальный теоретический характер. Они могут быть использованы для объяснения ряда эффектов таких как, возбуждение и реализация дискретных бризеров путем наложения ДНКМ и генерация второй гармоники при возбуждении ДНКМ. Полученные результаты расширяют представления об условиях существования, свойствах и механизмах взаимодействия ДНКМ в модельных кристаллах с взаимодействием Морзе и в графене. Представляется практически важной возможность возникновения аномального отрицательного давления в расчетной ячейке графена, к которой могут приводить некоторые двухкомпонентные ДНКМ при использовании периодических граничных условий с неизменной формой.

Результаты диссертационной работы Семёновой М.Н., выносимые на защиту, прошли достаточную апробацию на 7-ми научных конференциях, в том числе с международным участием, и опубликованы в 13 научных трудах соискателя, включая 7 статей в рецензируемых журналах из списка ВАК, среди которых 5 индексируются в Web of Science и Scopus (одна из них в журнале Q2).

При этом данная диссертационная работа не лишена и недостатков.

1. В работе отсутствует четкое обоснование выбранного метода исследования с помощью молекулярно-динамического моделирования. При этом размеры исследуемых ячеек являются относительно небольшими, и, следовательно могли бы быть рассчитаны с помощью методов из первых принципов.

2. Нет четкого обоснования причин выбора расчетных решеток именно такого размера. В работе указано, что увеличение расчетной ячейки не приводило к количественным и качественным изменениям динамики ДНКМ. В тоже время, не указано, что произойдет при уменьшении размера решеток.

Также отсутствует иллюстративный материал, с помощью которого можно было бы подтвердить вышеизложенные утверждения.

3. Во введение на с. 6-7 указывается, что в качестве одной из исследуемых моделей рассматривается хорошо изученная треугольная решетка с потенциалом взаимодействия Морзе. При этом, отсутствуют ссылки как на классические работы, так и недавние, в которых рассматривалась такая решетка. Наличие таких ссылок подкрепило бы сделанные утверждения.

4. Достаточно слабое внимание в данной работе уделено описанию колебательных характеристик ДНКМ, в частности не представлен спектральный анализ колебаний. Представление такого графического материала позволило бы понять, какими колебаниями характеризуются различные ДКМН: гармоническими, периодическими, квазипериодическими либо хаотическими. Также не совсем ясно, что происходит с этими колебаниями при неустойчивости ДКМН: как меняется амплитуда колебаний, спектральный состав этих колебаний, появляются ли хаотические колебания и т.д.

5. Можно сделать ряд замечаний по орфографии. Например, на странице 16 в строке 9 и 13 присутствуют опечатки, также на странице 82 в строке 9.

6. На с. 73 указано, что выбором начальных амплитуд можно синхронизовать колебания в двухкомпонентных ДНКМ в графене и получить периодические колебания. При этом, судя по графикам временных реализаций можно сделать вывод о квазипериодическом многочастотном характере колебаний, а синхронизация понимается как совпадение фаз компонент колебаний.

Указанные недостатки не являются определяющими и не влияют на достаточно высокую оценку работы в целом. Представленная диссертация выполнена на хорошем научном уровне и представляет собой законченную научно-квалификационную работу, посвященной актуальной задаче. Текст автореферата написан аргументированно, логично и хорошо отображает содержание диссертационной работы.

Диссертационная работа Семёновой М.Н. «Свойства делокализованных нелинейных колебательных мод треугольной решетки Морзе и графена» соответствует 5-ти требованиям пунктов 9-11, 13 и 14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г. (в действующей редакции), а ее автор, Мария Николаевна Семёнова, безусловно, заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Я, Шепелев Игорь Александрович, даю согласие на включение моих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Официальный оппонент
кандидат физико-математических наук по
специальности 01.04.03 – Радиофизика
доцент кафедры радиофизики и
нелинейной динамики института физики
ФГБОУ ВО «Саратовский национальный
исследовательский государственный
университет им.
Н. Г. Чернышевского»

Почтовый адрес 410012, г. Саратов, ул.
Астраханская, 83
Контактный телефон 8-904-244-16-54
Адрес электронной почты igor_sar@li.ru

Шепелев Игорь Александрович



Подпись Шепелева И.А. заверяю
Ученый секретарь
М.П.

Федусенко И.В.

12.05.2021