

УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной и международной
деятельности ФГБОУ ВО «Алтайский
государственный технический
университет им. И.И. Ползунова»


А.Е. Свистула

«04» февраля 2020 г.



ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

ФГБОУ ВО «Алтайский государственный технический университет
им. И.И. Ползунова» на диссертационную работу

Бачуриной Ольги Владимировны

«Нелинейные пространственно – локализованные колебательные моды
в металлах»

Диссертационная работа Бачуриной О.В. посвящена изучению нелинейных локализованных колебательных мод различной пространственной размерности в гексагональных плотноупакованных (ГПУ) и гранецентрированных кубических (ГЦК) металлах при помощи молекулярно-динамического моделирования.

Актуальность работы. Изучению колебаний кристаллической решетки уделяется значительное внимание в физике конденсированного состояния. При повышенных температурах, в ходе пластической деформации и при других воздействиях на материалы особенно важным оказывается учет ангармонизмов межатомных взаимодействий. Анализ атомных колебаний позволяет определить такие важные характеристики кристаллов как теплоемкость, тепловое расширение, зависимость констант упругости от

температуры. Около трех десятков лет назад было показано, что помимо фоновых волновых пакетов нелинейные решетки способны поддерживать колебательные моды принципиально нового типа – дискретные бризеры (ДБ), вклад которых в физику кристаллов еще только предстоит описать. С другой стороны, усилиями группы, работающей под руководством проф. Г.М. Чечина, для многих двумерных и трехмерных решеток найдены симметрично-обусловленные точные решения в виде делокализованных нелинейных колебательных мод (ДНКМ). Исходя из этого, возникают вопросы более полного описания возможных колебательных режимов, установления возможной взаимосвязи между различными нелинейными колебательными режимами, поддерживаемых одним и тем же кристаллом. Работа Бачуриной О.В. решает эти вопросы для ряда металлов с ГЦК и ГПУ решеткой, внося существенный вклад в разработку этих вопросов, и потому является **актуальной**.

Кратко охарактеризуем **содержание работы** по главам.

Введение включает описание актуальности, целей и задач исследования, методов исследования, формулировку новизны полученных результатов и их научной и практической значимости, положения выносимые на защиту, сведения об апробации полученных результатов на конференциях и об опубликованных автором работах. Завершает введение описание личного вклада автора и сжато дается содержание работы по главам.

Первая глава является обзорной, в ней даются основные сведения о линейных и нелинейных колебаниях кристаллической решетки, включая определение делокализованных нелинейных колебательных мод (ДНКМ) и локализованных колебательных мод – так называемых дискретных бризеров (ДБ). Представлена история открытия и развитие концепции ДБ, описаны примеры ДБ в кристаллах с различным типом химической связи. Завершает главу описание метода молекулярной динамики, который используется в данной работе.

Вторая глава рассматривает нульмерные стержневые ДБ, которые изучались в чистых металлах и ранее. Новизну составляет рассмотрение ГПУ металла бериллия, который ранее не изучался на предмет существования в нем ДБ. Показано, что ГПУ бериллий поддерживает покоящиеся и движущиеся нульмерные стержневые ДБ, аналогичные по своей структуре тем, что были получены ранее в ОЦК и ГЦК металлах.

В третьей главе изучаются ДБ нового типа, а именно, одномерные ДБ в ГЦК металлах – алюминий, медь, никель. Такие ДБ возбуждаются в одном плотноупакованном атомном ряду, в результате чего, колебания данной моды делокализованы вдоль этого ряда и локализованы в плоскости, перпендикулярной ряду. Показано, что одномерные ДБ имеют большое время жизни, их частоты, как и ожидалось, лежат выше фононного спектра и растут с амплитудой колебаний. Рассчитана энергия на атом одномерного ДБ в зависимости от амплитуды.

Четвертая глава посвящена рассмотрению двумерных ДБ в ГЦК и ГПУ металлах, которые раньше никем не изучались. Двумерные ДБ возбуждаются в одной плотноупакованной атомной плоскости, которая представляет собой двумерную треугольную решетку. Для возбуждения данной плоскости используются ДНКМ треугольной решетки, полученные Чечиным с соавторами. Выявлены те из ДНКМ, которые приводят к долгоживущим двумерным ДБ. Установлено, что ДНКМ, в которых имеются неподвижные атомы, не порождают двумерных ДБ. Для полученных двумерных ДБ определены их основные характеристики, такие как частота и энергия на атом в зависимости от амплитуды.

В пятой главе возбуждается нульмерный дискообразный ДБ в ГЦК меди и никеле путем наложения локализующей функции на долгоживущий двумерный ДБ. ДБ такого типа ранее не рассматривались. Показано, что они могут иметь достаточно большое время жизни.

Завершает работу формулировка **основных результатов и выводов.**

Научная новизна работы. В диссертационной работе Бачуриной О.В. получены важные результаты, научная значимость и новизна которых заключается в следующем:

1. Впервые возбуждены ДБ в трехмерной решетке чистых ГЦК и ГПУ металлах;
2. Впервые доказана возможность существования в одном и том же металле ДБ различной пространственной размерности и введена соответствующая классификация;
3. Впервые доказана возможность существования двумерных ДБ с относительно большим временем жизни, возбужденных на основе двумерных ДНКМ в трехмерных ГЦК и ГПУ металлах. Определены характеристики подобных двумерных ДБ.
4. Впервые показана возможность возбуждения дискообразного нульмерного ДБ, полученного путем наложения колоколообразной локализирующей функции на двумерную ДНКМ в трехмерном кристалле.

Научная и практическая значимость работы. В работе разработана достаточно общая методика возбуждения ДБ в металлах с ГПУ и ГЦК решеткой. Применение данной методики показало возможность возбуждения новых ДБ различной пространственной размерности в трехмерных моделях чистых металлов с ГПУ и ГЦК решетками. Установленный факт существования долгоживущих нульмерных, одномерных и двумерных ДБ в одном металле значительно расширяет наше понимание нелинейной динамики кристаллической решетки и представляет несомненный научный интерес.

Достоверность и обоснованность результатов. Достоверность результатов полученных в работе Бачуриной О.В. обеспечивается корректностью поставленных задач, применением хорошо разработанного и зарекомендовавшего себя метода молекулярной динамики, а также использованием многочастичных потенциалов взаимодействия, надежность которых в описании многих нелинейных эффектов была подтверждена ранее

в многочисленных публикациях. Проведен анализ влияния шага интегрирования уравнений движения атомов и размера расчетной ячейки на получаемые результаты. На этом основании можно утверждать, что научные выводы и заключения, сделанные в диссертационной работе, являются обоснованными и достоверными.

Результаты диссертации могут быть использованы в научных организациях и группах, занимающихся вопросами нелинейной физики материалов, а также при разработке теоретических основ создания новых материалов, в том числе, в СГУ (г. Саратов), ИПСМ РАН и ИФМК УНЦ РАН (г. Уфа), ЮФУ (г. Ростов на Дону), АлтГТУ (г. Барнаул) и другие.

Замечания по диссертационной работе:

1. В работе рассматриваются нульмерные, одномерные и двумерные колебательные моды трехмерных кристаллических решеток ряда ГЦК и ГПУ металлов. Полнота изложения предполагает также рассмотрение трехмерных делокализованных колебательных мод, которые, однако, даже не упоминаются в работе. Кроме того, при возбуждении одномерного дискретного брэггера рассмотрена лишь одна колебательная мода, в то время, когда существуют и другие одномерные моды. С чем связан отказ от анализа упомянутых мод?
2. В работе отсутствует обоснование выбора металлов для изучения в них нелинейных колебаний решетки. В дополнение к данному замечанию отметим, что для большинства чистых металлов на сегодняшний день разработано несколько межатомных потенциалов взаимодействия. Автор проводит сопоставление результатов, полученных при помощи двух потенциалов только для титана, хотя имело смысл показать влияние потенциалов для всех рассмотренных материалов.
3. При обозначении физических величин желательно придерживаться известных традиций, в то время как в работе частота обозначается символом омега, который принято использовать для круговой частоты.

Высказанные выше замечания по диссертационной работе Бачуриной О.В. относятся в основном к рекомендациям по дальнейшему развитию данного направления и не меняют общей положительной оценки работы.

В целом, диссертация Бачуриной Ольги Владимировны представляет собой законченную научно-квалификационную работу, в которой изложены результаты научно обоснованных исследований. Основные результаты работы являются новыми, представлены и изложены четко и убедительно. Выводы в работе логически обоснованы и вытекают из полученных результатов. Тема исследования является актуальной, а сама работа выполнена на высоком научном уровне. Автореферат и опубликованные труды автора отражают основные положения диссертационной работы, а результаты исследований прошли широкую апробацию как на отечественных, так и международных конференциях.

Заключение. Диссертационная работа Бачуриной Ольги Владимировны выполнена на актуальную тему и представляет собой законченный научно-исследовательский труд. Полученные результаты обоснованы и достоверны, имеют практическую и научную ценность.

Таким образом, диссертационная работа Бачуриной О.В. «Нелинейные пространственно – локализованные колебательные моды в металлах» соответствует требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, согласно п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г., а соискатель заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Диссертационная работа и настоящий отзыв обсуждены и одобрены на расширенном научном семинаре кафедры «Общая физика» ФГБОУ ВО «Алтайского государственного технического университета им. И.И. Ползунова».

Я, Старостенков Михаил Дмитриевич даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Заведующий кафедрой физики
Федерального государственного
бюджетного образовательного
учреждения высшего образования
“Алтайский государственный
технический университет им.
И.И. Ползунова”, доктор физико-
математических наук, профессор
Тел: 8 (3852) 29-08-52
E-mail: genphys@mail.ru
Адрес: 656038, г. Барнаул,
пр. Ленина, 46

Старостенков М. Д.

Подпись заверяю:

