

## Отзыв

Официального оппонента на диссертационную работу Бачуриной Ольги Владимировны  
«Нелинейные пространственно локализованные колебательные моды в металлах»,  
представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук  
по специальности

01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

**Актуальность темы диссертационной работы.** Исследования в области физики конденсированного состояния традиционно являются основой для создания новых функциональных материалов и устройств с улучшенными или необычными физическими свойствами. Перспективным направлением, в этом отношении, является исследование физических и технологических процессов, в которых металлические материалы подвергаются высокоэнергетическим воздействиям. Такое воздействие, в свою очередь, может вызывать высокоамплитудные колебания атомов кристаллической решетки. При этом, в полной мере проявляется нелинейный характер межатомных взаимодействий и возникает проблема описания каналов рассеяния и механизмов транспорта энергии в кристаллической решетке. Можно ожидать, что значительную роль в этих процессах будут играть именно нелинейные колебания решетки, которые оказываются ответственными за пространственную локализацию колебательной энергии, что способствует преодолению потенциальных барьеров в ходе эволюции дефектной структуры кристаллов. Исследования в данном направлении показали, что нелинейные колебания решетки могут быть как делокализованными, так и пространственно локализованными. Это заставляет искать пути классификации колебаний по различным признакам, включая их пространственную размерность, в кристаллах с различным типом химической связи. Можно также отметить, что в настоящее время, в силу исторических причин, наименее изученными остаются делокализованные и локализованные колебания (дискретные бризеры) в чистых металлах. В этой связи, диссертационная работа Бачуриной О. В., посвященная изучению различных колебательных режимов большой амплитуды в чистых металлах, является **актуальной**.

### Содержание диссертации

Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, содержащих оригинальные результаты, и заключительной части, включающей основные результаты и выводы. Список использованных источников включает 144 наименования. Диссертация изложена на 118 страницах текста, содержит 35 рисунков и 7 таблиц.

Введенная печать  
64  
10.02.2020

**Во введении** делается обзор работ по нелинейной динамике кристаллической решетки, обосновывается актуальность исследования дискретных бризеров в металлах, формулируются цели и задачи исследования, а также научные положения, выносимые на защиту. Описаны новизна, научная и практическая значимость результатов работы, дана информация о числе публикаций структуре и объёме диссертации, отражен личный вклад автора, указаны научные конференции и семинары, на которых обсуждались результаты работы.

**В первой главе** приведен обзор литературы, посвященной исследованию делокализованных нелинейных колебательных мод и дискретных бризеров в различных кристаллических структурах. Рассмотрены имеющиеся классификации дискретных бризеров по различным признакам и впервые предложена классификация на основе их пространственной размерности. Описаны различные потенциалы межатомного взаимодействия, используемые в методе молекулярной динамики, а также современные методы компьютерного моделирования нелинейной динамики кристаллической решетки.

**Во второй главе** с помощью компьютерного моделирования исследована динамика нульмерных дискретных бризеров в трехмерном кристалле ГПУ бериллия, которые в работе предложено называть также «стержневыми». Установлено, что стержневые дискретные бризеры в бериллии могут двигаться вдоль плотноупакованного ряда со скоростью составляющей примерно одну треть от скорости продольных звуковых волн. Найден набор параметров анзаца, который можно использовать для возбуждения дискретных бризеров. Рассчитаны характеристики дискретных бризеров. Показано, что их частота колебаний лежит выше фононного спектра и что степень пространственной локализации у стержневых бризеров в бериллии выше, чем в других металлах.

**В третьей главе** с помощью компьютерного моделирования показана возможность существования устойчивых одномерных дискретных бризеров в трехмерных моделях ГЦК металлов (Al, Cu, Ni). Колебания одномерного дискретного бризера делокализованы вдоль одного плотноупакованного атомного ряда и экспоненциально локализованы с удалением от этого ряда. Рассчитаны фононные спектры малоамплитудных колебаний для исследуемых ГЦК металлов. Получены зависимости времени жизни, частоты и энергии от амплитуды атомных колебаний одномерных бризеров.

**В четвертой главе** с помощью компьютерного моделирования изучаются двумерные дискретные бризеры в трехмерных моделях кристаллов с ГПУ (Ti) и ГЦК (Al, Cu, Ni) решетками. В данном случае колебания большой амплитуды совершают атомы одной плотноупакованной плоскости, и с удалением от этой плоскости амплитуды колебаний экспоненциально убывают. Для возбуждения двумерных бризеров

используются известные делокализованные колебательные моды, найденные ранее, для двумерной треугольной решетки. Моделирование для  $T_i$  проводится при помощи двух разных потенциалов межатомного взаимодействия. Определяются зависимости времени жизни, частоты и энергии всех долгоживущих двумерных дискретных бризеров от амплитуды колебаний.

**В пятой главе** с помощью компьютерного моделирования показано, что на основе двумерных дискретных бризеров в трехмерных моделях ГЦК металлов (Al, Cu, Ni) возможно возбуждение «устойчивых» нульмерных дискретных бризеров нового типа, которые получаются путем наложения локализирующих функций с радиальной симметрией. Впервые вводится понятие дискообразного нульмерного дискретного бризера. Определяется максимальное время их жизни, степень пространственной локализации, эволюция кинетической энергии колеблющихся атомов в зависимости от времени.

**В заключении** приводятся выводы диссертационного исследования.

**Научная новизна** диссертационной работы заключается в том, что в ней **впервые:**

1. Изучены свойства дискретных бризеров нового типа в трехмерных ГЦК и ГПУ решетках чистых металлов.
2. Доказано, что в трехмерных кристаллах могут существовать дискретные бризеры различной пространственной размерности и с различной структурой атомных колебаний.
3. Рассчитаны основные характеристики одномерных и двумерных дискретных бризеров в чистых металлах.
4. На примере ГЦК решеток чистых металлов установлено, какие из делокализованных нелинейных колебательных мод двумерной треугольной решетки могут породить долгоживущие двумерные дискретные бризеры.
5. Путем наложения локализирующей функций на двумерный дискретный бризер, впервые показана возможность возбуждения нульмерных дискообразных дискретных бризеров в металлах с ГЦК решеткой.

#### **Теоретическая и практическая значимость работы**

Фундаментальная научная значимость результатов диссертационной работы заключается в углублении понимания нелинейной динамики кристаллической решетки в чистых металлах. Доказано существование дискретных бризеров различной пространственной размерности в одном и том же кристалле. Модели, описанные в работе, обладают и практической ценностью, так как свойства дискретных бризеров, рассчитанные в работе с помощью методов классической молекулярной динамики, могут применяться для верификации феноменологических потенциалов взаимодействия. Также

результаты диссертации могут быть использованы в учебных целях при подготовке специализированных курсов по физике конденсированного состояния.

**Достоверность и обоснованность** полученных результатов, положений и основных выводов диссертации не вызывает сомнения. Она вытекает из применения надежно апробированного теоретического метода исследований, из достаточно большого объема данных компьютерного эксперимента, физической непротиворечивости полученных результатов. Проведено сравнение полученных результатов с аналогичными исследованиями других авторов. Полученные диссертантом результаты прошли широкую апробацию на профильных международных и российских конференциях, опубликованы в реферируемых журналах, признаны научным сообществом и цитируются, как российскими, так и зарубежными учеными.

**Личный вклад автора** состоит в решении поставленных задач методом молекулярной динамики, в сборе и анализе численных данных, в подготовке рукописей статей.

**Замечания и вопросы**, возникшие при ознакомлении с диссертацией и на которые хотелось бы получить пояснения:

1. Название диссертационной работы является излишне общим, так как в работе исследованы не все «металлы», а только некоторые. В названии работы можно было попытаться более детализировать название решаемых задач.
2. В литературном обзоре отсутствует информация об исследовании дискретных бризеров в магнитных материалах. Или они там еще пока теоретически не исследованы и экспериментально не обнаружены?
3. Результаты диссертационной работы, полученные с помощью теоретических расчетов, сильно бы выиграли, если бы в каждой оригинальной главе было проведено их сравнение с известными экспериментальными результатами, сделаны конкретные предложения по проведению новых экспериментов или прикладного использования полученных результатов.
4. Все теоретические расчеты проведены для случая нулевой температуры. Известно, что для классических дискретных бризеров наличие тепловых колебаний снижает их время жизни. Интересно узнать мнение диссертанта к чему может привести учет в проведенных расчетах произвольного значения температуры, например, для времени жизни одномерных и двумерных дискретных бризеров.
5. В некоторых местах диссертации, ее текст страдает от излишней лаконичности, затрудняющей понимание представленного результата. Например, в оригинальных

главах можно было привести более подробное описание тестовых расчетов с применением графиков; описать, как получена плотность фононных состояний.

6. В главе 4 диссертационной работы рассмотрены все возможные однокомпонентные делокализованные колебательные моды и только одна двухкомпонентная мода. Остается неясным существуют ли другие двухкомпонентные моды и если да, то почему они не были исследованы?
7. Автором представлены дискретные бризеры нового типа в чистых металлах, но остается вопрос: исчерпывают ли описанные типы бризеров все возможные пространственно локализованные формы колебаний решеток чистых металлов?
8. Наконец, мелкие замечания по тексту и оформлению диссертации. Работа не лишена некоторого количества опечаток, орфографических ошибок и неточностей в изложении. Например, на стр. 46 написано «... из рис. 2.2...», а надо «... из рис. 2.3...»; на стр. 49 на рис. 2.6 на вертикальной оси написана размерность  $A/\text{nc}$ , а надо  $A/\text{ps}$ ; на стр. 59 расположен второй рис. 3.3, а должен быть рис. 3.4. В списке использованной литературы номера 2 и 50 совпадают; в номере 96 не указано название журнала; в номере 133 половина текста на русском, половина на английском языке; название журнала *Physical Review* иногда пишется полностью, иногда сокращенно *Phys. Rev.*

Сделанные замечания не снижают общего хорошего впечатления от диссертации, не затрагивают сущности проделанной работы и не влияют на общую положительную оценку работы в целом.

### **Общая оценка диссертационной работы**

Результаты диссертационной работы представляют интерес для исследователей, специализирующихся в области изучения физики кристаллов и нелинейной динамики систем с трансляционной симметрией. В работе есть рекомендации для условий необходимых для возбуждения дискретных бризеров в чистых металлах. Можно рекомендовать результаты диссертационной работы для использования в организациях, занимающихся исследованиями физики кристаллов и нелинейной динамики систем с трансляционной симметрией. В частности, в их числе могут быть следующие научные организации: ИФМ имени М.Н. Михеева УрО РАН, ИФ им. Л.В. Киренского СО РАН - обособленное подразделение ФИЦ КНЦ СО РАН, ИРЭ РАН, ИФМК УФИЦ РАН; образовательные: МГУ, СПбГУ, УрФУ, ЧелГУ, БашГУ и другие.

Представленные в диссертации материалы опубликованы в 9 статьях в научных журналах, входящих в Перечень ВАК, 5 из них входят в базы данных Scopus и Web of Science. Они прошли апробацию на всероссийских и международных научных

конференциях, симпозиумах и семинарах, хорошо известны специалистам. Работа написана понятным научным языком и в целом хорошо оформлена. Автореферат соответствует содержанию диссертации. Актуальность и практическая значимость работы очевидны. Результаты могут быть востребованы как российскими, так и зарубежными исследователями в области физики конденсированного состояния. Представленная диссертация является самостоятельным и завершённым научным исследованием.

Исходя из вышесказанного, считаю, что диссертационная работа «Нелинейные пространственно локализованные колебательные моды в металлах» Бачуриной Ольги Владимировны выполнена на высоком научном уровне и является научно-квалификационным исследованием в области физики конденсированного состояния. По своей актуальности, научно-методическому уровню, научной новизне, достоверности и значимости полученных результатов диссертация, безусловно, соответствует п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», ВАК РФ и п. п. 1 и 7 паспорта специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния», а соискатель заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния».

Я, Екомасов Евгений Григорьевич даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Доктор физико-математических наук (01.04.07), профессор,  
профессор кафедры теоретической физики  
Федерального государственного бюджетного  
образовательного учреждения высшего образования  
Башкирский государственный университет  
Тел.: 8 (347) 273-93-25  
E-mail: ekomasoveg@gmail.com  
450076, Республика Башкортостан,  
г. Уфа, ул. Заки Валиди, д. 32

Екомасов Евгений Григорьевич  
«3» февраля 2020 г.

Подпись *Е. Г. Екомасов*  
Заверяю: ученый секретарь Ученого совета  
Башкирского государственного университета  
*Галия* С.Р. Бачурина  
« 03 » февраля 2020 г.

