

## Отзыв официального оппонента

о диссертационной работе Бачуриной Ольги Владимировны «Нелинейные пространственно-локализованные моды в металлах», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния

Исследование нелинейных процессов в средах различной природы является одним из приоритетов современной науки. В физике конденсированного состояния нелинейные эффекты обусловлены как правило нелинейным характером межатомных взаимодействий и реализуются в материалах, подверженных различным типам интенсивного воздействия, такими как пластическая деформация, нагрев, облучение частицами высокой энергии. Атомы кристаллической решетки в этом случае существенно отклоняются от своих равновесных положений, и нелинейность межатомных связей проявляется в полной мере. Это может приводить к пространственной локализации колебательной энергии, например, в результате возникновения дискретных бризеров (ДБ). В последнее время свойства дискретных бризеров активно изучаются посредством применения метода молекулярной динамики в материалах с различными типами кристаллической решетки и химической связи. Тем не менее, работ, посвященных систематическому изучению разнообразных видов таких долгоживущих пространственно-локализованных колебательных мод в чистых металлах, до сих пор не проводилось. Поэтому выяснение условий существования и свойств дискретных бризеров различной пространственной размерности в трехмерных моделях чистых металлов, представляющее основную задачу настоящей диссертационной работы, несомненно является **актуальной задачей** нелинейной физики твердого тела и представляет интерес для широкого круга исследователей.

Проанализируем кратко содержание диссертации О.В.Бачуриной.

Она включает Введение, пять глав, Заключение и список цитируемой литературы, содержащий 144 ссылки.

Во Введении обоснована актуальность научного направления исследования, описана степень разработанности научной темы диссертации, сформулированы цель и основные задачи исследования, а также научные положения, выносимые на защиту. Обоснованы новизна, научная и практическая значимость результатов работы, дана информация о числе публикаций, структуре и объёме диссертации, отражен личный вклад автора, указаны конференции и семинары, на которых были представлены результаты диссертационной работы.

В первой главе дан обзор литературных источников по теме диссертации и современным методам компьютерного моделирования нелинейной динамики кристаллической решетки. Уделено внимание рассмотрению различных потенциалов, описывающих взаимодействие между атомами решетки, и методам компьютерного моделирования. Работа построена на проведении анализа дискретных бризеров в зависимости от их пространственной размерности.

Вторая глава посвящена исследованию немобильных и движущихся нульмерных дискретных бризеров. Все численные характеристики получены для трехмерного кристалла ГПУ бериллия. Возбуждение дискретных бризеров при моделировании обеспечивается заданием начальных условий в виде периодической во времени и локализованной в пространстве функции, вид которой физически обоснован, и для которой в работе определяется набор необходимых значений параметров. В результате моделирования рассчитываются частота и характерный размер пространственной локализации дискретных бризеров, а также максимальная скорость их движения.

Третья глава представляет результаты моделирования одномерных дискретных бризеров в трехмерных ГЦК металлах (алюминий, медь, никель). Под одномерными дискретными бризерами понимаются бризеры, которые делокализованы вдоль одного направления в кристалле и локализованы вдоль двух других. В таких бризерах колебания совершают атомы одного плотноупакованного ряда вдоль этого ряда, при этом амплитуды колебаний всех атомов одинаковы, и каждый атом колеблется в противофазе с ближайшими соседями. В процессе моделирования рассчитываются зависимости времени жизни, частоты и энергии дискретных бризеров от амплитуды колебаний атомов решетки.

Четвертая глава посвящена изучению двумерных дискретных бризеров в ГПУ (титане) и ГЦК металлах (алюминий, медь, никель). Двумерными дискретными бризерами названы бризеры, которые, в отличие от рассмотренных в предыдущей главе одномерных бризеров, делокализованы вдоль двух направлений в кристалле и локализованы вдоль одного. Колебания большой амплитуды совершают атомы одной плотноупакованной плоскости кристалла, которая представляет собой двумерную треугольную решетку. Возбуждение двумерных бризеров происходит на основе одной из восьми однокомпонентных или двухкомпонентной делокализованной колебательной моды треугольной решетки. Выявлены те делокализованные моды, которые порождают долгоживущие двумерные бризеры в рассмотренных трехмерных решетках. Для выяснения зависимости результатов моделирования от выбора типа межатомного потенциала, расчеты для титана проводятся для двух известных потенциалов

взаимодействия. Определены амплитудные зависимости времени жизни, частоты и энергии всех обнаруженных двумерных дискретных бризеров.

В пятой главе изучается возможность существования в ГЦК металлах (медь, никель) долгоживущих нульмерных дискретных бризеров нового типа, которые в компьютерном эксперименте возбуждаются путем наложения на двумерные дискретные бризеры локализирующих функций с радиальной симметрией. Такие бризеры названы в работе дискообразными. В никеле возбудить долгоживущий дискообразный бризер автору удалось, а попытки возбуждения такого бризера в алюминии окончились неудачей. Для реализованных дискообразных ДБ рассчитаны время жизни, степень пространственной локализации, а также подробно исследована временная зависимость кинетической энергии атомов, участвующих в колебаниях.

В Заключении автором сформулированы основные выводы, обобщающие результаты проведенных в диссертационной работе исследований. Среди них хотелось бы отметить следующие, определяющие главным образом **новизну исследований и научную и практическую значимость работы:**

посредством методов молекулярной динамики показана возможность существования дискретных бризеров различной пространственной размерности и с различной структурой атомных колебаний в трехмерных кристаллических решетках ГПУ и ГЦК металлов,

изучены свойства нульмерных дискретных бризеров в чистом ГПУ бериллии, в компьютерном эксперименте возбуждены новые типы дискретных бризеров (обозначенных как одномерные и двумерные) и определены их характеристики,

впервые на основе делокализованных колебательных мод путем наложения на них локализирующей функций показана возможность возбуждения нульмерных дискообразных дискретных бризеров в ГЦК никеле.

Результаты, полученные в диссертационной работе Бачуриной О.В., могут **представлять интерес** для динамики нелинейных систем с дискретной симметрией, а также **быть полезными** в области физики кристаллов для объяснения некоторых аномальных свойств кристаллических решеток.

**Обоснованность и достоверность** результатов, научных положений, выводов и заключений соискателя обеспечиваются корректностью поставленных задач, использованием для их решения широко известного, хорошо апробированного и свободно распространяемого пакета для молекулярно-динамических расчетов LAMMPS, а также обоснованным выбором современных потенциалов межатомного взаимодействия.

Основные результаты работы опубликованы в 9 статьях, входящих в список научных журналов ВАК, из них 5 в научных журналах, индексируемых в Scopus и/или Web of Science.

**Личный вклад автора** состоит в проведении молекулярно-динамических расчетов, необходимых для решения поставленных задач, анализе полученных результатов моделирования, подготовке научных публикаций.

#### **По результатам диссертации можно сделать ряд замечаний**

1) В главе 5 представлены результаты успешного возбуждения в ходе моделирования устойчивых нульмерных дискообразных ДБ в ГЦК металлах путем наложения на двумерные бризеры локализирующих функций. Такие бризеры очевидно являются неподвижными. К сожалению, возможность выбора набора начальных значений параметров, при которых дискообразные бризеры могут быть подвижными, не обсуждается. Также не обсуждается вопрос о поиске условий возбуждения подвижных одномерных дискретных бризеров, хотя обе задачи логически следуют из полученных в работе результатов. Представляется, что какая-то информация о возможных мобильных дискообразных ДБ и одномерных ДБ в работе должна была бы быть приведена.

2) На Рисунке 4.4 (б) дана зависимость амплитуды установившихся колебаний делокализованных мод от начальной амплитуды. Для одной из мод наблюдается парадоксальный, на первый взгляд, эффект – установившаяся амплитуда превышает начальную. Как это можно объяснить, учитывая, что делокализованные моды всегда теряют часть своей энергии в процессе эволюции?

3) Можно предъявить некоторую претензию к завершенности проведенных исследований. Представляется, что было бы целесообразно провести анализ всех обозначенных видов дискретных бризеров различной пространственной размерности для всех выбранных в работе металлов, таким образом, устранив пробелы и полностью заполнив таблицу 7 (стр. 102).

Сделанные замечания не затрагивают существа диссертационной работы О.В.Бачуриной и не влияют на ее общую положительную оценку. Более того, большая часть из них носит скорее характер рекомендаций о продолжении проведенных исследований.

Таким образом, диссертационная работа Бачуриной О.В. является цельным научным исследованием, посвященным актуальной научной проблеме, и содержит важные научные результаты, наиболее интересные из которых отмечены выше.

Диссертация написана ясным научным языком, логически выстроена, хорошо проиллюстрирована. Заявленная цель достигнута, поставленные задачи решены.

Полученные результаты достоверны и опубликованы в периодических изданиях и апробированы на научных Всероссийских и Международных конференциях, причем все основные результаты опубликованы в изданиях, рекомендованных ВАК РФ для публикации результатов диссертационных исследований

Содержание автореферата соответствует содержанию диссертации.

Содержание работы и представленные результаты соответствует паспорту специальности 01.04.07 Физика конденсированного состояния, физико-математические науки.

Полученные результаты обоснованы и достоверны, имеют практическую и научную ценность.

Полагаю, что диссертационная работа «Нелинейные пространственно – локализованные колебательные моды в металлах» удовлетворяет всем требованиям п.п. 9-11, 13, 14 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденным Постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013 г., а ее автор, Бачурина Ольга Владимировна, заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – Физика конденсированного состояния.

Я, Четвериков Александр Петрович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Официальный оппонент:

доктор физико-математических наук по специальности 01.04.03–Радиофизика, профессор, профессор кафедры радиофизики и нелинейной динамики физического факультета ФГБОУ ВО «СГУ имени Н.Г. Чернышевского»

Александр Петрович Четвериков

e-mail: ChetverikovAP@info.sgu.ru

тел. +7(8452)514688, моб. 89063162264



Физический факультет

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского»,

410012, г. Саратов, ул. Астраханская, 83, корпус 8. Телефон: +7 (8452) 514688, e-mail: fiz@sgu.ru