

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации
Абдуллиной Дины Ураловны

«Линейная и нелинейная динамика кристаллов со структурой В2 (CsCl)»,
представленной к защите на соискание учёной степени кандидата физико-математических
наук по специальности 1.3.8 – «Физика конденсированного состояния»

Диссертационная работа Д.У. Абдуллиной посвящена теоретическому исследованию нелинейных колебательных явлений в кристаллах со сверхструктурой типа В2 (CsCl). Основное внимание уделено делокализованным нелинейным колебательным модам (ДНКМ) и дискретным бризерам (ДБ) – локализованным долгоживущим колебаниям большой амплитуды, которые могут возникать за счёт сочетания нелинейности и дискретности решётки. Изучение таких мод важно для понимания фундаментальных механизмов переноса энергии, теплопроводности, фазовых переходов и дефектообразования в упорядоченных бинарных соединениях. Кристаллы со структурой В2 широко применяются как жаропрочные сплавы, материалы с памятью формы и компоненты электроники, однако их нелинейная динамика оставалась практически неизученной. Поэтому тема диссертации, безусловно, актуальна как с фундаментальной, так и с прикладной точек зрения.

Основные достоинства работы:

Актуальность и практическая значимость. Автором впервые систематически исследованы условия возникновения дискретных бризеров в кристаллах В2 с учётом дальнедействующих межатомных взаимодействий (вплоть до четвёртой координационной сферы). Показано, что варьирование соотношения атомных масс и жёсткостей связей позволяет управлять типом нелинейности (жёсткая/мягкая) и существованием щели в фоннном спектре, а следовательно – возможностью возбуждения щелевых ДБ. Практическая значимость состоит в том, что полученные частотные диапазоны могут быть использованы для интерпретации экспериментов по неупругому рассеянию нейтронов и рентгеновских лучей, а также для прогнозирования транспорта энергии в реальных кристаллах (CsCl, LiPb, NiTi и др.).

Методика работы. Исследование опирается на сочетание аналитических методов (вывод дисперсионных соотношений, теоретико-групповой анализ ДНКМ) и численного моделирования. Для моделирования нелинейной динамики использовалась модель β -ФПУЦ, а также метод молекулярной динамики с реалистичными многочастичными потенциалами (EAM) в пакете LAMMPS. Автореферат демонстрирует логичную и стройную методологию: от простой модельной системы к расчётам для конкретных кристаллов, что обеспечивает высокую достоверность результатов.

Научная новизна. В работе впервые:

– рассчитан фоннный спектр кристалла В2 с учётом взаимодействий вплоть до четвёртых соседей, аналитически определены границы щели в спектре и условия существования щелевых ДБ;

– выявлены закономерности влияния атомных масс и жёсткостей связей на амплитудно-частотные характеристики ДНКМ;

– доказано, что учёт дальнедействия приводит к появлению новых типов ДБ, которые не возможны в моделях с ближайшими соседями;

– впервые методом молекулярной динамики получены АЧХ ДНКМ для CsCl, LiPb и NiTi, а в кристалле LiPb впервые описан долгоживущий щелевой дискретный бризер.

Достоверность и апробация. Достоверность обеспечена строгостью аналитических выкладок, непротиворечивостью результатов численных экспериментов, а также согласием с известными предельными случаями. По теме диссертации опубликовано 11 статей, из которых 3 – в журналах из перечня ВАК РФ и 8 – в изданиях, индексируемых в Scopus и Web of Science. Результаты хорошо известны специалистам, т.к. докладывались на многих российских и международных конференциях.

Замечание (пожелание) по автореферату:

При общей высокой оценке работы хотелось бы отметить, что в автореферате (раздел 4, стр. 16–18) при обсуждении немонотонного поведения частотных характеристик ДНКМ в кристалле NiTi и резкого скачка частот в LiPb при $A > 0,3 \text{ \AA}$ автор связывает эти аномалии с возможными погрешностями межатомных потенциалов. Было бы полезно более чётко указать, возможна ли в дальнейшем верификация этих эффектов с помощью независимых подходов (например, расчётов из первых принципов) или оценка влияния типа потенциала на полученные выводы о существовании ДБ. Впрочем, это замечание не снижает общей ценности диссертации и может рассматриваться скорее как пожелание к дальнейшим исследованиям.

Заключение:

Высказанное замечание не влияет на общую положительную оценку работы. Диссертация Д.У. Абдуллиной является законченным, оригинальным научным исследованием, выполненным на высоком теоретическом и вычислительном уровне. Работа обладает несомненной научной новизной и практической значимостью, соответствует паспорту специальности 1.3.8 – «Физика конденсированного состояния» и удовлетворяет всем требованиям пунктов 9–14 «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 (в действующей редакции). Соискатель Абдуллина Дина Ураловна заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – «Физика конденсированного состояния».

Даю свое согласие на обработку персональных данных.

Профессор кафедры теоретической физики

Физико-технического института

ФГБОУ ВО "Уфимский университет

науки и технологий",


д.ф.-м.н., проф.

01.04.07. физика конденсированного состояния

адрес: 450076, г. Уфа, ул. Заки Валиди,

e-mail: EkomasovEG@gmail.com

тел. +7 347 273-93-25

 Екомасов Евгений Григорьевич

«25» мая 2026 г



Екомасова Е. Г.
документ № «25» 05 2026 г.
специалист общего отдела УУНИТ Т. П.
Т. П.