

## «УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по научной работе  
ФГБОУ ВО «Челябинский  
государственный университет»  
кандидат химических наук,



Бирюков А.И.

2026 г.

## ОТЗЫВ

ведущей организации – Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Челябинский государственный университет» на диссертацию Абдуллиной Дины Ураловны «Линейная и нелинейная динамика кристаллов со структурой В2 (CsCl)», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

### Актуальность исследования

Изучение нелинейных колебательных явлений в кристаллических решётках является одной из фундаментальных задач физики конденсированного состояния. Открытие дискретных бризеров (ДБ) – долгоживущих локализованных колебаний атомов большой амплитуды – и их связи с делокализованными нелинейными колебательными модами (ДНКМ) поставило новые вопросы об их влияния на макроскопические свойства кристаллов. Однако для обширного класса кристаллов со структурой В2 (типа CsCl), имеющих важное прикладное значение (жаропрочные сплавы, материалы с памятью формы, компоненты электроники), до настоящего времени отсутствовало систематическое описание свойств ДНКМ и ДБ с учётом дальнодействующих межатомных взаимодействий и различия в атомных массах компонентов. Диссертационная работа Д.У. Абдуллиной, направленная на теоретическое описание фононных спектров, ДНКМ и ДБ в

таких кристаллах, является актуальной и имеет существенное значение для развития физики конденсированного состояния и нелинейной динамики решёток.

### **Общая характеристика работы**

Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения и списка литературы из 209 наименований. Общий объём работы – 127 страниц, включая 42 рисунка и 4 таблицы.

**Введение** содержит обоснование актуальности исследования, цель работы, решаемые задачи, научную новизну полученных результатов, их теоретическую и практическую значимость, методологию исследования и положения, выносимые на защиту.

**Глава 1** представляет собой содержательный обзор литературы по кристаллам со структурой В2, их физико-механическим свойствам, а также по теоретическим основам нелинейной динамики решёток (фононные спектры, ДНКМ, ДБ, явление супратрансмиссии). Обосновывается необходимость учета дальнедействующих связей при анализе ионных и металлических кристаллов. Отмечается, что для кристаллов семейства CsCl систематические исследования ДНКМ и ДБ ранее не проводились.

**Глава 2** посвящена анализу линейной и нелинейной динамики кристалла В2 с потенциалом  $\beta$ -ФПУЦ с учётом взаимодействий до четвёртых соседей. Выведены аналитические выражения для фононного спектра и ширины щели, получены условия существования щелевых ДБ в терминах жесткостей межатомных связей и отношения атомных масс компонентов. В приближении кубической нелинейности получены аналитические выражения для амплитудно-частотных характеристик некоторых ДНКМ, обсуждается характер их нелинейности (мягкий или жесткий) в зависимости от параметров межатомного потенциала. Показано, что учёт дальнедействия приводит к появлению новых типов ДБ. Изучено явление супратрансмиссии при периодическом внешнем воздействии на поверхность кристалла.

**Глава 3** посвящена исследованию движущихся щелевых ДБ в той же модели, что рассматривалась в главе 2. Предложен метод поиска начальных условий для их возбуждения путём наложения функции локализации на

ДНКМ с введением сдвига фазы колебаний соседних атомов. Впервые для структуры CsCl продемонстрирована возможность существования подвижных щелевых ДБ с жёстким типом нелинейности. Изучена зависимость скорости ДБ от параметров возбуждения.

**Глава 4** содержит сравнительное молекулярно-динамическое исследование свойств ДНКМ в трёх кристаллах со структурой В2 – CsCl, LiPb и NiTi – с использованием реалистичных многочастичных потенциалов. Рассчитаны амплитудно-частотные характеристики ДНКМ, выделены те из них, которые имеют частоты вне фононного спектра, что позволяет находить новые типы ДБ. Показано, что большая разница атомных масс в CsCl и LiPb приводит к формированию широкой запрещённой зоны, тогда как в NiTi щель отсутствует. В кристалле LiPb впервые продемонстрировано возбуждение долгоживущего щелевого ДБ.

В заключении сформулированы **основные результаты работы** и намечены перспективы дальнейших исследований.

#### **Научная новизна**

1. Впервые рассчитан и проанализирован фононный спектр биатомного кристалла со структурой В2 с учётом взаимодействий вплоть до четвёртых соседей. Аналитически определены границы щели в фононном спектре и условия существования щелевых ДБ.

2. Впервые показано, что учёт дальнедействующих взаимодействий в кристаллах со структурой В2 приводит к возможности существования новых типов дискретных бризеров, не реализуемых в модели ближайших соседей.

3. Впервые теоретически предсказана и методом молекулярной динамики продемонстрирована возможность существования движущихся щелевых ДБ с жёстким типом нелинейности в структуре В2.

4. Проведено систематическое сравнительное исследование нелинейных свойств трёх кристаллов со структурой В2 (CsCl, LiPb и NiTi) с использованием реалистичных межатомных потенциалов. Впервые описаны ДНКМ и ДБ в кристалле LiPb.

## **Теоретическая и практическая значимость работы**

Теоретическая значимость заключается в создании систематического подхода к описанию линейной и нелинейной динамики кристаллов со структурой В2, учитывающего дальное действие межатомных взаимодействий и соотношение масс компонентов. Полученные аналитические выражения для фононного спектра и условий существования щелевых ДБ имеют общетеоретическое значение для физики конденсированного состояния.

Практическая значимость определяется тем, что полученные результаты позволяют предсказывать существование различных типов ДБ в обширном семействе кристаллов В2 (CuBe, AuZn, CsCl, SrS, AgMg и др.) и служат основой для целенаправленного поиска этих нелинейных возбуждений с помощью современных экспериментальных методов (неупругое рассеяние нейтронов, рентгеновская дифракция). Выявленные механизмы локализации и транспорта колебательной энергии посредством движущихся ДБ открывают перспективы для понимания и управления тепловыми и механическими свойствами кристаллов на микро- и наноуровне.

## **Достоверность и надежность результатов**

Научные результаты обладают высокой степенью достоверности, что обеспечивается использованием строгих аналитических методов вывода фононных спектров, применением корректных и апробированных методов численного моделирования (метод Штормера, пакет LAMMPS), проведением расчётов как с модельными ( $\beta$ -ФПУЦ), так и с реалистичными межатомными потенциалами (EAM), а также согласием полученных результатов с известными литературными данными для аналогичных систем. Надёжность результатов подтверждается их непротиворечивостью основным физическим закономерностям и воспроизводимостью в независимых расчётах.

Основные результаты диссертации опубликованы в 11 статьях, из которых 8 индексируются в базах Web of Science и Scopus, и неоднократно докладывались на российских и международных конференциях.

Автореферат точно отражает содержание диссертации.

## Некоторые замечания

1. В главе 2 при исследовании супратрансмиссии используется модель внешнего воздействия в виде жёсткого движения двух приповерхностных атомных плоскостей. Желательно было бы обсудить, насколько эта модель адекватна реальному лазерному облучению поверхности, и каковы её ограничения.

2. В третьей главе для возбуждения движущихся ДБ вводится параметр фазового сдвига  $\theta$ , от которого зависит скорость бризера. Из приведённых данных не вполне ясно, как этот параметр может быть реализован в физическом эксперименте и связан с реальными характеристиками внешнего воздействия.

3. В четвёртой главе при обсуждении амплитудно-частотных характеристик LiPb (рис. 4.2) отмечается резкий скачок частот при амплитуде  $A = 0,3 \text{ \AA}$ , который связывается с возможной погрешностью межатомного потенциала. Следовало бы провести дополнительный анализ для подтверждения этого предположения или дать более чёткое физическое объяснение.

4. Из диссертации не совсем понятно согласуются ли фононные спектры и свойства бризеров, полученные с помощью молекулярно-динамических расчетов, с известными литературными данными, полученными с помощью теории функционала плотности. Проводились ли такие сравнения?

5. Можно ли из фононного спектра определить поддерживает ли рассматриваемый кристалл дискретные бризеры или нет?

6. По результатам проделанной работы следовало бы сформулировать выводы общего характера о возможном влиянии ДБ на макроскопические свойства кристаллов.

Указанные замечания носят рекомендательный характер и не снижают общей высокой оценки диссертационной работы.

## Заключение

Диссертационная работа Абдуллиной Дины Ураловны «Линейная и нелинейная динамика кристаллов со структурой B2 (CsCl)» является

завершённой научно-квалификационной работой, в которой содержится решение актуальной научной задачи – теоретического описания линейной и нелинейной динамики бинарных кристаллов со структурой В2, включая аналитическое описание фононных спектров, описание свойств делокализованных нелинейных колебательных мод и дискретных бризеров с учётом дальнодействующих межатомных взаимодействий.

По своей актуальности, научной новизне, объёму и достоверности полученных результатов, практической значимости и уровню апробации диссертация соответствует требованиям пунктов 9–14 «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённого Постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г. (в действующей редакции), предъявляемым к диссертациям на соискание учёной степени кандидата наук, а её автор, Абдуллина Дина Ураловна, заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Отзыв обсуждён и утверждён на заседании кафедры физики конденсированного состояния ФГБОУ ВО «ЧелГУ» (протокол № 7 от «18» 05 2026 г.).

Доктор физико-математических наук,  
профессор, заведующий кафедрой  
физики конденсированного состояния,

/ Бучельников В.Д. /

Доктор физико-математических наук,  
доцент, ведущий научный сотрудник  
кафедры физики конденсированного  
состояния,

/ Загребина М.А. /



Подпись  
Удостоверяю

*Бучельников В.Д.*  
*Загребина М.А.*  
*ведущий научный сотрудник*