

## ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Абдуллиной Дины Ураловны «Линейная и нелинейная динамика кристаллов со структурой B2 (CsCl)», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

**Актуальность темы исследования.** Изучение нелинейных эффектов в модельных и кристаллических решетках, которые существенно сказываются на их свойствах, активно проводится на протяжении последних десятилетий. Одним из важных феноменов, открытых Долговым в 1986 году, является существование в нелинейных решетках дискретных бризеров (ДБ), представляющих собой локализованные на небольшой группе частиц (атомов) колебания большой амплитуды с основной частотой, лежащей вне фононного спектра решетки. ДБ важны в физике конденсированного состояния, поскольку они способны осуществлять транспорт энергии в концентрированной форме, вносить вклад в рассеяние фононов, в теплоемкость и тепловое расширение решетки. Многие важные свойства ДБ были установлены из анализа одномерных нелинейных цепочек, однако с повышением размерности решетки возникают новые интересные особенности ДБ, важные для изучения. Межатомные взаимодействия в металлах и ионных кристаллах могут простираются на несколько координационных сфер, что делает важным учет дальнего действия. Кристаллы со структурой B2 (типа CsCl) представляют собой обширный класс материалов, включающий как ионные кристаллы (CsCl, SrS), так и интерметаллиды (NiAl, NiTi, LiPb, CuBe), многие из которых находят широкое практическое применение. Систематическое исследование нелинейной динамики таких кристаллов с учетом дальнего действия и различия атомных масс компонентов ранее не проводилось. Таким образом, задача, решаемая в представленной диссертации, является актуальной и важной.

**Структура и содержание работы.** Диссертация Абдуллиной Д.У. объемом 127 страниц включает введение, четыре главы, три из которых содержат оригинальные результаты, заключение и список литературы из 209 наименований.

Во **введении** описана изучаемая проблема, обоснована актуальность данного исследования, проанализирована степень разработанности и указаны нерешенные задачи, сформулирована цель исследования и задачи, решение которых привело к достижению поставленной цели, выдвинуто пять пунктов научной новизны полученных результатов, представлены теоретическая и практическая значимость работы, сформулированы положения, выносимые на защиту, обоснована достоверность результатов, даны сведения об апробации работы, личном вкладе автора, о числе и качестве опубликованных соискателем статей, о поддержке работы грантами Российского научного фонда, о структуре и объеме диссертации.

**Первая глава посвящена** обзору работ по кристаллам со структурой В2 и нелинейной динамике решетки. Даны основные определения изучаемых объектов – ДБ и делокализованных нелинейных колебательных мод (ДНКМ). Указано на тесную связь между ДБ и ДНКМ; говорится о важности учета дальнего действия между частицами решетки, поскольку они реализуются в кристаллах с металлической и ионной связью. Описан эффект супратрансмиссии, состоящий в возбуждении ДБ в нелинейной решетке при внешнем периодическом воздействии достаточно большой амплитуды на частоте вне фононного спектра. Описаны группы ДНКМ для структуры В2, свойства которых изучаются в диссертации. Дана математическая формулировка модели кристалла В2 с учетом взаимодействий в первых четырех координационных сферах, которые описываются классическим нелинейным потенциалом  $\beta$ -Ферми-Паста-Улама-Цингу ( $\beta$ -ФПУЦ).

Во **второй главе** исследуются свойства ДНКМ и ДБ в кристалле В2 с потенциалом  $\beta$ -ФПУЦ. Выписаны гамильтониан и уравнения движения с учетом взаимодействия частиц до четвертой координационной сферы.

Уравнения движения линеаризуются и выводится дисперсионное соотношение для линейных волн. Получены аналитические выражения для частот ДНКМ в малоамплитудном пределе (2.9)–(2.13). Анализ этих выражений позволил выявить условия, при которых в фоновом спектре возникает щель (2.14)–(2.15), а также условия существования долгоживущих ДБ (2.31) и (2.19). Далее, с помощью наложения функции локализации на ДНКМ с частотами вне фонового спектра, получены щелевые ДБ для жесткого и мягкого типов нелинейности. Изучено явление супратрансмиссии при периодическом внешнем воздействии на поверхность кристалла. Показано, что при частотах внешнего воздействия в щели или выше фонового спектра и достаточно большой амплитуде происходит квазипериодическая генерация ДБ, движущихся вглубь кристалла.

В третьей главе исследуются свойства движущихся щелевых ДБ в структуре В2. Предложен метод возбуждения движущихся ДБ путем наложения функции локализации на ДНКМ  $G1a$  с введением фазового сдвига. Впервые для структуры В2 продемонстрирована возможность существования подвижных щелевых ДБ с жестким типом нелинейности. Изучена зависимость скорости движения ДБ от параметра фазового сдвига  $\theta$ ; показано, что скорость возрастает с увеличением  $\theta$ .

В четвертой главе методом молекулярной динамики с использованием реалистичных многочастичных потенциалов (ЕАМ) проведено сравнительное исследование нелинейных свойств трех кристаллов со структурой В2: CsCl, LiPb и NiTi. Рассчитаны амплитудно-частотные характеристики ДНКМ для всех групп. Показано, что большая разница атомных масс в CsCl и LiPb приводит к формированию широкой запрещенной зоны, тогда как в NiTi щель отсутствует. Установлено, что тип нелинейности (жесткий/мягкий) зависит как от типа возбуждаемой подрешетки, так и от конкретной ДНКМ. В кристалле LiPb впервые продемонстрировано возбуждение долгоживущего щелевого ДБ на основе ДНКМ группы  $G1$ , возбужденной на тяжелых атомах свинца.

В **заключении** сформулированы основные выводы и результаты работы, а также намечены перспективы дальнейших исследований.

В рамках работы получен целый ряд **новых и важных результатов** о ДНКМ и ДБ в кристаллах со структурой В2. Среди них выделим следующие:

– впервые рассчитан и проанализирован фононный спектр биатомного кристалла со структурой В2 с учетом взаимодействий до четвертых соседей; получены аналитические выражения, определяющие условия существования и ширину щели в фононном спектре в зависимости от соотношения атомных масс компонентов;

– доказано, что учет дальнего действия приводит к возможности существования новых типов ДБ, которые не реализуются в модели только ближайших соседей;

– впервые для структуры В2 продемонстрирована возможность существования движущихся щелевых ДБ с жестким типом нелинейности; изучена зависимость скорости движения ДБ от параметров возбуждения;

– проведено систематическое сравнительное исследование нелинейных свойств трех кристаллов со структурой В2 (CsCl, LiPb, NiTi) с использованием реалистичных межатомных потенциалов; впервые описаны ДБ в кристалле LiPb.

**Достоверность** результатов исследования и обоснованность научных положений и выводов обеспечена грамотной постановкой цели и задач, системным характером проведения исследования, применением современных теоретических методов физики конденсированного состояния, использованием известных аналитических методов анализа линейных и нелинейных уравнений движения частиц, проверкой аналитических результатов с помощью численного моделирования, а также согласием полученных результатов с имеющимися в литературе данными для аналогичных систем.

**Теоретическая и практическая значимость** результатов не вызывает сомнений. Теоретическая значимость состоит в установлении **новых**

закономерностей нелинейной динамики кристаллов со структурой В2, связанных с учетом дальнего действия и соотношения масс компонентов. Полученные в работе результаты могут быть использованы для анализа других кристаллов с дальнедействующими взаимодействиями, что важно для физики кристаллов с ионной или металлической связью. Практическая значимость заключается в том, что 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 экспериментальными методами.

**Оформление диссертации.** Диссертация оформлена в соответствии с требованиями ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Структура диссертации выстроена логично и последовательно. Работа написана грамотным научным языком, хорошо иллюстрирована (42 рисунка, 4 таблицы). Содержание автореферата полностью соответствует тексту диссертации.

**Соответствие паспорту специальности.** Диссертация полностью соответствует паспорту научной специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния (пункты 1, 2 и 7).

Все основные результаты диссертационной работы опубликованы в ведущих международных рецензируемых журналах, рекомендованных ВАК РФ и проиндексированных в международных базах Web of Science и Scopus. По теме работы опубликовано 11 статей, из которых 3 – в журналах из перечня ВАК РФ, а 8 статей входят в международные базы цитирования Web of Science и/или Scopus.

По диссертационной работе можно сформулировать следующие **вопросы и замечания:**

1. Описание модели кристалла В2 и методов моделирования приведено в конце первой обзорной главы (раздел 1.8) и во второй главе. Считаю, что более уместно было бы вынести полное описание модели в

начало второй главы, где излагаются оригинальные результаты автора, что позволило бы избежать некоторого дублирования.

2. В работе рассмотрены как жесткий, так и мягкий типы нелинейности (положительные и отрицательные значения параметров  $\beta$ ). Однако для кристалла LiPb в четвертой главе наблюдается смешанный тип нелинейности, зависящий от амплитуды. Чем обусловлен такой переход от жесткого к мягкому типу нелинейности для некоторых ДНКМ в реальных кристаллах?

3. При аналитическом выводе частот ДНКМ в малоамплитудном пределе (формулы 2.9–2.13) не учитывается зависимость частоты от амплитуды, которая возникает даже при нулевых нелинейных коэффициентах  $\beta$  (геометрическая нелинейность). Анализировался ли вклад геометрической нелинейности в формирование АЧХ ДНКМ и в возникновение ДБ?

4. На рисунке 4.8 (глава 4) при возбуждении ДБ в LiPb с параметрами  $A_1 = 0,60 \text{ \AA}$  наблюдается заметное возбуждение атомов легкой подрешетки и тенденция к движению ДБ. Однако из текста не ясно, исследовалась ли устойчивость полученных ДБ при более длительном моделировании (более 20 пс) и какова оценка их времени жизни.

5. С чем связана высокочастотная составляющая в движении атомов для ДБ, изображенных на рисунках 4.7 и 4.8? Можно ли эту составляющую интерпретировать как возбуждение высших гармоник?

Сделанные замечания имеют характер пожеланий, не снижают общее положительное впечатление от работы и не ставят под сомнение ее актуальность, новизну и научную значимость.

**Заключение.** Диссертационная работа Абдуллиной Д.У. является законченным научным исследованием, выполненным на актуальную тему, вносящим заметный вклад в изучение нелинейной динамики кристаллов, с учетом новизны и практической значимости полученных результатов. Все основные результаты и выводы диссертационной работы отражены в

автореферате. Имеется достаточное количество публикаций в изданиях, рекомендованных ВАК, индексируемых базами данных Web of Science и Scopus. Выносимые на защиту положения, новизна и выводы тщательно проработаны и обоснованы. Диссертационная работа удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым ВАК РФ к кандидатским диссертациям (пп. 9–14 Положения о присуждении ученых степеней, Постановление Правительства РФ от 24 сентября 2013 г. № 842), а ее автор, Абдуллина Дина Ураловна, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент:  
профессор кафедры «Высшая математика-1» Национального исследовательского университета «МИЭТ», профессор,  
доктор физико-математических наук по специальности  
01.01.02 — Дифференциальные уравнения, динамические системы и оптимальное управление



Алфимов Георгий Леонидович

« 25 » мая 2026 г.

Адрес места работы: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники», 124498, Москва, г. Зеленоград, пл. Шокина, д. 1.

Телефон: +7 (499) 731-44-41

<http://miet.ru>,

e-mail: [netadm@miee.ru](mailto:netadm@miee.ru)

E-mail оппонента: [galfimov@yahoo.com](mailto:galfimov@yahoo.com)

Ученый секретарь Ученого совета

НИУ МИЭТ

К.т.н., доцент



 Козлов Антон Викторович

Я, Алфимов Георгий Леонидович, даю свое согласие на обработку и передачу персональных данных, представляемых мною в диссертационный совет 21.2.308.01

« 25 » мая 2026 г.



/Алфимов Г.Л./