

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Абдуллиной Дины Ураловны «Линейная и нелинейная динамика кристаллов со структурой В2 (CsCl)», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа Абдуллиной Дины Ураловны посвящена теоретическому исследованию линейных и нелинейных колебательных явлений в кристаллах со структурой В2 (типа CsCl), что является актуальной задачей физики конденсированного состояния. Интерес к данной проблеме обусловлен тем, что дискретные бризеры (ДБ) – долгоживущие локализованные колебания большой амплитуды – могут играть существенную роль в процессах транспорта энергии, пластической деформации, фазовых переходах и теплопроводности кристаллов. Экспериментальное обнаружение ДБ в кристаллах является сложной задачей, требующей использования дорогостоящих методов (неупругое рассеяние нейтронов, рентгеновская дифракция) и кристаллов высокой чистоты, поэтому большинство исследований в этой области проводится теоретически или с помощью атомистического моделирования. Работа Д.У. Абдуллиной выполнена именно в рамках такого подхода. Автором рассмотрены кристаллы со структурой В2 с учетом дальнедействующих межатомных взаимодействий (вплоть до четвертых соседей), что важно для адекватного описания ионных кристаллов с кулоновским взаимодействием и интерметаллидов с металлической связью. Согласно современному подходу, исследование ДБ базируется на анализе фононного спектра и амплитудно-частотных характеристик (АЧХ) делокализованных нелинейных колебательных мод (ДНКМ). В работе также изучены движущиеся ДБ и явление супратрансмиссии.

Диссертация Д.У. Абдуллиной включает введение, четыре главы, заключение, список литературы из 209 наименований; она хорошо иллюстрирована (42 рисунка, 4 таблицы).

Во **введении** обоснована актуальность работы, сформулированы цель и задачи исследования, показана научная новизна, теоретическая и практическая значимость полученных результатов, приведены сведения об апробации работы на конференциях и о публикациях по теме исследования.

В **первой главе** приведен обширный обзор литературы по кристаллам со структурой В2, их физико-химическим свойствам, а также по теоретическим основам нелинейной динамики решеток: фононным спектрам, ДНКМ, ДБ и явлению супратрансмиссии. Показано, что для кристаллов семейства В2 систематические исследования ДНКМ и ДБ ранее не проводились, что обосновывает актуальность настоящей работы. Дана математическая формулировка модели (гамильтониан, уравнения движения) с учетом взаимодействий до четвертых соседей.

Во **второй главе** представлен расчет фононного спектра биатомного кристалла со структурой В2 с учетом взаимодействий вплоть до четвертых соседей. Получены аналитические выражения для частот ДНКМ в малоамплитудном пределе и определены их волновые векторы. Установлены условия, определяющие появление щели в фононном спектре в зависимости от соотношения атомных масс компонентов. Рассчитаны АЧХ ДНКМ для жесткого и мягкого типов нелинейности, при этом показано, что для мягкого (жесткого) типа нелинейности частоты ДНКМ всегда уменьшаются (растут) с ростом амплитуды. Изучено явление супратрансмиссии при периодическом внешнем воздействии на поверхность кристалла, передаваемого от терагерцового лазера. Получено два типа ДБ, возникающих в результате супратрансмиссии. ДБ первого типа возникают при частотах внешнего воздействия в щели фононного спектра, а второй – выше спектра. И в том, и в другом случае необходима достаточно большая амплитуда внешнего

воздействия. ДБ первого типа движутся вглубь кристалла по подрешетке тяжелых атомов, а второго типа – по подрешетке легких атомов.

Третья глава рассматривает возможность получения движущихся ДБ в кристаллах со структурой В2. Показано, что движущиеся ДБ могут быть получены с помощью анзаца, содержащего небольшое число параметров, обсуждаются способы нахождения данных параметров в численном эксперименте. Движение ДБ обеспечивается введением сдвига фазы колебаний атомов. Величина сдвига фазы определяет скорость движения ДБ. Стоит отметить, что работ по возбуждению движущихся ДБ в трехмерных решетках очень мало, а в биатомной трехмерной решетке движущиеся ДБ получены автором, по-видимому, впервые.

Четвертая глава посвящена анализу свойств ДНКМ и поиску ДБ в биатомных кристаллах с использованием межатомных потенциалов, полученных методом погруженного атома. Это важный шаг исследования потому, что в металлах межатомные взаимодействия плохо описываются парными межатомными потенциалами и необходимо прибегать к использованию многочастичных потенциалов. Автором проведено сравнительное исследование нелинейной динамики решетки трех кристаллов со структурой В2: CsCl, LiPb и NiTi. Рассчитаны АЧХ для всех исследованных ДНКМ. Как и следовало ожидать, кристаллы CsCl и LiPb имеют щель в фононном спектре, что обусловлено значительной разницей в атомных массах компонент. Наличие щели в фононном спектре позволило автору получить щелевые ДБ в кристалле LiPb. По-видимому, щелевые ДБ могут существовать и в кристалле CsCl, но о попытках их получения в работе не сообщается. Интересен метод получения щелевых ДБ, основанный на наложении функции локализации на ДНКМ, частоты которых лежат в щели фононного спектра при всех амплитудах колебаний. Обсуждается методика выбора параметров локализующей функции для поиска ДБ заданной амплитуды.

В **заключении** приведены основные результаты работы и обсуждаются открытые проблемы для будущих исследований.

Можно выделить ряд **новых результатов**, представленных в работе, а именно: подробный аналитический анализ дисперсионных кривых кристаллов симметрии В2 с учетом дальнего действия; результаты молекулярно-динамического исследования ДНКМ в рассматриваемом семействе кристаллов как в приближении парных взаимодействий, так и в рамках многочастичных ЕАМ потенциалов; получение новых стационарных и движущихся ДБ в трехмерных биатомных кристаллах.

По работе Д.У. Абдуллиной имеются следующие **вопросы и замечания**:

1. В разделе 2.6 при исследовании явления супратрансмиссии используется модель внешнего воздействия в виде жесткого гармонического движения двух приповерхностных атомных плоскостей. Насколько эта модель адекватно описывает реальное лазерное облучение поверхности? Следовало бы обсудить возможные ограничения такого подхода и степень его применимости для различных типов кристаллов.

2. В третьей главе для возбуждения движущихся ДБ вводится параметр фазового сдвига θ (уравнение 3.2). Из полученных результатов видно, что скорость ДБ растет с увеличением θ . Однако физический смысл этого параметра и его связь с реальными условиями возбуждения (например, с величиной начального импульса) остаются не до конца проясненными. Каков физический механизм, обеспечивающий поступательное движение ДБ при ненулевом θ ?

3. В четвертой главе при обсуждении АЧХ для кристалла LiPb (рисунок 4.2) наблюдается резкий скачок частот для нескольких ДНКМ при амплитуде $A \approx 0,3 \text{ \AA}$. Автор связывает это с возможной особенностью используемого межатомного потенциала. Следовало бы провести дополнительный анализ (например, проверить поведение потенциала в этой

области) для подтверждения данного предположения, либо дать более детальное физическое объяснение.

4. В аналитических выражениях для частот ДНКМ (2.9)–(2.13) и в последующих расчетах используются параметры жесткости c_1 – c_4 , выбранные из условия убывания жесткости с расстоянием. Однако отсутствует количественная оценка влияния выбора этих параметров на ширину щели и на свойства ДБ. Насколько критичен конкретный выбор численных значений коэффициентов жесткости для полученных выводов?

5. В главе 2 при изучении супратрансмиссии использована модель без учета дальнодействующих взаимодействий (в отличие от анализа ДНКМ в этой же главе). Чем обусловлен такой переход и как учет дальнодействия мог бы изменить результаты, полученные для супратрансмиссии?

Сделанные замечания, однако, нисколько не снижают общего высокого уровня диссертационной работы Д.У. Абдуллиной. Работа аккуратно оформлена, текст диссертации достаточно полно проиллюстрирован рисунками и графиками. Основные результаты и выводы диссертационной работы отражены в автореферате.

Работа соответствует паспорту специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки) в части исследования динамических свойств кристаллов и нелинейных эффектов в твердых телах.

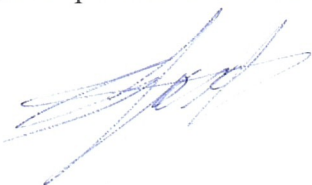
В целом следует отметить, что диссертация Д.У. Абдуллиной представляет собой законченное исследование, выполненное на высоком уровне. Полученные результаты достоверны, выводы и заключения обоснованы. Автором впервые получены аналитические выражения для фонов спектра и условий существования щелевых ДБ в кристаллах со структурой В2 с учетом дальнодействия, впервые продемонстрирована возможность существования движущихся щелевых ДБ в структуре данного типа, а также впервые проведено систематическое сравнительное

исследование нелинейных свойств кристаллов CsCl, LiPb и NiTi с использованием реалистичных потенциалов.

Считаю, что диссертационная работа «Линейная и нелинейная динамика кристаллов со структурой B2 (CsCl)» соответствует критериям п. 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:

Директор Института физики и математики
Санкт-Петербургского политехнического
университета Петра Великого, доцент,
доктор физико-математических наук
по специальности
01.04.07 — Физика конденсированного состояния



Захаров Павел Васильевич

Адрес места работы:

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого», 195 251, Россия, Санкт-Петербург, Политехническая улица, д. 29, Главный учебный корпус, ауд. 286.

Телефон: +7 (921) 958-69-97,

e-mail: ph-math_office@spbstu.ru

e-mail оппонента: zaharov_pv@spbstu.ru

Подпись Захарова П.В. удостоверяю



Я, Захаров Павел Васильевич, даю свое согласие на обработку и передачу персональных данных, представляемых мною в диссертационный совет 21.2.308.01

«29 мая 2026 г.