

УТВЕРЖДАЮ:
руководитель УФИЦ РАН
В.Б. Мартыненко



(подпись)
«05» марта 2026 г.
Печать организации

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук
о диссертационной работе
Абдуллиной Дины Ураловны

Диссертационная работа «Линейная и нелинейная динамика кристаллов со структурой B2 (CsCl)» выполнена в Институте физики молекул и кристаллов — обособленном структурном подразделении Федерального государственного бюджетного научного учреждения Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук (ИФМК УФИЦ РАН).

В 2022 г. Абдуллина Дина Ураловна окончила магистратуру Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Уфимский государственный авиационный технический университет» по специальности 28.04.02 «Наноинженерия». В период подготовки диссертации соискатель Абдуллина Дина Ураловна проходила обучение в очной аспирантуре ИФМК УФИЦ РАН с 01.10.2023 г. по направлению подготовки 1.3.8 «Физика конденсированного состояния» (Приказ № 579(1252) от 26.09.2023 г.). С 26.05.2021 г. по настоящее время работает младшим научным сотрудником в Институте физики молекул и кристаллов Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук.

Кандидатские экзамены сданы 06.06.2024 г. (история и философия науки (физические науки)), 19.06.2024 г. (иностранный язык (английский)), 25.02.2026 г. (физика конденсированного состояния). Справка об обучении и сведения о кандидатских экзаменах выданы 04.03.2026 г. УФИЦ РАН.

Научный руководитель – Дмитриев Сергей Владимирович, профессор, доктор физико-математических наук по специальности 1.3.8 «Физика конденсированного состояния», заведующий лабораторией физики твердого тела ИФМК УФИЦ РАН.

Тема диссертации утверждена на заседании Ученого совета УФИЦ РАН приказ № 659 (1252) от 30.10.2023 г. В окончательной редакции тема диссертации утверждена на заседании Ученого совета УФИЦ РАН приказ № 88 (1252) от 18.02.2026 г.

По результатам рассмотрения диссертации «Линейная и нелинейная динамика кристаллов со структурой B2 (CsCl)» принято следующее заключение: диссертация Абдуллиной Д.У. представляет собой законченное и самостоятельное исследование.

Актуальность диссертационной работы

Начиная с пионерских работ Долгова, а также Сиверса и Такено, ведутся активные исследования по изучению явления пространственной локализации колебательной энергии в нелинейных решетках. Такие локализованные колебания получили название дискретных бризеров (ДБ). Экспериментальные данные получены для ДБ в различных физических и механических системах, и в настоящее время ведутся активные исследования ДБ в кристаллах.

Прямых наблюдений ДБ в кристаллах на сегодняшний день нет, поскольку отсутствуют методы, позволяющие фиксировать колебания малых групп атомов на временных интервалах 0,1-10 пс. Однако существуют косвенные методы, позволяющие судить о вкладе ДБ в колебания решетки, используя рассеяние рентгеновских лучей или нейтронов. Данные методы, показали возбуждение ДБ при достаточно высоких температурах в ионном кристалле NaI и α -уране.

При малых амплитудах различные колебательные моды не взаимодействуют друг с другом, но с ростом амплитуды происходит обмен энергией между ними. Однако некоторые высокосимметричные колебательные моды, в отсутствие возмущений, не возбуждают других мод даже при больших амплитудах колебаний. Теоретические подходы к нахождению таких мод в молекулах и кристаллах были разработаны Чечиным и Сахненко. Авторы назвали их бушами нелинейных нормальных мод (БННМ). В более поздних работах БННМ в кристаллах именовались делокализованными нелинейными колебательными модами (ДНКМ). На основе ДНКМ был разработан подход к нахождению множества различных ДБ в кристаллах.

Учитывая сложности экспериментального обнаружения ДБ в кристаллах наиболее продуктивным методом их исследования на сегодняшний день является атомистическое моделирование. Таким образом, молекулярно-динамическое изучение свойств ДНКМ и ДБ в различных кристаллических системах является актуальной и важной задачей, решение которой, в конечном итоге, позволит установить роль ДБ в физике кристаллов.

Личное участие соискателя ученой степени в получении результатов, изложенных в диссертации

Диссертационная работа выполнена автором в значительной степени самостоятельно. Она самостоятельно проанализировала и обобщила обширный массив научной литературы, провела аналитические расчеты амплитудно-частотных характеристик ДНКМ в В2 кристаллах, применила метод молекулярной динамики для изучения нелинейной динамики решетки В2 кристаллов, а также активно участвовала в осмыслении и интерпретации полученных данных, формулировке выводов и подготовке публикаций (статей и тезисов докладов). В опубликованных с соавторами работах основные результаты, касающиеся поиска щелевых ДБ в структуре В2, в том числе, движущихся, были получены именно соискателем. Автор также играл важную

роль в определении направлений исследований и методов решения поставленных задач.

Степень разработанности темы исследования

ДНКМ и ДБ изучались для многих кристаллов, включая алмаз, металлы и упорядоченные сплавы. Было показано влияние ДНКМ и ДБ на некоторые макроскопические свойства модельных решеток и кристаллов, показана взаимосвязь между этими двумя типами нелинейных колебаний. Однако в литературе отсутствует полный анализ свойств данных мод для обширного семейства кристаллов со структурой В2 (CsCl) в зависимости от атомных масс компонент и коэффициентов жесткости межатомных связей, с учетом дальнего действия. Такие сведения позволили бы для различных кристаллов данного семейства предсказать существование различных типов ДБ, что является первым необходимым шагом к определению влияния ДБ на свойства кристаллов. На получение этих результатов нацелена данная диссертационная работа.

Научная новизна:

1. Впервые рассчитан и проанализирован фононный спектр биатомного кристалла со структурой В2 (типа CsCl) в модели парных межатомных взаимодействий, при этом учтены связи вплоть до четвертых соседей, что важно, например, для интерметаллидных соединений и ионных кристаллов с дальнедействующими взаимодействиями.

2. Получены аналитические выражения, определяющие границы щели в фононном спектре кристалла со структурой В2, тем самым, описаны условия существования щелевых ДБ.

3. Проанализировано влияние атомных масс компонентов и жесткости межатомных связей на амплитудно-частотные характеристики ДНКМ в рассматриваемых кристаллах с учетом дальнего действия, что позволило описать возможные типы ДБ в таких кристаллах.

4. Доказано, что учет дальнедействующих взаимодействий в кристаллах со структурой В2 приводит к возможности существования новых типов ДБ,

которые не могут быть реализованы при учете взаимодействий только между ближайшими и вторыми соседями.

5. Методом молекулярной динамики рассчитаны амплитудно-частотные характеристики ДНКМ в кристаллах CsCl, LiPb и NiTi с непарными взаимодействиями, что позволило описать возможные типы ДБ в этих кристаллах. Впервые описаны ДБ в кристалле LiPb.

Теоретическая и практическая значимость работы определяется важностью получения информации о делокализованных и локализованных нелинейных колебательных модах для физики кристаллов. В работе приведен полный анализ свойств ДНКМ и ДБ для кристаллов со структурой В2 (CsCl) в зависимости от атомных масс компонент и коэффициентов жесткости межатомных связей с учетом дальнего действия до четвертой координационной сферы. Полученные данные позволяют предсказывать существование различных типов ДБ для различных кристаллов данного семейства, что необходимо для определения влияния ДБ на свойства кристаллов. Показана возможность существования движущихся ДБ в В2 кристаллах, что описывает канал транспорта колебательной энергии по решетке.

Полнота изложения материалов диссертации в работах, опубликованных соискателем

По материалам диссертационной работы опубликовано 11 статей в журналах, из них 3 работы в рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК РФ, 8 работ входят в международные базы цитирования Web of Science и/или Scopus:

1. Abdullina D.U., Semenova M.N., Semenov A.S., Ryabov D.S., Chechin G.M., Korznikova E.A., Baimova J.A., Dmitriev S.V. Stability of in-plane delocalized vibrational modes in triangular Morse lattice (2018) IOP Conference Series: Materials Science and Engineering, 447 (1), 012060

2. Abdullina D.U., Semenova M.N., Semenov A.S., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Stability of delocalized nonlinear vibrational modes in graphene lattice (2019) European Physical Journal B, 92 (11), 249

3. Abdullina D.U., Bebikhov Y.V., Khazimullin M.V., Kudreyko A.A., Dmitriev S.V. Atom deposition and sputtering at normal incidence simulated by the Frenkel-Kontorova chain (2022) *Physical Review E*, 106 (2), 024207

4. Bachurin D.V., Murzaev R.T., Abdullina D.U., Semenova M.N., Bebikhov Y.V., Dmitriev S.V. Chaotic discrete breathers in bcc lattice: Effect of the first- and second-neighbor interactions (2024) *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 470, 134344

5. Shcherbinin S.A., Bebikhov Y.V., Abdullina D.U., Kudreyko A.A., Dmitriev S.V. Delocalized nonlinear vibrational modes and discrete breathers in a body centered cubic lattice (2024) *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*, 135, 108033

6. Abdullina D.U., Kosarev I.V., Evarestov R.A., Kudreyko A.A., Dmitriev S.V. (2025). Phonon spectrum and gap quasi-breathers in B2 (CsCl) structure. *Chaos, Solitons & Fractals*, 199, 116724.

7. Abdullina D.U., Naumov E.K., Bebikhov Y.V., Semenova M.N., Kudreyko A.A., Dmitriev S.V. (2025). Supratransmission in a β -FPUT square lattice. *Physics Letters A*, 130587.

8. Abdullina D.U., Kuzkin V.A., Krivtsov A.M., Kudreyko A.A., Dmitriev S.V. (2025). Heat transfer regimes and the electroplasticity effect: A molecular dynamics study. *Physical Review B*, 112(14), 144310.

9. Bebikhov Y.V., Semenova M.N., Abdullina D.U., Dmitriev S.V. (2025). Moving gap discrete breather in biatomic crystal. *Russian Journal of Nonlinear Dynamics*, 21(3), 287-299.

10. Abdullina D.U., Bebikhov Y.V., Semenova M.N., Dmitriev S.V. (2025). Excitation of moving discrete breathers in square β -FPUT lattice by external driving. *Physics of the Solid State*, 67(11), 977-982.

11. Рябов Д.С., Косарев И.В., Абдуллина Д.У., Дмитриев С.В. (2025). Делокализованные нелинейные колебательные моды ОЦК решетки // *Известия Алтайского государственного университета*. № 1 (141). С. 58–66.

Научная специальность, которой соответствует диссертация

Диссертация «Линейная и нелинейная динамика кристаллов со структурой В2 (CsCl)» по своим целям, задачам, содержанию, методам исследования и научной новизне соответствует пп. 1 «Теоретическое и экспериментальное изучение физической природы и свойств неорганических и органических соединений как в кристаллическом (моно- и поликристаллы), так и в аморфном состоянии, в том числе композитов и гетероструктур, в зависимости от их химического, изотопного состава, температуры и давления» и 4. Теоретическое и экспериментальное исследование воздействия различных видов излучений, высокотемпературной плазмы на природу изменений физических свойств конденсированных веществ паспорта специальности 1.3.8 Физика конденсированного состояния (физико-математические науки).

Диссертационная работа соответствует квалификационным требованиям, установленным п. II «Положения о порядке присуждении ученых степеней».

Диссертация «Линейная и нелинейная динамика кристаллов со структурой В2 (CsCl)» Абдуллиной Дины Ураловны рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 «Физика конденсированного состояния».

Заключение принято на заседании научного семинара ИФМК УФИЦ РАН.

Присутствовало на заседании 16 научных сотрудников из них 6 докторов наук по профилю специальности. Результаты голосования: «за» - 16, «против» - 0, «воздержались» - 0, протокол № 309 от 11.02.2026 г.

Ученый секретарь
ИФМК УФИЦ РАН
кандидат физико-
математических наук



А. А. Бунаков