

Отзыв

официального оппонента

на диссертацию

Клочко Марии Сергеевны

«Особенности локализации колебаний и условия устойчивости фазовых состояний в интеркалированных кристаллах кубической симметрии»,

представленную на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

по специальности **01.04.02 – теоретическая физика**

Современные наблюдения требуют развития теории реальных кристаллов с учетом влияния примесей, дефектов и границ. Особую роль при этом играют локальные колебания и отщепляющиеся от сплошного спектра ветви волн. Основы теоретического описания таких непростых явлений были заложены И.М.Лифшицем его знаменитой теорией локальных возмущений и успешно развиваются вплоть до наших дней, в том числе в Физико-техническом институте низких температур им. Б.И. Веркина. Характерной особенностью этого подхода является высочайший теоретический уровень, дающий возможность адекватного описания результатов экспериментов над реальными кристаллами. Именно данный метод лежит в основе диссертации **Марии Сергеевны Клочко**.

Всё это позволило автору рассмотреть важные и интересные задачи современной физики кристаллов, такие как влияние интеркалированной атомарной примеси на низкотемпературные термодинамические характеристики кристаллических структур; найти условия существования, фононный спектр и колебательные характеристики ван-дер-ваальсовых кристаллов с ОЦК структурой; вычислить низкотемпературные термодинамические характеристики фуллерита C_{60} , интеркалированного ксеноном, и наконец, используя те же методы локальной теории возмущений, количественно обсудить влияние протяженных дефектов на динамические характеристики кубических кристаллов. Эти исследования

тесно связаны с экспериментами, в том числе, проводимыми во ФТИНТе , и проливают свет на многие особенности поведения реальных кристаллов.

Вышесказанное свидетельствует о несомненной **актуальности** диссертационной работы **М.С. Ключко**

Данная работа продолжает исследования, которые проводились во ФТИНТ им. Б.И. Веркина НАН Украины под руководством А.М. Косевича, Л.А. Пастура, В.И. Переседы, Е.С. Сыркина, М.М. Богдана, М.А. Стржемечного и других учеников и последователей И.М.Лифшица. Диссертация **М.С. Ключко** является естественным продолжением и развитием этих работ, в частности, в диссертации в ряде глав с успехом используется метод якобиевых матриц, разработанный В.И. Пересадой и его учениками.

В первом вводном разделе автор кратко описывает известную из литературы как теоретическую, так и экспериментальную ситуацию, включая многочисленные наблюдения в кристаллах (в том числе со структурой типа NaCl), в углеродных и метаматериалах. Обзор состоит из двух частей. В первой части обстоятельно изложено современное состояние проблемы и дано обоснование необходимости выполнения работ, составивших содержание диссертации.

Вторая часть посвящена описанию используемых математических методов. Центральное место здесь занимает описание метода якобиевых матриц, который используется в нескольких главах диссертации. Этот метод не столь хорошо известен, поэтому уделяемое внимание его изложению вполне оправдано. Этим обосновывается в значительной степени **достоверность** полученных в диссертации результатов. Но всё же, часть материала более подходит для математического Приложения, чем для Введения.

Во втором разделе рассмотрено влияние локальных дефектов на свойства кристаллов с примесью. Для реалистичной модели кристаллической решетки на микроскопическом уровне проанализированы условия образования и характеристики квазилокальных колебаний, на которых происходит рассеяние быстрых акустических фононов. При этом, начиная с некоторой частоты (пропагон-диффузионной границы) для некоторых поляризаций и направлений обычное

распространение фононов прекращается. Появляются зоны в обратной решетке, соответствующие возникающим различным типам возбуждений – пропagoнам, диффузонам, локонам. Их наличие сказывается на плотностях состояний и, соответственно, на термодинамических свойствах таких кристаллов, приводя к особенностям на температурных зависимостях.

Автором рассмотрен ГЦК кристалл (идеальный и с тяжелой изотопической примесью), для которого успешно определены частотные интервалы пропagoнной, диффузонной и локонной зон. Установлено, что в идеальных кристаллических структурах роль пропagoн-диффузонной границы играет низкочастотная особенность ван Хова. Показано, что переход от пропagoнов к диффузорам происходит вследствие их рассеяния на квазилокальных колебаниях. Локонно-пропagoнная граница сдвигается в случае структуры с примесью по сравнению с идеальным кристаллом в более низкочастотную область.

Рассчитан фононный вклад в теплоемкость кристалла селенида индия, интеркалированного никелем для достаточно широкого интервала его концентраций. Автору удалось связать наличие нескольких наблюдаемых экстремумов на температурной зависимости теплоемкости селенида индия с появлением квазилокальных атомных колебаний интеркалированного никеля, в основном связанных с атомным движением в кристаллической матрице, и рассеянием на них длинноволновых акустических фононов.

Третий раздел посвящён исследованию условий упругой устойчивости и динамики решетки ОЦК кристалла со взаимодействием Ван-дер-Ваальса между атомами. Наиболее характерными представителями чисто ван-дер-ваальсовых кристаллов являются кристаллы отвердевших инертных газов, причем особое место занимает гелий, на P - T -диаграмме которого присутствует такая необычная кристаллическая структура как ОЦК кристалл с межатомным ван-дер-ваальсовым взаимодействием. Поскольку ОЦК кристалл является стабильным при учете дальнего действия, а при наличии слабых ван-дер-ваальсовых сил определяющим является ближкодействие (взаимодействие между ближайшими соседями), то важно было исследовать условия устойчивости такого кристалла и

определить, какой потенциал взаимодействия описывает упругую устойчивость ОЦК кристалла с ван-дер-ваальсовым взаимодействием между атомами.

Принципиальную возможность существования такой устойчивой структуры была определена автором в рамках потенциала Ленарда-Джонса ($(b-m)$), для «отталкивательной» части потенциала которого было показано, что устойчивость (метастабильность) действительно реализуется при $m=8$.

В четвертом разделе исследованы низкотемпературные термодинамические характеристики новой разновидности углеродных соединений – фуллерита C_{60} , интеркалированного ксеноном, в рамках модели трехмерного гармонического осциллятора. Сделана оценка пяти нижайших уровней и определен вклад примесных атомов ксенона в низкотемпературную теплоемкость и тепловое линейное расширение системы $C_{60}-Xe$. Было установлено, что вклад ксенона в области низких температур существенен и объясняет аномалии температурных зависимостей. В частности, это может быть эйнштейновский вклад локальных состояний.

В пятом разделе используемые в диссертации методы применены к исследованию чисто сдвиговых поверхностных волн с горизонтальной поляризацией, как со свободной поверхностью, так и с адсорбированным монослоем в случае простой кубической, ГЦК и ОЦК решеток. При этом влияние поверхности кристалла и монослоя рассматриваются методами локальной теории возмущений в случае конечных размеров системы.

Прослежено, как отщепляются ветви колебаний. Получены аналитические выражения для поверхностных спектральных плотностей и определены параметры затухания волн типа волн Лява в кристаллах кубической симметрии. Показано, что добавление адсорбированного монослоя в зависимости от массы его атомов может изменять характер затухания (проникновения) поверхностных волн вглубь кристалла от монотонного до осцилляторного.

Подведем итоги, имея в виду **научное и практическое значение** результатов работы. В диссертации рассмотрена и решена важная и актуальная задача теоретической физики – аналитически в рамках метода локальных возмущений

описана динамика кристаллических структур с примесями и со свободной поверхностью. Дано объяснение наблюдаемым температурным аномалиям ряда типов реальных кристаллов. Применены и развиты адекватные методы исследования сложных структур, что позволило дать интерпретацию целому ряду необычных наблюдаемых фактов.

Тем самым, в работе получены новые научно обоснованные теоретические результаты, которые являются значительным достижением для развития классической теории и важны в практических применениях, в частности, для интерпретации тепловых свойств реальных кристаллов при низких температурах и современной физики метаматериалов.

Целесообразно ознакомить с результатами диссертационной работы **М.С. Ключко** специалистов Института теоретической физики имени Н.Н. Боголюбова НАН Украины (г. Киев), Киевского национального университета имени Тараса Шевченко, Института металлофизики им. Г.В. Кудрямова НАН Украины (г. Киев), Национального технического университета Украины «Киевский политехнический институт», Харьковского национального университета им. В.Н. Каразина, Физико-технического института низких температур им. Б.И. Веркина НАН Украины (г. Харьков), Национального научного центра «Харьковский физико-технический институт» (г. Харьков), Радиоастрономического института НАН Украины, Института радиофизики и электроники им. О.Я. Усикова НАН Украины (г. Харьков).

Сделаем некоторые замечания по содержанию и тексту работы.

Как мы уже упоминали, во Введении автор знакомит читателя с основами теории якобиевых матриц, используемых в ряде глав диссертации. В то же время, не пояснена сама причина возможности сведения рассматриваемой динамической задачи к якобиевым матрицам, что было бы как раз уместно во Введении. Причина же эта довольно проста и связана с трехмерностью обычного векторного пространства смещений. Взаимная ортогонализация вводимых в этом методе векторов, порождаемых действием силового оператора на исходное (порождающее) смещение, как раз и обеспечивает отличие от нуля только трёх со-

седствующих «антидиагоналей» в матрице. Ортогональными к трём взаимно ортогональным векторам могут быть только нулевые векторы, что и дает нулевые элементы матрицы, превращая её в якобиеву.

Недостаточно подчеркивается, как во Введении, так и в отдельных главах, что в основе всех используемых методов лежит теория локальных возмущений, что именно локальность позволяет применять используемые приемы и методы.

Есть также ряд более частных замечаний. Так, не объяснено возникновение предельных значений матричных элементов якобиевых матриц, которые существенно используются при вычислениях. Не обсуждаются достаточно подробно аналогии с эйнштейновским подходом к вычислению теплоемкости при обсуждении бозонного пика, как возникающего от вклада квазилокальных колебаний. Не обсуждается в деталях аналогия с волной Лява в случае кристалла с монослоем на поверхности. Имеется некоторое количество опечаток.

Эти замечания, тем не менее, не касаются основных положений и выводов автора, поэтому они не изменяют положительного впечатления от данной яркой и интересной диссертационной работы.

В целом, в диссертационной работе **Клочко Марии Сергеевны** методами современной динамики и теоретической физики построена детальная теория, развивающая теорию локальных возмущений для случаев, играющих важную роль в современной физике реальных кристаллов.

Диссертация **Марии Сергеевны Клочко** является завершенной научной работой, она достаточно апробирована, основные ее результаты опубликованы в 7 (семи) статьях в ведущих научных журналах и доложены на 15 (пятнадцати) представительных конференциях, автореферат полно и правильно отражает содержание диссертации. По новизне и научной значимости полученных результатов диссертационная работа **“Особенности локализации колебаний и условия устойчивости фазовых состояний в интеркалированных кристаллах кубической симметрии”** соответствует всем требованиям МОН Украины, предъявляемым к кандидатским диссертациям, в частности, пп. 9, 11, 12 “Порядку присуждения наукових ступенів”. По

моему мнению, **Клочко Мария Сергеевна** является вполне сформировавшимся специалистом в области теоретической физики и теории реальных кристаллов и безусловно заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика.

Официальный оппонент,

доктор физ.-мат. наук, профессор,

старший научный сотрудник

Радиоастрономического института

НАН Украины



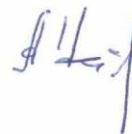
В.М. Конторович

Подпись профессора Конторовича В.М. удостоверяю.

Ученый секретарь Радиоастрономического

института НАН Украины,

кандидат физико-математических наук



А.П. Удовенко