ВІДГУК

офіційного опонента
на дисертацію **Клочко Марії Сергіївни**
«Особливості локалізації коливань та умови стійкості фазових станів у інтеркальованих кристалах кубічної симетрії»,
яку представлено на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук
за спеціальністю 01.04.02 – «теоретична фізика»

Останнім часом на фізику конденсованого стану, як експериментальну, так і теоретичну, суттєво впливають нові можливості у створенні контрольованої архітектури поверхні і контрольованого впровадження домішок в матрицю кристала. Завдяки цьому дисертація М. С. Клочко знаходиться у колі інтересів сучасної теоретичної фізики твердого тіла і є **актуальною.**

Дисертація М.С. Клочко присвячена теоретичному опису динамічних і термодинамічних характеристик фазових станів в кубічних кристалах і особливостей локалізації коливань при наявності інтеркальованих атомарних домішок і адсорбованих на поверхні моношарів. Були поставлені і розв'язані наступні завдання:

1. проаналізовані умови формування та характеристики квазілокальних коливань в кристалі селеніду індію, який інтеркальовано нікелем. Теоретично пояснені експериментальні результати з низькотемпературної теплоємності $InSeNi_x$;

2. розраховані енергетичний спектр і термодинамічні характеристики атому ксенону в октаедричній порожнечі фулерита C_{60};

3. обчислено характеристики чисто зсувних поверхневих хвиль з горизонтальною поляризацією в простій, гранецентрованій і об'ємно центрованій кубічних решітках: поверхнево-проектовані спектральні густини та характер спадання амплітуди поверхневої хвилі по мірі віддалення від поверхні в глибину кристала;

4. вивчено умови пружною стійкості і динаміки кристалічної решітки ОЦК із ван-дер-ваальсовою взаємодією між атомами.

Актуальність цих досліджень підтверджена тим фактом, що дисертаційна робота М.С. Клочко виконана в рамках тематичного плану ФТІНТ ім. Б. І. Вєркіна НАН України за відомчими тематиками: «Теоретичні дослідження нелінійних та квантових явищ в наноструктурах і нових матеріалах» (номер державної реєстрації 0112U002642, термін виконання 2012 - 2016 рр.), «Теоретичний опис рівноважних та транспортних властивостей гібридних наноструктур» (номер державної реєстрації 0110U006085, термін виконання 2015 - 2019 рр.).

Результати даної дисертації, безумовно, становлять великий інтерес з точки зору **теоретичної фізики** і застосування у **прикладних дослідженнях.**

Дисертація містить детальний огляд літератури, який наведено в Розділі 1, а також чотири оригінальних розділи. У роботі отримані нові цікаві фізичні результати, серед яких слід відзначити такі:

1. У другому розділі вперше показано спільність природи особливостей ван Хова, фононних кросоверів Іоффе-Регеля і бозонних піків в невпорядкованих системах. Встановлено, що такі особливості обумовлені додатковою дисперсією квазічастинок, яка виникає внаслідок розсіювання на довгохвильових акустичних фононах. Вперше знайдений фононний внесок в теплоємність кристала селеніду індію, який інтеркальовано нікелем, для актуального інтервалу концентрації домішок. Показано, що наявність двох максимумів на температурній залежності теплоємності обумовлена збудженням специфічних квазілокалізованих станів, тобто фононів, які локалізовані поблизу дефекту та мають малі швидкості розповсюдження. Ці стани не тільки можуть обумовлювати виникнення низькочастотних максимумів, але й служити додатковими центрами розсіювання.

2. У третьому розділі вперше визначено умови пружної стійкості решітки об'ємно-центрованого кубічного кристалу із взаємодією Ван-дер-Ваальса між атомами. Встановлено, що в системі зі стандартним потенціалом Ленард-Джонса ОЦК-структура може існувати тільки як метастабільний стан у вузькому інтервалі значень сталої решітки. Показано, що пружна стійкість кристала може бути досягнута тільки в тому випадку, якщо ступінь при доданку, який відповідає за відштовхування в потенціалі Ленард-Джонса, є на чотири порядки меншою.

3. У четвертому розділі вперше аналітично розраховано внесок домішкових атомів ксенону у низькотемпературну термодинаміку фулерита C_{60}, який

інтеркальовано ксеноном. Із використанням розрахованого в рамках моделі тривимірного гармонічного осцилятора енергетичного спектра ксенону, встановлено, що домішковий внесок в теплове лінійне розширення і теплоємність C_{60}-Xe в області низьких температур є суттєвим.

4. У п'ятому розділі вперше отримано аналітичні вирази для поверхнево проектованих спектральних густин та визначено параметри зменшення амплітуди чисто зсувних поверхневих хвиль з горизонтальною поляризацією в кристалах кубічної симетрії в міру віддалення від поверхні в глибину кристала. Показано, що наявність адсорбованого на поверхні домішкового моношару може суттєво змінити характер зменшення амплітуди поверхневих хвиль в залежності від маси домішки. Хвилі такого типу є дуже чутливими до властивостей поверхні.

Таким чином, в дисертаційній роботі М.С. Клочко **розв'язано важливе завдання теоретичної фізики** конденсованого стану, а саме: визначені особливості локалізації коливань і встановлені термодинамічні характеристики фазових станів у кубічних кристалах, які інтеркальовані атомарними домішками або мають адсорбований на поверхні моношар.

Достовірність наукових результатів і обґрунтованість висновків не викликає сумнівів, оскільки для розрахунків використовуються добре апробовані аналітичні та чисельні методи, а саме: метод якобієвих матриць для пошуку локалізованих станів, модифікований метод якобієвих матриць і метод кінцево-різницевих рівнянь для опису характеристик поверхневих хвиль при наявності протяжного дефекту. Багато з результатів, які отримані аналітичним та чисельним шляхом і наведені у дисертації, перевірені із даними наявних експериментів.

Практичне значення отриманих результатів. Результати досліджень, які представлені в дисертаційній роботі, мають фундаментальне значення, оскільки вони поглиблюють знання про фононні спектри кристалічних структур, як ідеальних, так і реальних кристалів з різного роду дефектами. Визначено вплив дискретності решітки на локалізацію коливань і властивості фазових станів інтеркальованих кубічних кристалів. Обчислені у роботі вирази для поверхнево проектованих спектральних густин можуть бути використані для отримання величин розсіювання Мандельштама-Бріллюена електромагнітних хвиль на акустичних коливаннях. З прикладної точки зору, обчислені в дисертації характеристики чисто зсувних поверхневих хвиль з горизонтальною

поляризацією, такі, як закони дисперсії, глибини убування амплітуд таких поверхневих хвиль, величини їх відщеплення від об'ємного спектра, можуть бути використані для проведення гравіметричних вимірювань у хімічних сенсорах і біосенсорах. Показано, що інтеркаляція важкої атомарної домішки до октаедричної порожнечі фулерита C_{60} суттєво впливає на термодинамічні властивості кристала C_{60}-Xe. Цей висновок може пояснити низку результатів експериментальних досліджень з вимірювання низькотемпературної термодинаміки фулерита, інтеркальованого ксеноном. Розрахунки, наведені в дисертації, можуть бути корисними для з'ясування ролі бозонного піку, оскільки на даний момент це явище ще не знайшло повного обґрунтування.

Результати дисертації можуть бути рекомендовані до використання науковими та освітніми закладами, де проводяться теоретичні і експериментальні дослідження динамічних і термодинамічних характеристик кубічних кристалів з локальними і протяжними дефектами, а також враховується вплив зовнішніх явищ на ці властивості. Наведемо список таких закладів: Інститут радіофізики та електроніки ім. О.Я. Усикова НАН України (м. Харків), Харківський національний університет ім. В.Н. Каразіна МОН України (м. Харків), Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б.І. Вєркіна НАН України (м. Харків), Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України (м. Київ), Інститут фізики НАН України (м. Київ), Донецький фізико-технічний інститут ім. О.О. Галкіна НАН України (м. Київ), Ужгородський національний університет (м. Ужгород), Національний університет «Львівська політехніка» (м. Львів), Інститут фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України (м. Київ).

Зауваження до роботи:

1. Недостатньо детально проаналізовані переваги досліджуваних в роботі хвиль порівняно з широко відомими поверхневими хвилями Релея.
2. Доцільність диференціації різних зон в спектрі (пропагонна, дифузонна, локонна).

Ці зауваження скоріше мають характер побажань на майбутнє і не впливають на загальну безсумнівно позитивну оцінку дисертації. В цілому дисертаційна робота М.С. Клочко виконана на високому науковому рівні. Вона є завершеним теоретичним дослідженням, в якому отримані нові результати, що

мають важливе наукове і практичне значення. Тема дисертації відповідає спеціальності 01.04.02 – «теоретична фізика». Основні результати дисертації наведені в 7 статтях, які опубліковані у провідних наукових журналах та доповідалися на багатьох міжнародних наукових конференціях. Дисертація добре оформлена, матеріал роботи викладено кваліфіковано і ясно. Автореферат повністю відображає зміст і висновки дисертації.

За актуальністю теми, новизною, науковою значущістю результатів, достовірністю і обґрунтованістю висновків дисертаційна робота М.С. Клочко «Особливості локалізації коливань та умови стійкості фазових станів у інтеркальованих кристалах кубічної симетрії» повністю відповідає вимогам кандидатських дисертацій, зокрема з пунктами 9, 11 і 12 "Порядку присудження наукових ступенів", а її автор Клочко Марія Сергіївна безсумнівно заслуговує на присудження їй наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – «теоретична фізика».

Офіційний опонент,
кандидат фізико-математичних наук,
доцент, виконуючий обов'язки
завідувача кафедри теоретичної фізики
імені академіка І. М. Ліфшиця
Харківського національного
університету імені В. Н. Каразіна Г. І. Рашба

Підпис засвідчую.

Учений секретар
Харківського національного
університету імені В. Н. Каразіна,
кандидат політичних наук, доцент Н. А. Вінникова