

## ОТЗЫВ

*официального оппонента*

*на диссертационную работу К.А. Комарова*

*«Регулируемое взаимодействие коллоидных частиц во внешних полях»,*

*представленную на соискание ученой степени кандидата*

*физико-математических наук по специальности*

*1.3.8 – физика конденсированного состояния*

Одной из важнейших фундаментальных задач в физике конденсированного состояния является поиск взаимосвязи между характером межчастичного взаимодействия и наблюдаемыми свойствами. Бурное развитие физики мягкой материи в последние 10-15 лет привело к резкому росту интереса к этой классической задаче. Причиной такого интереса является тот факт, что эффективные взаимодействия в мягкой материи, например, между коллоидными частицами нано- и микрометрового размеров могут иметь очень нетривиальные свойства, такие как мультимасштабность или ультрамягкие отталкивания. За последние десять лет методами компьютерного моделирования было установлено, что такие взаимодействия могут порождать широкий спектр интересных эффектов, таких как полиморфизм с образованием сложных кристаллических и квазикристаллических структур, аномалии в жидкости, нетривиальная динамика, и т.п. Однако большинство этих результатов было получено с использованием простых модельных потенциалов (как правило, парных), которые лишь качественно описывают характер эффективных взаимодействий в мягкой материи. Взаимодействия в реальных системах в большинстве случаев гораздо сложнее, в частности, здесь может быть существенна роль многочастичных эффектов. В связи с этим возникает проблема соотношения огромного количества теоретического материала о свойствах мягкой материи, полученного для модельных систем, и реальных экспериментов.

Одним из замечательных достижений последних десятилетий явилась разработка экспериментальных методик, позволяющих изучать коллоидные дисперсии с разрешением отдельных частиц. Более того, экспериментатор может эффективно управлять взаимодействием между частицами в таких системах с помощью внешних полей (т.н. tunable interactions), что открывает широкие возможности как для моделирования, так и для синтеза различных структур с заданными свойствами. Перечисленные преимущества обуславливают огромный интерес к экспериментальному и теоретическому изучению подобных модельных систем. Данная тематика обсуждается на страницах журналов самого высокого уровня, причем интерес к ней неуклонно растет.

Одним из эффективных способов регулирования взаимодействий в дисперсных системах является использование внешних электрических и магнитных полей. Количественный анализ таких взаимодействий является сложной задачей, требующей самосогласованного рассмотрения с учетом эффектов взаимной переполаризации частиц одновременно с их взаимодействием с внешним полем. В связи с этим тема диссертационного исследования К.А. Комарова безусловно является актуальной. Основная цель работы – разработка методов расчета регулируемого межчастичного взаимодействия в коллоидных суспензиях во внешних вращающихся электрических и магнитных полях. Эффективные теоретические подходы к анализу таких взаимодействий практически отсутствуют и поэтому результаты, полученные в работе, обладают несомненной новизной и соответствуют мировому уровню исследований в данной области.

Диссертация К.А. Комарова состоит из введения, 6 глав и заключения, содержит 183 страницы, 40 рисунков и 2 таблицы. Список литературы включает 148 источников.

Во **введении** обсуждается актуальность работы, формулируются цели и задачи исследования, перечисляются результаты и положения, выносимые автором на защиту, а также приводятся данные о структуре работы и апробации ее результатов. Уже на этом этапе прочтения диссертации видно, что объем проделанной работы очень велик, работа была представлена на серьезных конференциях российского и международного масштабов, а ее основные результаты опубликованы в престижных журналах, индексируемых в Web of Science, таких как Scientific Reports, The Journal of Chemical Physics, Soft Matter.

В **первой главе** диссертации приводится обзор литературных данных, существенных для постановки задачи и дальнейшей интерпретации полученных результатов. В частности, дается достаточно подробный обзор основных типов эффективных взаимодействий в коллоидных дисперсиях, а также описываются основные подходы к расчету базовых и регулируемых взаимодействий в таких системах. Хочется отметить, что литературный обзор написан в хорошем стиле, достаточно последовательный и подробный, так что при некотором расширении и дополнении вполне может использоваться в качестве учебного пособия. Важно, что заметная его часть описывает результаты, полученные ранее коллегами и соавторами соискателя. Это говорит о том, что исследования, проводимые в данной научной группе, не просто соответствуют мировому уровню, но во многом и определяют его.

Во **второй главе** диссертационной работы К.А. Комарова описываются результаты исследования регулируемых взаимодействий в системе сферически-симметричных коллоидных частиц, находящихся во внешних полях путем численного решения

интегрального уравнения простого поляризованного слоя методом граничных элементов. Подобные расчеты очень затратны с вычислительной точки зрения и потому трудноприменимы к практическому анализу многочастичных коллоидных систем. Однако на их основе можно получить очень точные расчеты для важных частных случаев, и затем использовать результаты как референсные данные для анализа точности различных методов и приближений. Именно для этой цели численные расчеты в основном и применяются в диссертационной работе. Важным результатом данной главы явился расчет эффективных парных потенциалов взаимодействия коллоидных частиц в конических электрических полях для различных значений конических углов вращения. Расчеты показали, что посредством изменения угла прецессии поля можно конструировать богатую «зоологию» эффективных взаимодействий, включая отталкивание, притяжение, дальнее притяжение и близкое отталкивание, взаимодействия барьерного типа и двух-масштабное отталкивание. Также были исследованы точность и границы применимости двух часто используемых приближений – приближения перманентных дипольных моментов и приближения самосогласованных дипольных моментов. В частности, было показано, что в случае, когда относительная диэлектрическая проницаемость частиц меньше проницаемости среды, модель самосогласованных дипольных моментов становится неприменима.

**Третья глава** посвящена систематическому построению теории возмущений и диаграммной техники для модели самосогласованных точечных диполей. Данная глава является методическим ядром, на котором строятся основные результаты работы. Разработано наглядное диаграммное представление ряда теории возмущений для полной энергии системы самосогласованных диполей и сформулированы правила диаграммной техники, позволяющие графически суммировать и преобразовывать различные вклады. Представленная техника, в частности, позволяет выяснить физическую природу различных механизмов поляризации, вносящих вклад в регулируемые взаимодействия, и провести сравнение поведения данных вкладов в коллоидных и молекулярных системах. Важность разработанного метода в том, что он позволяет эффективно оценивать вклады от многочастичных взаимодействий и строить интерполяции многочастичных потенциалов для реальных коллоидных систем при заданных характеристиках внешних полей. Такие потенциалы можно использовать в моделировании методом молекулярной динамики для количественного анализа наблюдаемых свойств.

В **четвертой главе** развитая диаграммная техника применяется для анализа регулируемых взаимодействий между сферически симметричными коллоидными частицами. Здесь автором получено несколько очень интересных и важных результатов. В частности, был предложен элегантный способ построения эффективных межчастичных потенциалов путем разложения по базисным функциям, определяемым диаграммами ряда теории возмущений, соответствующих различным типам потенциальной энергии. Коэффициенты такого разложения при этом определяются путем минимизации ошибки модели на результатах численных расчетов. С помощью данного метода был построен модельный потенциал, позволяющий описывать парную и неаддитивную часть потенциальной энергии в регулируемых коллоидных системах. Отмечу, что рассматриваемый способ построения эффективных потенциалов по своей сути является задачей машинного обучения с учителем (supervised machine learning), в которой роль обучающего датасета играют результаты численных расчетов. Использование алгоритмов машинного обучения для построения точных и вычислительно эффективных межчастичных потенциалов является общим трендом современной вычислительной физики конденсированного состояния, поэтому данное направление является крайне перспективным и безусловно должно развиваться автором в дальнейшем.

**Пятая глава** посвящена исследованию особенностей регулируемых взаимодействий в системе анизотропных коллоидных частиц. При использовании диаграммной техники автору удалось получить потенциал регулируемого взаимодействия для анизотропных частиц в плоских вращающихся полях и исследовать его свойства. Было показано, что в случае анизотропных частиц появляется ряд новых интересных эффектов. В частности, эффекты, связанные с вращением частиц, могут приводить к тому, что дальнедействующие регулируемые взаимодействия становятся отталкивающими. Также был проведен сравнительный анализ регулируемых взаимодействий между анизотропными коллоидами с ориентационными, индукционными и дисперсионными взаимодействиями в молекулярных системах. Было показано, что анизотропные коллоиды имеют отличные от молекулярных систем асимптотики взаимодействий и обладают другой симметрией относительно вращений частицы.

В **шестой главе** автор применяет развитые выше методы и результаты для случая композитных коллоидных частиц. Изучение подобных систем крайне популярно в последние годы, поскольку варьирование внутренней структуры дает дополнительные степени свободы при настройке эффективных взаимодействий, что позволяет наблюдать

новые нетривиальные эффекты. В диссертационной работе К.А. Комарова делается первый шаг в данном направлении для коллоидных частиц во вращающихся полях. Автором рассмотрен важный частный случай композитных частиц: сферически симметричные частицы типа «ядро-оболочка» (core-shell). Было рассмотрено два типа структуры ядра: однородное ядро и ядро с нановключениями. Важнейшим результатом данной главы является утверждение, что регулируемые взаимодействия между композитными частицами могут быть отображены на взаимодействия между однородными частицами с эквивалентной поляризуемостью.

В процессе ознакомления с диссертационной работой К.А. Комарова возникли следующие вопросы и замечания.

1. Ключевым моментом любой теории возмущений является анализ малого параметра, по степеням которого производится разложение. От значения такого параметра во многом зависит успех всей теории. Для теории возмущений, развитой в работе, таким параметром является параметр  $\lambda$ , определяемый значениями диэлектрических проницаемостей частиц и сольвента. К сожалению, в диссертации отсутствует подробное обсуждение значений параметра в практически важных случаях (указаны только численные значения возможного интервала). Возникают следующие вопросы:

- каково значение  $\lambda$  для реальных систем, обычно используемых в экспериментах?
- возможна ли ситуация, когда параметр  $\lambda$  не является малым, и задача становится существенно непертурбативной?

2. В тексте диссертации упоминается, что построенная диаграммная техника позволяет исследовать сходимость рядов возмущений. Проводился ли такой анализ? В частности, исследовалась ли сходимость ряда (3.17) для парного взаимодействия?

3. В параграфе 4.1 было показано, что внешние поля с различными годографами могут иметь одинаковые дипольные корреляционные матрицы и, следовательно, индуцировать в коллоидной системе эквивалентные взаимодействия. Возможно ли экспериментально проверить данный интересный результат на существующих в настоящее время установках? Вопрос фактически сводится к тому, какие из годографов, представленных на Рис. 4.2 можно реализовать экспериментально.

4. Как говорилось выше, предложенный в параграфе 4.3.1 способ построения эффективных потенциалов по своей сути является задачей машинного обучения с

учителем (supervised machine learning), в которой роль обучающего датасета играют результаты численных расчетов. Поскольку такие расчеты очень громоздки и реально могут быть осуществлены только для парных и тройных кластеров, возникает вопрос о репрезентативности такого датасета для построения реалистичных потенциалов, способных количественно описывать свойства коллоидных систем.

Указанные замечания являются техническими и не снижают общую ценность диссертации. Диссертационная работа «Регулируемое взаимодействие коллоидных частиц во внешних полях» является законченной научно-квалификационной работой, удовлетворяющей требованиям пункта 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ №842 от 24.09.2013, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор, Комаров Кирилл Алексеевич, заслуживает присуждения ему степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – «физика конденсированного состояния».

Автор отзыва согласен на обработку персональных данных.

Официальный оппонент,  
заведующий лабораторией неупорядоченных систем  
Института металлургии УрО РАН,  
доктор физико-математических наук  
по специальности 01.04.07 –  
«Физика конденсированного состояния»

Рыльцев Роман Евгеньевич

Дата: «23» сентября 2021 г.

620016 г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 101, Институт металлургии УрО РАН  
Рабочий телефон: 8 (343) 232-91-04, адрес электронной почты: [rylcev@mail.ru](mailto:rylcev@mail.ru)

Подпись Рыльцева Р.Е. заверяю:

Ученый секретарь ИМЕТ УрО РАН, к.х.н.

Долматов Алексей Владимирович