

УТВЕРЖДАЮ  
Зам. Директора ФТИ им А.Ф. Иоффе,  
д.ф.-м.н., П.Н. Брунков

№16» сентября 2021 г.

**ОТЗЫВ**  
**Ведущей организации**  
**Федерального государственного учреждения науки**  
**Физики-технический институт имени А.Ф. Иоффе**  
**Российской академии наук**  
**на диссертацию Комарова Кирилла Алексеевича**  
**«Регулируемое взаимодействие коллоидных частиц во внешних полях»,**  
**представленную на соискание ученой степени**  
**кандидата физико-математических наук**  
**по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния**

**Актуальность исследования.** Исследование физических свойств дисперсных систем различной природы, включая коллоидные суспензии и эмульсии, а также исследование механизмов управления структурой и термодинамикой таких систем при помощи внешних полей представляет собой важную научную проблему физики конденсированного состояния.

Наведение внешних управляющих полей приводит к возможности управлять потенциальной энергией системы и наблюдать за ней с разрешением отдельных частиц. Изменяя амплитуду внешнего поля, можно регулировать эффективную температуру системы, а меняя тип поля – форму потенциала и пространственный характер взаимодействия. Такой вид регулирования, обладает высокой динамичностью, что предоставляет большие возможности по применению коллоидных регулируемых систем как для изучения фундаментальных вопросов современной физики классического конденсированного состояния, так и для прикладных задач.

Разработка новых теоретических принципов и методов расчета взаимодействий в таких системах является актуальной научной задачей физики конденсированного состояния. Сложность расчета регулируемых

взаимодействий связан в первую очередь с самосогласованностью задачи: существенной ролью взаимной переполаризации частиц одновременно с их взаимодействием с внешним полем. Отсюда возникает ряд научных задач, связанных, как с разработкой эффективных теоретических методов расчета регулируемых взаимодействий, так и анализом механизмов, управляющих регулируемым взаимодействием, а также сравнением регулируемых и молекулярных взаимодействий с целью поиска сходства и различия.

**Достоверность результатов** подтверждается корректностью использования методов физики конденсированного состояния и методов вычислительной физики; полученные результаты согласуются с ранее известными результатами, представленными в литературе. Достоверность подтверждается согласием результатов, полученных на основе разных подходов, включающих теоретические и вычислительные методы решения поставленных задач. Результаты работы опубликованы в ведущих мировых научных журналах, докладывались как на российских, так и на международных конференциях.

**Личный вклад автора** состоит в разработке теоретических моделей и подготовке программных кодов, а также в проведении расчетов и сопоставлении результатов теории и численных экспериментов. Все основные результаты получены автором лично или при его непосредственном участии.

**Научная новизна.** Диссертация обладает высокой степенью научной новизны, связанной как с постановкой задач, разработанными теоретическим методами и моделями, так и полученными результатами. В частности, впервые Разработана и программно реализована численная физическая модель регулируемого взаимодействия между коллоидными частицами произвольной формы. Построено численное решение задачи взаимодействия таких частиц во внешних направленных, плоских и конических электрических полях, которое учитывает переполаризацию частиц в ближней зоне. Впервые построена теория возмущений для модели самосогласованных точечных диполей применительно к регулируемым коллоидным системам и разработана диаграммная техника для дипольного взаимодействия общего вида. Построен модельный многочастичный потенциал регулируемого взаимодействия для случая сферически-симметричных коллоидных частиц. Впервые установлено влияние вида пространственного годографа вращающегося поля на профиль регулируемого взаимодействия и предложен способ генерации эквивалентных взаимодействий при помощи различных пространственных годографов. Построен парный потенциал регулируемого взаимодействия для случая анизотропных коллоидных частиц и найден способ расчета неаддитивности взаимодействия в таких системах с помощью диаграммного подхода. А также впервые показано, что изменение внутреннего строения коллоидных частиц является перспективным способом

для дополнительного регулирования характера регулируемых взаимодействий во вращающихся электрических и магнитных полях.

**Структура и содержание диссертации.** Диссертация 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, формируется цель, перечисляются положения, выносимые на защиту, описываются научная новизна, достоверность, фундаментальная и практическая значимость результатов работы, личный вклад автора, апробация работы и краткое содержание по главам.

**Первая глава** посвящена обзору и анализу методов расчета базовых и регулируемых взаимодействий в коллоидных системах. Проведена классификация взаимодействий в коллоидных суспензиях и основным видам базовых межчастичных потенциалов для случая зарядовой и стерической стабилизации. Кратко описываются системы с дипольным регулируемым взаимодействием, полученных на границе фаз, либо под действием внешнего поля. В завершении главы формируется цель и задачи диссертации.

**Вторая глава** посвящена задаче численного расчета регулируемого взаимодействия в системе сферически-симметричных частиц, находящихся во внешних полях. Впервые представлено интегральное уравнение простого поляризованного слоя, адаптированное для случая кластеров коллоидных частиц. Строится метод расчета потенциальной энергии взаимодействия в системе, регулируемой внешними полями. Приводятся результаты расчетов регулируемого взаимодействия для сферически-симметричных коллоидных частиц во внешних электрических полях. Сравняется три модели, а именно модель фиксированных точечных диполей, модель самосогласованных точечных диполей и модель сплошной среды, основанная на решении интегрального уравнения простого поляризованного слоя. Анализируются парные потенциалы и неаддитивные эффекты при регулируемом взаимодействии коллоидных частиц.

**Третья глава** посвящена построению теории возмущений для модели самосогласованных точечных диполей. Продемонстрирована разработанная диаграммная техника для дипольного взаимодействия, позволяющая иллюстрировать механизмы взаимной переполаризации и выявлять причины различия в форме потенциалов взаимодействия между коллоидными частицами с различными типами поляризуемости.

**Четвертая глава** посвящена применению диаграммного метода к системе сферически-симметричных коллоидных частиц, регулируемой внешним обобщенным полем. Вводятся основные типы годографов внешних полей, двумерных и трехмерных, и проводится обобщение дипольной корреляционной матрицы. Проводится анализ многочастичного потенциала в рамках теории межмолекулярных взаимодействий.

**Пятая глава** посвящена применению модели возмущенных самосогласованных точечных диполей и диаграммного метода для теоретического описания регулируемого взаимодействия анизотропных коллоидных частиц. Построен потенциал регулируемого взаимодействия для случая анизотропных частиц с фиксированной ориентацией в пространстве, а также для быстро вращающихся анизотропных микрочастиц (ротаторов). Проводится анализ анизотропного регулируемого взаимодействия в коллоидных суспензиях и последующее его сравнение с взаимодействием между молекулами той же симметрии.

**Шестая глава** посвящена численному решению задачи расчета регулируемого взаимодействия в системе сферически-симметричных композитных частиц, находящихся во внешних электрических полях. Вводится система интегральных уравнений для расчета поляризуемости композитных частиц. Рассмотрен случай слоистых частиц, когда существует дополнительная граница перехода между средами внутри частицы, и случая частиц с нано-вкраплениями. Особое внимание уделяется сравнению результатов, полученных с помощью метода граничных элементов и при помощи модели возмущенных самосогласованных точечных диполей.

**В заключении** сформированы основные результаты диссертации.

Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации. Основное содержание диссертационной работы в полной мере отражено в 5 научных работах, которые опубликованы в журналах, рекомендованных ВАК РФ для публикации основных результатов научных работ соискателей ученых степеней кандидата наук (5 индексируются в Scopus, 5 – в Web of Science). О высоком уровне результатов диссертации косвенно свидетельствует то, что статья вошла в коллекцию «Editors' Choice 2019» журнала The Journal of Chemical Physics. Всего автор имеет 7 научных публикаций, индексируемых в Scopus и в Web Of Science.

**Фундаментальная значимость.** Разработанный диаграммный метод позволяет изучать характер взаимодействий и строить модельные потенциалы, в частности для регулируемых коллоидных систем различной природы. Другим важным результатом является разработка единого теоретического подхода к регулируемым взаимодействиям между частицами в коллоидных суспензиях во внешних полях. Разработанные методы позволяют проводить детальный анализ типа взаимодействия в коллоидных системах, проводя сравнение с молекулярными системами. Результаты диссертации вносят вклад в разработку теории конструирования регулируемых взаимодействий с заданными свойствами в различных коллоидных и эмульсионных системах.

**Практическая значимость.** Практической ценностью обладает построенный модельный потенциал, а также метод аппроксимации мягких численных методов, основанных на решении уравнения Лапласа с высокой

вычислительной точностью. Найденные потенциалы, учитывающие неаддитивность регулируемого взаимодействия, позволяют проводить моделирование с помощью методов молекулярной динамики и методов Монте-Карло, для анализа коллективной динамики и явлений фазовых переходов в коллоидных структурах при изменении внешнего поля. Практической значимостью обладает решение задачи о влиянии типа годографа внешнего поля на форму потенциала регулируемых взаимодействий. Полученные результаты позволяют проектировать режимы работы экспериментальных установок для создания управляемых взаимодействий, используя как электрические, так и магнитные поля.

#### **Замечания по диссертационной работе.**

По диссертационной работе имеются следующие замечания:

1. Есть ли физические причины, по которым можно пренебречь 4 и 5 частичными взаимодействиями? Или имеется числовой коэффициент, обеспечивающий малость указанных взаимодействий?
2. В диссертации рассматриваются регулируемые взаимодействия в условиях вращения системы. Из каких соображений выбрана частота вращения?
3. При сравнении расчетов и экспериментальных данных для растворов на основе воды не ясно как учитывалось то, что диэлектрическая проницаемость воды существенным образом зависит от содержания в ней солей?

#### **Заключение**

В заключении необходимо отметить, что указанные замечания не представляются принципиальными и не изменяют общей положительной оценки уровня диссертации. Диссертационная работа написана ясным научным языком. Полученные в работе результаты являются новыми и важными для физики конденсированного состояния, науки о материалах и физики мягкой материи.

Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 5 научных работах индексируемых в Scopus/Web of Science, в том числе 5 в журналах рекомендованных ВАК РФ для публикации основных результатов научных работ.

Автореферат диссертации и опубликованные работы полностью отражают ее содержание.

Диссертационная работа Комарова Кирилла Алексеевича «Регулируемое взаимодействие коллоидных частиц во внешних полях» отвечает всем требованиям Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденных постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013 г. (ред. 02.08.2016 г.), предъявляемым к кандидатским

диссертациям, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

Настоящий отзыв обсужден и одобрен 16 сентября 2021 года на научном семинаре сектора «Теории оптических и электронных явлений в полупроводниках».

Зав. сектором ФТИ им. А.Ф. Иоффе,  
доктор физ.-мат. наук, профессор

Н. С. Аверкиев

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе,  
194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул. 26  
телефон: +79217940202  
электронная почта: [averkiev@les.ioffe.ru](mailto:averkiev@les.ioffe.ru)