

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Насырова Артура Дамировича «Обобщенный интерполяционный метод расчета парных корреляционных функций в классических жидкостях и мягкой материи», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 — Физика конденсированного состояния

Автореферат диссертации А. Д. Насырова посвящён актуальной проблеме построения эффективного описания структурных корреляций в жидкостях. Основным объектом исследования выступает парная корреляционная функция, а центральным методическим результатом является обобщение интерполяционного метода на широкий круг двумерных и трёхмерных систем. Актуальность работы обусловлена тем, что существующие подходы к расчёту $g(r)$ в плотных жидкостях либо обладают ограниченной точностью, либо требуют значительных вычислительных ресурсов и не дают аналитически параметризованных аппроксимаций. В этом контексте предложенный автором метод представляет собой своевременный и востребованный инструмент. Особенно интересным представляется анализ параметров отдельных корреляционных пиков. Полученные результаты показывают, что нормированные характеристики корреляционных оболочек демонстрируют близкие закономерности для существенно различающихся систем. Это позволяет рассматривать параметры пиков как удобный способ сопоставления структуры жидкостей различной природы.

Практически значимым результатом является возможность интерполяционного восстановления $g(r)$ между опорными состояниями. Такой подход потенциально позволяет сократить объём прямых вычислений при исследовании зависимости структуры жидкости от параметров состояния. Показано, что относительная ошибка интерполяции составляет менее 1 полутора процентов, а расчёт каждой новой функции распределения после построения интерполяции занимает минимальное время. В автореферате также отмечается возможность дальнейшего использования метода при анализе экспериментальных структурных данных, включая рентгеновское и нейтронное рассеяние, а также спектроскопические методы, такие как EXAFS. Отдельно следует отметить экспериментальную верификацию метода на основе данных о коллоидных частицах во внешних вращающихся электрических полях. В работе использован широкий набор современных вычислительных средств, включая LAMMPS, HOOMD-Blue и CompuCell3D, а постобработка выполнена с применением авторских программных реализаций на Python3 / C++ / CUDA. Совокупность численных и экспериментальных результатов свидетельствует о хорошем уровне обоснованности сделанных выводов. Достоверность результатов подтверждается также согласованностью выводов, полученных независимыми теоретическими, вычислительными и экспериментальными методами.

В качестве замечаний по автореферату диссертационной работы можно отметить следующее:

1. В автореферате неоднократно подчёркивается универсальность как самого интерполяционного метода, так и нормированных параметров корреляционных пиков. При этом остаётся не вполне ясным, в каком именно смысле используется этот термин: речь идёт о независимости от типа межчастичного потенциала, от размерности системы, от плотности и

температуры. Было бы полезно указать, какие именно параметры и в каком диапазоне условий действительно универсальны, а какие — нет.

2. Одно из выносимых на защиту положений касается восстановления парной корреляционной функции однородного состояния по данным о кластере конечного размера. Однако, в автореферате не обсуждаются систематические погрешности, связанные с конечным размером кластера: как масштабируется ошибка восстановления с ростом кластера, существует ли предельный минимальный размер, при котором метод ещё работает, и как учитываются краевые эффекты. Эти вопросы принципиальны для практического применения подхода к реальным ограниченным системам.

3. Значительная часть автореферата посвящена исследованию фазового расслоения активной системы с межчастичным притяжением и эволюции бинодалей при изменении активности. При этом остаётся не вполне ясным, как именно результаты этой главы связаны с центральным предметом диссертации — интерполяционным методом расчёта $g(r)$.

Представленные замечания, однако, не снижают общую положительную оценку диссертационной работы. Автореферат даёт целостное представление о целях, методах и основных результатах исследования. Диссертационная работа является завершённой научно-квалификационной работой, соответствует установленным требованиям п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», а Насыров Артур Дамирович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 — Физика конденсированного состояния.

Манцевич Владимир Николаевич

д.ф.-м.н., 1.3.11 – физика полупроводников, доцент, профессор,
кафедра физики полупроводников и криоэлектроники,
Физический факультет МГУ им. М.В. Ломоносова 119991, ГСП-1, Москва Ленинские горы,
МГУ имени М.В. Ломоносова, дом 1, стр. 2, Физический факультет
+7(495) 939-50-72
E-mail: vmantsev@yahoo.com

_____ / Манцевич Владимир Николаевич / 09.10.2026 /

Подпись В.Н. Манцевича заверяю:

