

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу

Насырова Артура Дамировича

«Обобщенный интерполяционный метод расчета парных корреляционных функций в классических жидкостях и мягкой материи»

представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния

Представленная диссертационная работа посвящена развитию интерполяционного метода для парной корреляционной функции $g(r)$ в неупорядоченных системах, которая является одной из основных структурных характеристик, измеряемых экспериментально и используемых для количественного определения термодинамических величин. Данная задача имеет фундаментальное значение для статистической физики жидкостей и представляет практический интерес для вычислительного моделирования.

Аналитическое определение функции $g(r)$ в случае жидкостей представляет собой нетривиальную задачу. Интегральные уравнения статистической физики требуют замыканий, корректность которых, как правило, ограничивается системами определенного класса. Поэтому поиск подходов, которые позволяют извлекать закономерности в контуре функции $g(r)$ на основе ограниченного набора симуляционных или экспериментальных данных и затем восстанавливать структуру системы, является актуальной задачей физики конденсированного состояния.

Основная идея интерполяционного метода, рассматриваемого в диссертации А.Д. Насырова, заключается в представлении функции $g(r)$ в виде комбинации отдельных вкладов, соотносимых с псевдокоординационными сферами и выделяемых посредством геометрического разбиения Вороного. Такое представление позволяет анализировать изменение положения, ширины и формы отдельных корреляционных пиков и, тем самым, связывать метод интерполирования с физической структурой жидкости.

Основные результаты работы опубликованы в 7 научных статьях Q1 WoS/Scopus;

Содержание и основные результаты диссертационной работы

Диссертация состоит из введения, трех глав, общих выводов и заключения. Во введении сформулированы цель и задачи исследования, научная новизна, положения, выносимые на защиту, приведены сведения о методах исследования, достоверности результатов, их апробации и публикациях. Работа направлена на проверку

применимости интерполяционного метода к широкому классу двумерных и объемных неупорядоченных систем, включая классические жидкости, активную материю, коллоидные системы и модели клеточных тканей.

Первая глава имеет обзорно-методический характер. В ней последовательно рассмотрены основные способы описания парных корреляций в классических системах: функция радиального распределения, уравнение Орнштейна–Цернике, иерархия Боголюбова–Борна–Грина–Кирквуда–Ивона и интерполяционные представления для корреляционных функций. Излагаются фундаментальные подходы, а также представлен обзор современных методов работы с парными корреляционными функциями.

Во второй главе изложена теория интерполяционного метода для функции $g(r)$ применительно к жидкостям. Рассматриваются двумерные системы Леннарда–Джонса с разными плотностями, системы с обратностепенными потенциалами, так называемые «активные жидкости», идеальный газ, модель биологической клеточной ткани, а также коллоидная система. Для каждого состояния $g(r)$ представляется как сумма корреляционных пиков, соответствующих последовательным оболочкам соседей. Анализ температурных и параметрических зависимостей характеристик этих пиков позволяет построить интерполяционные зависимости и восстанавливать структурную функцию в промежуточных состояниях. С точки зрения вычислительной физики особенно важным представляется то, что оценивается качество восстановления. В работе сопоставляются результаты молекулярной динамики и восстановленные функции распределения, анализируются погрешности связанных с $g(r)$ величин. Кроме того, во второй главе представлены результаты сопоставления с экспериментальными данными для системы двумерных коллоидных частиц во вращающемся электрическом поле. Такая система является модельным аналогом многих систем мягкой конденсированной материи: отдельные частицы непосредственно наблюдаемы, а их эффективное взаимодействие может управляться внешним воздействием. Рассматриваются объемные жидкости, такие как система Леннарда–Джонса, расплавы железа и ртути. Делается вывод о том, что в случае таких систем основные закономерности сохраняются. Следует отметить, что для объемного случая полная интерполяционная реконструкция $g(r)$, аналогичная двумерному случаю, отдельно не реализована, а демонстрируются принципы метода.

Один из основных результатов второй главы связан с анализом универсальности характеристик корреляционных пиков в радиальном распределении частиц. Для разных систем сопоставлены нормированные значения среднего расстояния, дисперсии, асимметрии. Устанавливается различие между относительно универсальными характеристиками структуры и параметрами, чувствительными к межчастичному взаимодействию.

В этой же главе предложен подход к восстановлению корреляционных характеристик однородного состояния по данным о кластере конечного размера. На примере системы с фазовым расслоением исследуется сходимость характеристик корреляционных оболочек по мере роста кластера. Данный результат имеет самостоятельное значение для численного анализа систем с конечным числом частиц и для ситуаций, в которых экспериментально доступна лишь ограниченная область однородной фазы.

Третья глава посвящена фазовым явлениям в активной неравновесной материи. Методом молекулярной динамики рассматривается двумерная система частиц с притягивающим взаимодействием и активным движением. Для распознавания локальных фазовых состояний используется геометрический критерий, основанный на ячейках Вороного. В широком диапазоне температуры и активности построены фазовые диаграммы, обнаружены бифуркационные режимы, гистерезис и область сосуществования трех фаз.

Достоинства работы

В целом, диссертация производит положительное впечатление как комплексное вычислительное исследование. Существенным достоинством работы является проверка одной и той же идеи на различных системах. Рассматривается двумерная система Леннарда–Джонса, металлические расплавы, система коллоидных частиц, модели клеточной ткани.

Отдельного внимания заслуживают результаты, связанные с сопоставлением расчетных результатов с экспериментальными, что осуществляется для примера системы коллоидных частиц. Коллоидные частицы представляют собой модельные системы реальных конденсированных сред, в которых микроструктура доступна непосредственному наблюдению на уровне отдельных частиц. Воспроизводимость экспериментальных данных может непосредственно указывать на достоверность метода.

Отдельно следует отметить применение метода к моделям биологических клеток. Хотя в данном случае речь идет о достаточно простой модели клеточной ткани, тем не менее полученные результаты демонстрируют применимость предлагаемого метода к совокупности систем различной природы.

Достоверность и обоснованность результатов поддерживается использованием апробированных пакетов молекулярной динамики и моделирования, сопоставлением с литературными данными, воспроизводимостью численных результатов и публикацией основных результатов в рецензируемых научных журналах.

Замечания по содержанию диссертации

1. Замечание касается формулировок первого положения, выносимого на защиту — «Экспериментально подтверждены основополагающие принципы интерполяционного метода для расчета парных корреляционных функций в широком классе двумерных жидкостей», а также второй задачи — «Провести экспериментальную проверку интерполяционного метода на основе данных о коллоидных частицах во внешних вращающихся электрических полях». Данные формулировки предполагают непосредственное участие соискателя в проведении эксперимента, в то время как проверка применимости интерполяционного метода осуществлялась им на основе ранее полученных и предоставленных ему экспериментальных данных.
2. В работе не поясняется физический смысл параметров, задающих степенную зависимость в интерполяционном методе для радиальной функции распределения.
3. Не оговариваются границы применимости интерполяционного метода. Этот метод по восстановлению радиальной функции распределения на основе трех параметров для каждой псевдокоординации, по всей видимости, применим лишь к простым жидкостям, где каждая псевдокоординатная оболочка определяется лишь единственным значением корреляционной длины, а ее ширина — температурой. В случае же расплавов поливалентных металлов (в том числе, рассматриваемых в работе расплавов железа и ртути) выраженные эффекты экранирования электронного газа в межионном взаимодействии приводят к специфическому ближнему порядку, отображаемому в более сложном контуре как главного максимума $g(r)$, так и всей функции $g(r)$.
4. Не поясняется, чем обусловлен наблюдаемый излом в зависимостях параметров метода в случае капли.

Указанные замечания не затрагивают основных результатов диссертации и в значительной степени могут представлять собой направления для дальнейшего развития предложенного подхода.

Заключение

Диссертационная работа А.Д. Насырова «Обобщенный интерполяционный метод расчета парных корреляционных функций в классических жидкостях и мягкой материи» представляет собой завершенное научное исследование, в котором решается актуальная задача физики конденсированного состояния и вычислительной физики — построение и проверка эффективного метода описания пространственных корреляций в широком классе неупорядоченных систем. Она полностью соответствует всем критериям, установленным Положением о присуждении ученых степеней.

Работа содержит новые результаты, связанные с развитием интерполяционного представления парных корреляций, его распространением на объемные многочастичные системы и модели активных неравновесных систем, анализом универсальности параметров корреляционных оболочек и восстановлением структурных характеристик по данным для компактным кластеров. Полученные результаты обладают научной новизной, теоретической и практической значимостью и в достаточной степени апробированы.

По актуальности, научной новизне, объему выполненных исследований, достоверности результатов и уровню их публикации диссертационная работа отвечает требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор, Насыров Артур Дамирович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния.

Автор отзыва согласен на включение своих персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Официальный оппонент:

Заведующий кафедрой вычислительной физики
и моделирования физических процессов
ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский)
федеральный университет»,
доктор физико-математических наук, профессор

Мокшин Анатолий Васильевич

г. Казань 420008, ул. Кремлевская, 16а
ФГАО ВО «Казанский (Приволжский)
федеральный университет,
Институт физики

email: anatolii.mokshin@kpfu.ru
тел.: +7 843 233 77 37
факс: +7 843 238 09 94
http://kpfu.ru/anatolii.mokshin



22 сентября 2026 г.