

ОТЗЫВ

официального оппонента
на диссертационную работу А.Д. Насырова
«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

Одной из центральных задач современной физики конденсированного состояния является установление связи между микроскопической структурой вещества, характером межчастичных взаимодействий и наблюдаемыми макроскопическими свойствами. Для жидкостей и других неупорядоченных сред естественным структурным объектом такого анализа служит парная корреляционная функция, или радиальная функция распределения $g(r)$. Она непосредственно характеризует пространственную организацию частиц и одновременно входит в выражения для ряда термодинамических величин. При этом получение компактного, физически содержательного и вычислительно эффективного описания $g(r)$ для жидкостей, особенно при наличии сложных, многочастичных или неравновесных взаимодействий, остается нетривиальной задачей.

В этом отношении тема диссертационной работы А.Д. Насырова представляется актуальной. Автор исследует возможности интерполяционного метода, основанного на разложении парной корреляционной функции на вклады корреляционных оболочек, определяемых посредством разбиения Вороного. Существенно, что работа не ограничивается одной модельной системой: метод последовательно рассматривается для двумерных и трехмерных жидкостей, равновесных и активных систем, модельных парных и многочастичных взаимодействий, экспериментальной коллоидной системы, а также модели биологической клеточной ткани. Такой выбор объектов позволяет оценивать не только точность метода в отдельных случаях, но и границы его применимости для физически разных систем.

Диссертация состоит из введения, трех глав, общих выводов и заключения. Список литературы включает 209 источников. Основные результаты работы опубликованы в 7 научных статьях в рецензируемых журналах; результаты докладывались на всероссийских и международных конференциях.

Общая характеристика работы по главам

Во введении обоснована актуальность исследования, сформулированы цель и задачи работы, научная новизна и положения, выносимые на защиту, приведены сведения о методологии, достоверности результатов, личном вкладе автора, теоретической и практической значимости, апробации и публикациях. Цель работы сформулирована как проверка применимости интерполяционного метода для расчета парной корреляционной функции в широком классе физических систем, включая двумерные и трехмерные, классические и комплексные жидкости различной природы и с различными типами межчастичных взаимодействий.

Первая глава носит обзорный характер. В ней рассмотрена роль парной корреляционной функции в статистической физике и физике конденсированного состояния, ее связь с межчастичными взаимодействиями и термодинамическими характеристиками. Обсуждаются интегральное уравнение Орнштейна–Цернике и различные замыкания, иерархия Боголюбова–Борна–Грина–Кирквуда–Ивона, а также интерполяционные подходы к описанию корреляций. Отдельно изложены предпосылки интерполяционного метода, ранее применявшегося к кристаллическим системам. Наряду с изложением теоретических основ глава дополнена обзором современных результатов, демонстрирующих возможности парной корреляционной функции как эффективного инструмента исследования. Глава логично подводит к главной проблеме: существующие методы по расчету парной корреляционной функции либо требуют существенных вычислительных затрат, либо используют приближения и замыкания, точность которых зависит от класса рассматриваемых систем.

Вторая глава является основной по объему и содержанию. В ней изложена теория интерполяционного метода для жидкостей и проведена его проверка на нескольких классах систем. Парная корреляционная функция $g(r)$ представляется как сумма корреляционных пиков, связанных с последовательными корреляционными сферами, определяемыми на основе диаграммы Вороного. Анализируется температурная эволюция формы и параметров этих пиков, а также возможность восстановления $g(r)$ по ограниченному набору опорных состояний.

Для двумерных систем рассмотрены жидкости Леннард–Джонса, системы с обратностепенными потенциалами различной мягкости, активная жидкость, идеальный газ и модель биологической клеточной ткани. Важным элементом главы является сопоставление с экспериментальными данными для двумерной коллоидной жидкости с регулируемыми взаимодействиями во вращающемся электрическом поле. Экспериментальные данные

подтверждают наблюдаемое при моделировании сходство форм нормированных корреляционных пиков. Для рассмотренных двумерных систем автор сообщает об ошибках интерполяции $g(r)$ и вычисленных по ней энергии и давления порядка 1,5 % и менее. После подготовки интерполяции расчет $g(r)$ для новой температуры занимает существенно меньше времени, чем прямой молекулярно-динамический расчет.

Далее подход к разложению и анализу корреляционных пиков применяется к трехмерным системам. Рассмотрены трехмерная жидкость Леннард-Джонса, а также жидкие железо и ртуть, моделируемые с использованием многочастичных потенциалов встроенного атома (EAM). Показано, что основные закономерности поведения корреляционных пиков сохраняются при переходе к трехмерным системам и при наличии многочастичных взаимодействий. При этом автор отмечает, что явное построение полной интерполяционной схемы восстановления $g(r)$ для трехмерных жидкостей в диссертации не выполнено.

В этой же главе исследуется степень универсальности параметров корреляционных пиков. Для рассмотренных систем показана близость нормированных зависимостей нормы, среднего расстояния и дисперсии от номера корреляционной сферы. Более чувствительные к форме характеристики — асимметрия и эксцесс — заметнее различаются для ближайших оболочек и сближаются с характеристиками идеального газа на больших расстояниях. На этой основе предложена интерпретация перехода от локальных «кристаллоподобных» корреляций к дальним «газоподобным».

Отдельный раздел второй главы посвящен восстановлению структурных характеристик однородного состояния по данным для кластера конечного размера. На примере системы фазового расслоения показано, что при увеличении размера конденсированного кластера параметры корреляционных пиков приближаются к значениям однородной системы. При реконструкции $g(r)$ используются также параметры пиков, полученные из отдельного моделирования однородной системы. Результат представляет интерес для анализа ограниченных и экспериментально наблюдаемых систем, в которых получение статистики для большого однородного ансамбля затруднено.

Третья глава посвящена фазовым явлениям в активной неравновесной материи. Методом молекулярной динамики исследована двумерная система частиц Леннард-Джонса с Ланжевеновской динамикой, в которой конкурируют межчастичное притяжение и активное движение. Для идентификации газовой, жидкой и твердой субфаз используется локальный структурный критерий на основе геометрии ячеек Вороного. На основе расчетов построены фазовые диаграммы в широком диапазоне активности и

температуры. Автор показывает изменение положения и формы ветвей сосуществования с ростом активности, выделяет четыре области фазового поведения и интерпретирует полученные данные как проявление сосуществования трех фаз, бифуркационного и выраженного гистерезисного поведения. Эти результаты дополняют основную методическую часть диссертации дополнительным исследованием неравновесной системы.

Сильные стороны и научная значимость работы

К числу наиболее сильных сторон диссертации следует отнести сочетание в одной работе теоретического анализа, молекулярно-динамического моделирования в разных программных пакетах, обработки экспериментальных данных с коллоидными частицами. Коллоидные суспензии являются удобными модельными системами для исследования общих закономерностей физики конденсированного состояния: характерные пространственные и временные масштабы позволяют наблюдать отдельные частицы и непосредственно восстанавливать структуру ансамбля, тогда как управляемые внешними полями взаимодействия дают возможность менять состояние системы в контролируемых условиях. Поэтому согласование форм нормированных корреляционных пиков, полученных в моделировании и эксперименте с коллоидными частицами в электрических полях, усиливает убедительность выявленных закономерностей и показывает, что они не ограничиваются одной модельной системой.

Второй важной особенностью является проверка принципов метода на трехмерных многочастичных системах, а именно моделей жидких Fe и Hg с многочастичными ЕАМ-взаимодействиями. В данном случае важен не просто переход от двумерной геометрии к трехмерной, а сохранение основных закономерностей корреляционных оболочек при качественном изменении модели межатомного взаимодействия. Это дает основания предполагать, что выявленные свойства не являются специфическими для простых модельных парных потенциалов.

Третья сильная сторона — применение того же структурного языка к модели биологической клеточной ткани. Воспроизведение парных корреляций в этой модели показывает перспективность дальнейшей проверки подхода для систем иной физической природы. В совокупности с результатами для классических, активных и коллоидных жидкостей это демонстрирует широкий диапазон систем, в которых описание через корреляционные оболочки может быть полезно.

Наконец, заслуживает внимания постановка задачи восстановления свойств однородной фазы по конечному кластеру. Продемонстрированная

связь между размером кластера и сходимостью параметров корреляционных оболочек к объемным значениям может оказаться полезной при анализе систем с ограниченным полем наблюдения, фазовым разделением и конечным числом частиц. С фундаментальной точки зрения эта часть работы затрагивает важный вопрос о том, насколько структурные характеристики макроскопической жидкости могут быть восстановлены по ограниченному числу частиц. Эта часть работы имеет ясный потенциал для дальнейшего развития.

Замечания

1. При восстановлении парной корреляционной функции однородного состояния по данным для конечной капли (раздел 2.6, формула (2.28)) используются норма, среднее расстояние и дисперсия корреляционных пиков, полученные из отдельного моделирования однородной системы при той же плотности. Поэтому было бы полезно уточнить, какая часть характеристик однородной фазы восстанавливается непосредственно из данных капли и возможно ли применять предложенную схему без предварительной информации о параметрах пиков объемной системы. Это позволило бы четче определить границы самостоятельной применимости метода к конечным кластерам.
2. На рис. 3.3 и в выводах главы 3 область одновременного существования газа, жидкости и кристалла в активной однокомпонентной системе интерпретируется как расширение тройной точки. Обычное правило фаз Гиббса к неравновесной системе напрямую неприменимо, однако физический смысл этой области требует более подробного обсуждения. В частности, сумма чисел частиц, отнесённых к различным состояниям, сама по себе не позволяет отличить устойчивое сосуществование трёх макроскопических фаз от локальных включений и межфазных участков. Следовало бы проверить, как границы указанной области зависят от размера системы, времени наблюдения и порогов распознавания фаз.
3. Автор отмечает возможность применения метода к многокомпонентным жидкостям, однако схема такого обобщения в работе не рассмотрена. Представляется важным уточнить, можно ли получить парциальные функции $g_{ij}(r)$, дополнив алгоритм учётом типов частиц, и сохраняются ли установленные закономерности вкладов корреляционных сфер при изменении состава и химического ближнего порядка. Отдельного обсуждения заслуживает возможность интерполяции параметров метода по составу и, в особенности, обоснованность экстраполяции за пределы исследованных составов.

4. Разложение $g(r)$ на вклады корреляционных сфер представляет интерес как способ физической интерпретации её структуры. Вместе с тем в диссертации не проведено прямого сравнения этого подхода с распространёнными методами разделения перекрывающихся пиков, реализованными во многих стандартных программах для обработки данных, например, в OriginPro. Такое сравнение должно учитывать различие исходных данных: предложенный метод использует координаты частиц и топологию соседства, тогда как обычная многопиковая аппроксимация работает с готовой кривой ($g(r)$). Поэтому было бы полезно отдельно оценить точность воспроизведения суммарной функции, достоверность выделения вкладов отдельных оболочек и полные затраты на подготовку данных и расчёт.

Перечисленные замечания носят в основном характер пожеланий к дальнейшему развитию работы и не снижают научной ценности полученных результатов. Они естественным образом возникают из широты поставленной задачи и, по существу, определяют перспективные направления продолжения исследований.

Заключение

Диссертационная работа А.Д. Насырова «Обобщенный интерполяционный метод расчета парных корреляционных функций в классических жидкостях и мягкой материи» представляет собой законченную научную работу, в которой решена актуальная задача физики конденсированного состояния, связанная с развитием и проверкой вычислительно эффективного подхода к анализу парных корреляций в жидких и неупорядоченных системах.

К основным результатам работы относятся экспериментальное подтверждение принципов разложения парной корреляционной функции на корреляционные оболочки для двумерной коллоидной жидкости; демонстрация сохранения основных закономерностей в трехмерных системах с парными и многочастичными взаимодействиями; выявление универсальных и неуниверсальных характеристик корреляционных пиков; демонстрация принципиальной возможности восстановления структурных характеристик однородного состояния по конечному кластеру; а также результаты по фазовому поведению активной системы с межчастичным притяжением. Обоснованность и достоверность результатов обеспечивается сопоставлением теоретических, численных и экспериментальных данных, использованием апробированных методов молекулярной динамики и воспроизводимых вычислительных моделей.

По актуальности, объему выполненных исследований, научной новизне, обоснованности выводов и уровню публикаций диссертационная работа соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям, установленным п.9-11,13,14 Положения «О порядке присуждения ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 г., а ее автор, Насыров Артур Дамирович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Я согласен на обработку моих персональных данных и размещение полного текста настоящего отзыва и сведений об официальном оппоненте в информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и в единой информационной системе.

Официальный оппонент, главный научный сотрудник лаборатории неупорядоченных систем Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института металлургии имени академика Н.А. Ватолина Уральского отделения Российской академии наук (ИМЕТ УрО РАН), доктор физико-математических наук по специальности 01.04.07 – «Физика конденсированного состояния»

Рыльцев Роман Евгеньевич

620016 г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 101, ИМЕТ УрО РАН. Рабочий телефон: 8 (343) 232-91-04, адрес электронной почты: rrylcev@mail.ru

Подпись д.ф.-м.н. Р.Е. Рыльцева удостоверяю:

Учёный секретарь ИМЕТ УрО РАН, к.х.н. П.В. Котенков

«25» сентября 2026 г.

М.П.