

УТВЕРЖДАЮ

Директор Федерального государственного
бюджетного учреждения науки
«Институт физики высоких давлений
им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук» (ИФВД РАН)
академик РАН _____ В.В. Бражкин
« 15 » сентября 2026 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ
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

Актуальность темы исследования

Диссертационная работа посвящена разработке и исследованию нового подхода к описанию парных корреляций в классических жидкостях и системах мягкой материи. Исследование структурной организации жидкостей и других неупорядоченных конденсированных систем остается одной из фундаментальных задач физики конденсированного состояния. Важное место среди таких объектов занимают классические жидкости и комплексные флюиды, в том числе системы мягкой конденсированной материи, характеризующиеся разнообразием межчастичных взаимодействий и структурных состояний.

Одной из основных характеристик структуры жидкостей является парная корреляционная функция, содержащая информацию о пространственном распределении частиц и непосредственно связанная с рядом термодинамических характеристик системы. При этом получение парной корреляционной функции для плотных жидкостей в широком диапазоне параметров состояния остается нетривиальной задачей. Методы, основанные на интегральном уравнении Орнштейна–Цернике и иерархии Боголюбова–Борна–Грина–Кирквуда–Ивона, требуют введения приближений и замыкающих соотношений, выбор которых не является универсальным и во многом определяется особенностями конкретной исследуемой системы, тогда как прямое молекулярно-динамическое моделирование и метод Монте-Карло могут требовать значительных вычислительных ресурсов. Особый интерес представляет возможность создания подхода, применимого не только к простым жидкостям, но и к системам различной размерности и физической природы, в том числе к системам с многочастичными взаимодействиями, системам активной и мягкой материи, а также к экспериментально исследуемым системам. В связи с этим дальнейшее развитие методов расчета и описания парных корреляций в жидкостях и других неупорядоченных конденсированных системах представляет

собой актуальную задачу физики конденсированного состояния.

Цель диссертационной работы

Целью диссертационной работы является 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.

Структура, содержание и объем диссертационной работы

Диссертация состоит из введения, трех глав, общих выводов и заключения, списка литературы. Общий объем составляет 113 страниц. Список литературы содержит 209 источников. Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 7 научных статьях в журналах, входящих в Перечень ВАК РФ и индексируемых в международных базах данных Scopus и Web of Science; все указанные журналы на момент опубликования соответствующих работ относились к первому квартилю.

Во введении обоснована актуальность темы исследования, сформулированы цель и задачи работы, приведены положения, выносимые на защиту, сформулированы научная новизна, теоретическая и практическая значимость полученных результатов, описаны используемые методы, личный вклад автора и апробация работы.

Первая глава содержит литературный обзор современных подходов к описанию парных корреляций в классических конденсированных системах. Рассматривается роль парной корреляционной функции в статистической физике и ее связь с термодинамическими характеристиками вещества. Изложены основные положения теории Орнштейна–Цернике, иерархии Боголюбова–Борна–Грина–Кирквуда–Ивона и интерполяционного метода кратчайших графов, ранее разработанного для кристаллических систем. Приведены современные примеры применения парных корреляционных функций для исследования структуры жидкостей и сложных систем, а также проверки моделей межчастичных взаимодействий. На основании проведенного анализа сформулирована задача обобщения интерполяционного подхода на жидкие и неупорядоченные системы.

Во второй главе представлено обобщение интерполяционного метода расчета парных корреляционных функций на классические жидкости и системы мягкой материи. Предложено представление парной корреляционной функции в виде суммы отдельных корреляционных пиков, соответствующих корреляционным сферам, определяемым на основе разбиения Вороного. Показано, что параметры отдельных корреляционных оболочек могут быть использованы для интерполяционного восстановления парной корреляционной функции по ограниченному набору опорных состояний.

Проведена проверка интерполяционного метода на широком наборе двумерных систем, включающем жидкости Леннарда–Джонса, системы с обратнo-степенными потенциалами различной мягкости, активные жидкости, идеальный газ и модель клеточной ткани. Выполнена экспериментальная проверка основных принципов метода на двумерной коллоидной системе с управляемыми взаимодействиями во внешнем вращающемся электрическом поле. Для исследованных двумерных модельных жидкостей показано, что относительная погрешность интерполяционного восстановления парной корреляционной функции не превышает 1,5 %.

Рассмотрены трехмерная жидкость Леннарда–Джонса, а также жидкие железо и ртуть с многочастичными взаимодействиями, описываемыми потенциалами погруженного атома. Показано сохранение основных закономерностей разложения парной корреляционной функции на корреляционные оболочки при переходе к трехмерным системам и многочастичным взаимодействиям.

Установлены общие закономерности поведения параметров корреляционных оболочек для исследованных систем. Показано, что норма, среднее расстояние и дисперсия корреляционных пиков после соответствующей нормировки демонстрируют близкое поведение при изменении температуры, плотности, размерности и характера взаимодействий. Продемонстрирована возможность восстановления структурных характеристик однородного состояния по данным конечного кластера при фазовом расслоении и исследована зависимость параметров корреляционных оболочек от размера системы.

Третья глава посвящена фазовым явлениям в активной неравновесной материи. Методом молекулярной динамики исследована двумерная система активных частиц с межчастичным притяжением. Построены фазовые диаграммы, изучена эволюция областей фазового сосуществования при изменении активности, обнаружены бифуркационные режимы и гистерезисное поведение системы. Полученные результаты представляют самостоятельный интерес для физики активной материи и расширяют круг рассмотренных в диссертации неравновесных систем. Структура диссертации и распределение материала по главам соответствуют поставленным задачам.

Научная новизна исследования и полученных результатов

В диссертационной работе продемонстрирована универсальность нового интерполяционного метода расчета парных корреляционных функций для широкого класса двумерных флюидов, включая монослойные классические жидкости, агентные клеточные модели и системы мягкой материи с управляемым взаимодействием во внешних вращающихся электрических полях. Впервые получено экспериментальное подтверждение ключевых положений интерполяционного метода для жидкостей. Выполнено обобщение интерполяционного метода на объемные (трехмерные) жидкости с различными типами межчастичных взаимодействий, включая многочастичные взаимодействия,

описываемые ЕАМ-потенциалами. Продемонстрирована возможность восстановления парной корреляционной функции однородного состояния системы на основе данных о кластере конечного размера.

Теоретическая и практическая значимость диссертационной работы

Теоретической значимостью обладают результаты обобщения интерполяционного метода расчета парных корреляционных функций на двумерные и трехмерные системы с различными типами взаимодействий, включая равновесные и неравновесные активные жидкости. Выявленные пределы универсальности структурных характеристик указывают на существование пространственного масштаба, разделяющего газоподобные и кристаллоподобные режимы корреляций. Возможность восстановления парной корреляционной функции однородного состояния по данным конечного кластера формирует физически обоснованный подход к определению физически малого объема. Полученные результаты о влиянии подвижности частиц на фазовое поведение вносят вклад в развитие физики неравновесных систем.

Практическая значимость работы заключается в возможности вычислительно эффективного восстановления парных корреляционных функций в широком классе жидких и неупорядоченных систем. Предложенный метод может быть использован при обработке данных рентгеновского и нейтронного рассеяния, а также спектроскопических методов, включая EXAFS, для исследования структуры жидкостей, стеклообразных и других неупорядоченных материалов.

Соответствие содержания диссертации заявленной научной специальности

Диссертационная работа соответствует паспорту научной специальности 1.3.8. «Физика конденсированного состояния» в части следующих направлений исследований:

«Теоретическое и экспериментальное исследование физических свойств упорядоченных и неупорядоченных неорганических и органических систем, включая классические и квантовые жидкости, стекла различной природы, дисперсные и квантовые системы, системы пониженной размерности»;

«Теоретическое и экспериментальное изучение свойств конденсированных веществ в экстремальном состоянии (сильное сжатие, ударные воздействия, сильные магнитные поля, изменение гравитационных полей, низкие и высокие температуры), фазовых переходов в них и их фазовых диаграмм состояния»;

«Разработка математических моделей построения фазовых диаграмм состояния и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий их нахождения».

Соответствие автореферата основным положениям диссертации

Автореферат отражает основное содержание диссертационной работы, сформулированные положения, научную новизну, теоретическую и практическую значимость результатов. Основные результаты и выводы, представленные в автореферате, соответствуют содержанию диссертации.

Обоснованность и достоверность научных положений и выводов, личный вклад автора

Достоверность полученных результатов обеспечивается использованием современных и апробированных методов компьютерного моделирования и статистического анализа, сопоставлением результатов, полученных для различных моделей и типов взаимодействий, а также экспериментальной проверкой основных принципов интерполяционного метода. Постобработка результатов моделирования и эксперимента выполнялась с использованием программных кодов на Python, C++ и CUDA, разработанных автором. Личный вклад автора состоит в разработке программных средств, подготовке и проведении компьютерного моделирования, обработке результатов молекулярно-динамических расчетов, участии в обработке экспериментальных данных, разработке теоретических моделей, а также анализе и интерпретации результатов.

Апробация работы

Основные результаты диссертации опубликованы в 7 научных статьях, входящих в Перечень ВАК РФ и индексируемых в международных базах Scopus и Web of Science. Результаты работы представлены на 10 всероссийских и международных научных конференциях. Среди журналов, в которых опубликованы результаты диссертации, представлены Physical Review E, Journal of Molecular Liquids и The Journal of Chemical Physics.

Замечания по содержанию диссертации

- 1) При исследовании конечных систем показано, что при размере капли ниже характерного значения возникают заметные отклонения, а также высказана идея введения минимального размера ансамбля, который может рассматриваться как эффективный аналог объемной системы. Однако общий количественный критерий определения такого минимального размера в работе не сформулирован, и его детальное исследование оставлено за рамками диссертации. Представляется, что развитие этого критерия существенно усилило бы практическую ценность предложенного подхода для экспериментальных систем с ограниченным числом наблюдаемых частиц.
- 2) Разложение $g(r)$ на отдельные вклады основано на построении корреляционных сфер посредством разбиения Вороного. При использовании численных данных такое построение выполняется для непосредственно известных координат частиц, однако при работе с экспериментальными конфигурациями неизбежно возникает конечная точность определения координат и ограниченность области наблюдения. В работе было бы полезно подробнее обсудить чувствительность

параметров корреляционных пиков к погрешности определения координат частиц и граничным эффектам. Такой анализ особенно актуален в связи с заявляемой перспективой применения метода к экспериментальным системам.

- 3) В диссертационной работе подробно исследуется точность предложенного интерполяционного метода расчета парных корреляционных функций. Вместе с тем отсутствует непосредственное количественное сопоставление полученных результатов с результатами традиционных теоретических подходов, рассмотренных в первой главе, в частности с решениями интегрального уравнения Орнштейна–Цернике с различными замыкающими соотношениями. Такое сравнение позволило бы более наглядно оценить преимущества и область применимости разработанного метода относительно существующих подходов к расчету парных корреляционных функций.
- 4) В диссертации показано, что форма отдельных корреляционных пиков сохраняет универсальный характер для широкого круга исследованных систем, включая жидкости с многочастичными взаимодействиями. Вместе с тем физическая природа такой универсальности обсуждена недостаточно подробно. Представляет интерес более детальное объяснение того, почему наличие многочастичных, анизотропных взаимодействий практически не изменяет форму корреляционных пиков

Отмеченные замечания носят преимущественно характер пожеланий и направлений дальнейшего развития предложенного подхода и не снижают общей высокой оценки диссертационной работы.

Заключение по работе

Диссертация «Обобщенный интерполяционный метод расчета парных корреляционных функций в классических жидкостях и мягкой материи» А.Д. Насырова является законченной, самостоятельной научно-исследовательской работой, выполненной на высоком научном уровне. Автореферат и опубликованные работы верно отражают содержание диссертации, основные результаты и выводы. Представленные результаты докладывались на российских и международных научных конференциях.

На основании изложенного считаем, что диссертация Насырова Артура Дамировича «Обобщенный интерполяционный метод расчета парных корреляционных функций в классических жидкостях и мягкой материи» по актуальности, степени научной новизны и практической значимости, объему проведенных исследований и их ценности соответствует требованиям, предъявляемым ВАК Минобрнауки России к диссертациям на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. «Физика конденсированного состояния».

Диссертация Насырова Артура Дамировича «Обобщенный интерполяционный метод расчета парных корреляционных функций в классических жидкостях и мягкой

материи» и отзыв на нее заслушаны и одобрены на семинаре Лаборатории фазовых переходов в сильно коррелированных и неупорядоченных системах ИФВД РАН. На заседании присутствовало 9 чел., результаты голосования: «за» - 9, «против» - 0, «воздержались» - 0, протокол №05 от 14 сентября 2026 г.

Отзыв составил

Руководитель семинара главный научный сотрудник Лаборатории фазовых переходов в сильно коррелированных и неупорядоченных системах ИФВД РАН,

д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН

В.Н. Рыжов

Я, Рыжов Валентин Николаевич, даю согласие на обработку своих персональных данных, необходимых для работы диссертационного совета.

Россия, 108840, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, д. 14, ИФВД РАН

Тел.: +7 (495)-851-00-13

Адрес электронной почты: ryzhov@hppi.troitsk.ru

Подпись В.Н. Рыжова заверяю,

Ученый секретарь ИФВД РАН,

к.ф.-м.н.

В.Е. Анкудинов

Сведения о ведущей организации

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук» (ИФВД РАН)

Почтовый адрес: 108840, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, д. 14

Телефон: 8 (495)-851-05-82

Адрес электронной почты организации: hpp@hppi.troitsk.ru

Адрес официального сайта организации: www.hppi.troitsk.ru