

ОТЗЫВ

*официального оппонента
на диссертационную работу И.В. Симкина
«Структурная организация неупорядоченной полидисперсной мягкой материи с
управляемым межчастичным взаимодействием»
представленную на соискание учёной степени кандидата
физико-математических наук
по специальности 1.3.8. – физика конденсированного состояния*

Одной из центральных проблем физики неупорядоченных систем является установление связи между характером межчастичных взаимодействий, локальной структурой и наблюдаемой организацией вещества. Для полидисперсной мягкой материи эта задача существенно усложняется, поскольку частицы различаются по размерам, а следовательно – по геометрическому вкладу в локальную упаковку и, в случае размерно-зависимых сил, по энергетическому вкладу в формирование структуры. В этом отношении диссертация И.В. Симкина посвящена актуальной и физически содержательной проблеме.

Возможность управлять взаимодействиями внешним электрическим или магнитным полем превращает коллоидную систему в удобный модельный объект, где свойства взаимодействия могут изменяться в ходе эксперимента, а структура наблюдается непосредственно на уровне отдельных частиц. При этом для полидисперсной системы недостаточно знать средний размер кластера или среднее координационное число: существенной характеристикой становится пространственное распределение разных размерных фракций внутри одного и того же неупорядоченного агрегата.

Основная цель работы сформулирована как установление физических закономерностей размерно-зависимой самоорганизации неупорядоченных полидисперсных систем с управляемым притяжением во внешних полях. Логика исследования построена последовательно: сначала вводится метод структурного описания, затем он применяется к экспериментальной системе с вращающимся электрическим полем. Полученные данные сопоставляются с результатами

молекулярной динамики и упрощённой физической модели; в отдельной модельной задаче исследуется размерный состав конденсированной фазы.

Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения и списка литературы. Работа изложена на 147 страницах, содержит 27 рисунков и 4 таблицы; список литературы включает 179 наименований.

Первая глава содержит достаточно подробный анализ современных представлений о самоорганизации дисперсных систем, управляемых взаимодействиях и роли полидисперсности. Существенно, что автор отделяет два уровня структурной неоднородности: топологический беспорядок взаимного расположения частиц и композиционную неоднородность, связанную с распределением их размеров. Это различие становится важным в дальнейшем при интерпретации А- и В-типов кластеров.

Во второй главе предложен метод количественной структурной параметризации микроскопических изображений. Последовательность «изображение – параметры отдельных объектов – граф связей – кластер – послойное представление» позволяет перейти от визуального наблюдения к набору величин, пригодных для статистического анализа. Наиболее оригинальной частью метода в контексте диссертации является последовательное удаление периферических слоёв кластера. Такая конструкция не требует сферической или радиальной симметрии и поэтому естественна для неупорядоченных конечных агрегатов.

В третьей главе метод применяется к экспериментальной полидисперсной эмульсии во вращающемся электрическом поле. В результате обнаруживаются два типа размерной стратификации: А-кластеры с локализацией более крупных частиц во внутренних слоях и В-кластеры, для которых максимум среднего диаметра находится в промежуточных слоях. Автор показывает, что переход к В-структурам сопровождается усилением самосборки и рост характерного размера кластеров при увеличении внешнего напряжения.

Интересным элементом анализа является сравнение энтропии Вороного для двух типов структур. Существенное перекрытие распределений этой величины свидетельствует о сходстве А- и В-кластеров по выбранной

характеристике топологического беспорядка, тогда как послойные профили указывают на различное распределение размерных фракций. Оба типа стратификации также воспроизводятся в молекулярно-динамических расчётах при короткодействующем отталкивании и размерно-зависимом дальнодействующем притяжении.

Для обсуждения возможной равновесной природы В-структур используется слоевая модель конечного кластера. Реальный неупорядоченный агрегат заменяется набором концентрических слоёв, а распределение частиц между слоями определяется минимизацией энергии в пределе сильного взаимодействия. В рамках модели получена переходная область в координатах числа частиц в кластере и PDI; в рассмотренном диапазоне параметров линия, соответствующая вероятности $1/2$, аппроксимирована степенной зависимостью с показателем $-0,4$. Результат интересен тем, что демонстрирует возможность энергетической предпочтительности В-подобной композиционной структуры, а не только её кинетической фиксации.

Четвёртая глава переносит анализ с уровня отдельного кластера на ансамбль. Введены характеристики состава конденсированной фазы, позволяющие одновременно отслеживать средний размер частиц, ширину их распределения и долю частиц в плотном состоянии. В молекулярно-динамической модели выявлен промежуточный диапазон силы притяжения, в котором конденсированная фаза обогащается более крупными частицами и одновременно сужается по распределению размеров. При дальнейшем усилении притяжения селективность уменьшается, поскольку в плотную фазу вовлекается более широкий набор размерных фракций.

На мой взгляд, важным достоинством диссертации является единая физическая постановка её основных задач. Послойная стратификация в главе 3 и размер-селективная конденсация в главе 4 рассматриваются как возможные проявления размерной зависимости энергетического выигрыша при притяжении частиц. При этом используются различные методы: эксперимент, обработка изображений, молекулярно-динамическое моделирование и упрощённые теоретические оценки.

Научная новизна работы состоит в количественном описании внутренней размерной организации неупорядоченных полидисперсных кластеров, экспериментальном выявлении двух типов стратификации, исследовании факторов А/В-перехода и обнаружении в модели размер-селективной конденсации в конечной области параметров.

Степень обоснованности научных положений, выводов и рекомендаций определяется последовательной постановкой исследовательских задач, количественным анализом экспериментальных данных и сопоставлением наблюдаемых закономерностей с результатами моделирования методом молекулярной динамики и упрощённой теоретической модели. Достоверность результатов подкрепляется статистическим анализом экспериментальных конфигураций и воспроизведением основных типов размерной стратификации в численном моделировании. Основные выводы следуют из представленных результатов с учётом границ применимости использованных моделей. Вместе с тем вопросы об устойчивости отдельных выводов к выбору способа структурной параметризации и о границах применимости моделей требуют обсуждения.

Работа соответствует специальности 1.3.8. «Физика конденсированного состояния», прежде всего направлению, связанному с теоретическим и экспериментальным исследованием физических свойств неупорядоченных дисперсных систем и систем пониженной размерности. Результаты по теме диссертации представлены в рецензируемых научных изданиях и прошли апробацию на российских и международных научных мероприятиях.

Автореферат, публикации и рекомендации по использованию результатов

Автореферат достаточно полно отражает содержание диссертации, её основные положения и выводы. Перечень опубликованных работ включает исследования по физической тематике диссертации и применяемым методам анализа изображений. Разработанный метод структурной параметризации может применяться при исследовании коллоидов, эмульсий и других неупорядоченных дисперсных систем, а установленные закономерности — при

дальнейшем моделировании и экспериментальном проектировании управляемой самосборки полидисперсных частиц.

В процессе ознакомления с диссертационной работой у меня возникли следующие вопросы и замечания:

1. Для оценки топологического беспорядка используется обычное разбиение Вороного по координатам центров частиц. В сильно полидисперсной системе естественной альтернативой является взвешенное (radical/Laguerre) разбиение, учитывающее размеры частиц. Представляет интерес вопрос, сохранится ли вывод о близком уровне топологического беспорядка А- и В-кластеров при использовании такого описания или иных локальных параметров порядка, например распределений координационных чисел и bond-orientational order.
2. Энергетическая слоистая модель указывает на предпочтительность В-подобной конфигурации в пределе $T \rightarrow 0$, тогда как экспериментальные кластеры формируются за конечное время. По каким признакам можно отделить равновесную В-стратификацию от кинетически зафиксированной? Измерялись ли зависимость послойных профилей от времени и предыстории формирования и обратимость перехода А/В при изменении поля? Достаточно ли велика энергия взаимодействия для того, чтобы пренебречь энтропийным вкладом?
3. В главе 4 исходная полидисперсность задаётся нормальным распределением размеров, а максимальные рассмотренные значения PDI достаточно велики. Насколько универсальна найденная область размер-селективной конденсации по отношению к форме исходного распределения? В реальных эмульсиях распределения могут быть асимметричными или многомодальными; проверка логнормального или бинарного распределения позволила бы отделить общий механизм от особенностей выбранного статистического ансамбля.
4. В главе 4 выделяется «конденсированная фаза» и анализируется её размерный состав. По какому критерию частица относится к этой фазе? Какие данные

позволяют отличить сосуществование плотной и разреженной фаз от образования конечных кластеров за доступное время моделирования? Проверялись ли устойчивость результата при увеличении размера системы и времени расчёта, а также зависимость от начальной конфигурации?

5. Какие алгоритмы детекции и сегментации применялись непосредственно к экспериментальным изображениям эмульсии и как проверялась точность определения диаметров капель? Проводилось ли сравнение с независимой ручной разметкой или предобученными нейросетевыми моделями, адаптированными к данным изображениям? При таком сравнении было бы полезно оценить ошибки диаметров, пропуски мелких капель и ошибочное объединение соседних объектов при различной плотности кластеров и степени расфокусировки, а также влияние этих ошибок на послойные профили и классификацию А/В.

Указанные вопросы не являются принципиальными недостатками и, скорее, обозначают естественные направления развития выполненного исследования.

В целом диссертационная работа «Структурная организация неупорядоченной полидисперсной мягкой материи с управляемым межчастичным взаимодействием» является законченной научно-квалификационной работой, в которой решена научная задача установления закономерностей внутренней размерной стратификации полидисперсных кластеров и размер-селективной конденсации в системах с размерно-зависимым межчастичным притяжением. Решение этой задачи имеет значение для развития физики неупорядоченных дисперсных систем и мягкой материи. Разработан метод количественного структурного анализа, экспериментально выявлены два типа внутренней размерной стратификации кластеров и установлен в численной модели режим размер-селективной конденсации.

Диссертация соответствует паспорту специальности 1.3.8. «Физика конденсированного состояния» и требованиям пунктов 9–11, 13 и 14 Положения о присуждении учёных степеней, утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (в

действующей редакции), предъявляемым к кандидатским диссертациям. Считаю, что Симкин Иван Вячеславович заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. «Физика конденсированного состояния».

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
«26» сентября 2026 г.
М.П.