

ОТЗЫВ

официального оппонента, д.ф.-м.н. Ю.А. Будкова на диссертацию **Симкина Ивана Вячеславовича** «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

Диссертация И.В. Симкина посвящена исследованию структурной самоорганизации полидисперсных систем мягкой материи, в которых межчастичное взаимодействие может управляться внешним полем. Эта постановка представляется актуальной как с фундаментальной, так и с методической точки зрения. Реальные коллоидные и эмульсионные системы практически всегда полидисперсны, однако влияние полидисперсности нередко сводят к изменению усреднённых характеристик системы. В рассматриваемой работе сделан более содержательный шаг: распределение частиц по размерам трактуется как самостоятельный физический фактор, способный определять не только кинетику и степень агрегации, но и внутреннюю композиционную структуру конечных кластеров, а также состав конденсированной фазы.

Степень разработанности темы. Управляемая внешними полями самоорганизация коллоидных и иных дисперсных систем подробно исследована как экспериментально, так и методами численного моделирования. В то же время существенно слабее изучено, каким образом полидисперсность определяет пространственное распределение частиц разных размеров внутри конечных кластеров и состав конденсированной фазы. До выполнения рецензируемой работы отсутствовало единое количественное описание, связывающее внутреннюю размерную стратификацию кластеров с размер-селективной конденсацией. Диссертация И.В. Симкина восполняет этот пробел.

Цель работы сформулирована достаточно ясно: установить физические закономерности размерно-зависимой самоорганизации неупорядоченных

полидисперсных систем с управляемым притяжением во внешних полях, проявляющиеся во внутренней стратификации кластеров и размер-селективной конденсации. Для достижения этой цели автор решает последовательный набор задач: от построения количественного метода обработки микроскопических данных и выделения физически интерпретируемых структурных параметров до сопоставления экспериментальных наблюдений с молекулярно-динамической моделью и исследования ансамблевого режима размер-селективной конденсации.

Диссертация состоит из введения, четырёх глав и заключения, изложена на 147 страницах, содержит 27 рисунков и 4 таблицы. Список литературы включает 179 наименований. Такая структура работы представляется логичной: первая глава формирует физический контекст и постановку задачи, вторая посвящена методике количественной структурной параметризации, третья — экспериментальному исследованию внутренней организации полидисперсных кластеров и её моделированию, а четвёртая — размер-селективной конденсации как ансамблевому проявлению того же механизма размерно-зависимой самоорганизации.

Сильной стороной диссертации является то, что методическая часть не существует отдельно от физической задачи. Разработанный автором многоуровневый подход переводит микроскопические изображения в объектное, графовое, кластерное, послойное и ансамблевое описание структуры. Для рассматриваемой системы особенно удачным представляется введение послойного анализа кластеров, не требующего предположения об их радиальной симметрии. Это существенно для неупорядоченных конечных агломератов, форма которых может заметно отличаться от круговой, и позволяет обсуждать не просто средний размер частиц в кластере, а пространственное перераспределение размерных фракций между его внешними, промежуточными и внутренними областями.

На мой взгляд, научное ядро диссертационной работы связано прежде всего с экспериментальным обнаружением и количественным описанием двух

воспроизводимых типов внутренней размерной стратификации конечных полидисперсных кластеров. Для структур типа А максимум среднего размера частиц располагается во внутренних слоях агломерата, тогда как для структур типа В он смещается в промежуточную область. Важно, что это различие не сводится к разной степени топологического беспорядка: анализ характеристик упаковки показывает, что речь идёт именно о различной композиционной организации кластера. Тем самым автор выделяет физический эффект, который трудно увидеть при использовании только стандартных интегральных дескрипторов структуры.

Экспериментальная часть опирается на значительный массив данных: в зависимости от амплитуды внешнего напряжения анализировались многочисленные видеосери и сотни кластеров, а суммарный объём выборки превышает две тысячи кластерных конфигураций. Это существенно повышает убедительность вывода о воспроизводимости обнаруженных режимов и отличает работу от чисто иллюстративного анализа нескольких характерных изображений.

Полезным является и сопоставление экспериментальных данных с минимальной молекулярно-динамической моделью, включающей короткодействующее отталкивание и дальнодействующее размерно-зависимое притяжение. Автор сознательно не претендует на буквальное воспроизведение всех особенностей экспериментальной эмульсии, а выделяет главный механизм - зависимость энергетического выигрыша от размера взаимодействующих частиц. При таком уровне моделирования удастся качественно воспроизвести оба типа стратификации и связать переход между ними с совместным действием размера кластера, степени полидисперсности, геометрических ограничений конечного агломерата и размерно-зависимого взаимодействия. Такая интерпретация представляется физически содержательной.

Логическим продолжением локального, кластерного анализа служит исследование размер-селективной конденсации. В работе показано, что при промежуточной силе притяжения конденсированная фаза может одновременно

обогащаться крупными частицами и иметь более узкое распределение размеров, чем исходный ансамбль. При слабом взаимодействии селективность практически отсутствует, а при слишком сильном взаимодействии в плотную фазу вовлекается широкий диапазон размерных фракций, и селективность снова уменьшается. Этот результат интересен тем, что размерное фракционирование возникает не в тривиальном пределе максимально сильной агрегации, а в конечной области параметров. Связь между внутренней стратификацией отдельных кластеров и селективным составом конденсированной фазы придаёт диссертации содержательное единство.

Научная новизна. В диссертации впервые в рамках единого исследования количественно выделены два типа внутренней размерной стратификации неупорядоченных полидисперсных кластеров, установлена зависимость перехода между ними от размера кластера и полидисперсности, а также показано существование немонотонного по силе притяжения режима размер-селективной конденсации. Новым является и сопоставление кластерного и ансамблевого проявлений одного механизма размерно-зависимой самоорганизации.

В качестве достоинства следует отметить и разумное сочетание экспериментальных методов, обработки изображений, элементов машинного обучения и молекулярно-динамического моделирования. При этом работа не сводится к демонстрации возможностей computer vision или алгоритмической обработки данных. Центральные выводы сформулированы на языке физики мягкой материи: речь идёт о роли полидисперсности, размерно-зависимого энергетического выигрыша, конечного размера кластера, локального числа контактов и перехода между различными режимами самоорганизации.

Обоснованность и достоверность результатов. Основные выводы обеспечиваются согласованием нескольких уровней анализа, статистической обработкой большого числа экспериментальных конфигураций и качественным воспроизведением ключевых эффектов в численной модели. Основные результаты апробированы на российских и международных конференциях и опубликованы в ряде рецензируемых журналов, в том числе Journal of Molecular

Liquids, Journal of Colloid and Interface Science, Journal of Chemical Physics и Scientific Reports. Личный вклад соискателя, согласно представленным материалам, включает разработку и реализацию методов структурной параметризации, обработку экспериментальных данных, участие в постановке и проведении экспериментов, постановку и выполнение численного моделирования, а также физическую интерпретацию полученных результатов.

Работа в целом производит впечатление самостоятельного и завершённого исследования. Вместе с тем при её чтении возникает ряд замечаний и вопросов, которые, на мой взгляд, полезно обсудить на защите.

1. В молекулярно-динамической части диаметры частиц задаются нормальным распределением со средним значением, нормированным на единицу, а величина PDI фактически совпадает со стандартным отклонением. При достаточно большой полидисперсности такой выбор требует дополнительного пояснения. Например, уже при $PDI = 0.6$ обычное гауссово распределение имеет ненулевую и вполне заметную вероятность отрицательных значений диаметра. Неясно, использовалось ли усечённое нормальное распределение, отбраковка нефизических значений или другая процедура генерации. Этот технический момент желательно изложить явно, поскольку при больших PDI форма хвоста распределения может влиять на количественные характеристики фракционирования.
2. В главе 4 идентификация конденсированной фазы проводится на основе локальной плотности и разбиения Вороного. Сам подход разумен, особенно для нерегулярных кластеров, однако операционное определение плотной фазы описано несколько кратко. Для полной воспроизводимости расчёта следовало бы более явно указать используемый порог или алгоритм его выбора и показать устойчивость выводов относительно умеренного изменения этого критерия. Это особенно важно потому, что

средний размер и ширина распределения в конденсированной фазе непосредственно зависят от того, какие частицы к ней отнесены.

3. В эксперименте изменение амплитуды внешнего напряжения одновременно влияет на силу межчастичного притяжения, характерный размер формирующихся кластеров и статистику их внутренней структуры. Поэтому причинное разделение вкладов напряжения, размера кластера и полидисперсности в переход между А- и В-типами стратификации остаётся не вполне однозначным. Численное моделирование существенно проясняет ситуацию, но было бы полезно более явно сформулировать, какие из выявленных зависимостей установлены непосредственно экспериментально, а какие являются результатом интерпретации с опорой на модель.
4. Классификация кластеров на А- и В-типы является одним из центральных результатов диссертации. Представленная статистика выглядит убедительно, однако этот вывод выиграл бы от еще более формальной проверки: например, от явного определения статистической меры разделимости двух классов, оценки доверительных интервалов для границы перехода или проверки устойчивости классификации к вариации правил послойной декомпозиции. Это не ставит под сомнение сам эффект, но сделало бы количественное утверждение о существовании двух режимов более строгим.
5. В нескольких местах результаты минимальной модели интерпретируются достаточно широко - как проявление общего механизма размерно-зависимой самоорганизации. Такое обобщение представляется перспективным, но требует некоторой осторожности. В использованной модели взаимодействие парное и аддитивное, частицы недеформируемы, а гидродинамические и возможные многочастичные поляризационные эффекты не учитываются. Поэтому я бы рассматривал продемонстрированную универсальность, прежде всего, как хорошо мотивированную физическую гипотезу, подтвержденную на двух классах

модельных систем, а не как уже доказанное свойство произвольных полидисперсных мягких сред.

Перечисленные замечания носят главным образом уточняющий и дискуссионный характер. Они не затрагивают основного результата работы — установления и количественного описания размерно-зависимой структурной самоорганизации полидисперсных систем и выявления связи между внутренней стратификацией конечных кластеров и размер-селективным составом конденсированной фазы.

Соответствие паспорту научной специальности. Содержание диссертации соответствует паспорту научной специальности 1.3.8 Физика конденсированного состояния (физико-математические науки), прежде всего направлениям 2 и 5: исследованию физических свойств неупорядоченных дисперсных систем и разработке математических моделей изменения их физических свойств в зависимости от внешних условий.

Автореферат в достаточной степени отражает содержание диссертации. Публикации соискателя соответствуют тематике работы и содержат её основные результаты. Диссертация И.В. Симкина является завершённой научно-квалификационной работой, в которой решена научная задача, имеющая значение для развития физики конденсированного состояния. По актуальности, научной новизне, степени обоснованности и достоверности научных положений, выводов и рекомендаций, теоретической и практической значимости работа соответствует критериям, установленным пунктами 9–14 Положения о присуждении учёных степеней, утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842.

Считаю, что Симкин Иван Вячеславович заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 Физика конденсированного состояния.

Я, Будков Юрий Алексеевич, даю согласие на обработку моих персональных данных, размещение сведений об официальном оппоненте и полного текста настоящего отзыва в свободном доступе в информационно-телекоммуникационной сети «Интернет» и в федеральной информационной системе государственной научной аттестации.

Официальный оппонент,

доктор физико-математических наук

 **Ю.А. Будков**

Научная специальность, по которой защищена диссертация:

01.04.07 — физика конденсированного состояния.

Должность и место работы: ведущий научный сотрудник лаборатории вычислительной физики федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики».

Почтовый адрес: 123458, г. Москва, ул. Таллинская, д. 34, каб. 433.

Рабочий телефон: +7 (495) 772-95-90, доб. 15129; электронная почта: ybudkov@hse.ru.

«18» сентября 2026 г.

Подпись Ю.А. Будкова удостоверяю:

_____ / _____

М.П.



Подпись заверяю