

УТВЕРЖДАЮ

Директор ИОФ РАН, академик РАН,
доктор физико-математических наук

Гарнов Сергей Владимирович

м.п.

« 31 » августа 2026 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

– Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Федерального исследовательского центра «Институт общей физики
им. А.М. Прохорова Российской академии наук» (ИОФ РАН) –
на диссертацию Симкина Ивана Вячеславовича

«Структурная организация неупорядоченной полидисперсной мягкой материи
с управляемым межчастичным взаимодействием», представленную
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния

Актуальность диссертации. Неупорядоченные дисперсные системы, включая коллоидные суспензии и эмульсии, – важный класс объектов физики конденсированного состояния и мягкой материи. В таких системах связь между межчастичными взаимодействиями, размерной неоднородностью, геометрией упаковки и формирующейся структурой имеет фундаментальное значение, поскольку наблюдаемое состояние определяется коллективным поведением большого числа взаимодействующих частиц и нередко существенно зависит от пути формирования структуры. Особую актуальность представляют полидисперсные системы, межчастичное взаимодействие в которых управляется внешними электрическими и магнитными полями для изменения эффективных сил между частицами и направленного воздействия на процессы агрегации, кластеризации и самоорганизации. Подобное управление полидисперсными системами заслуживает особого внимания. Величина энергетического выигрыша при образовании межчастичных контактов зависит от размера частиц, вследствие чего полидисперсность выступает не только геометрической неоднородностью, но и самостоятельным физическим фактором структурообразования. Для экспериментального исследования подобных систем недостаточно визуально фиксировать образование агрегатов. Необходим воспроизводимый переход от микроскопических изображений к координатам, размерам и связям отдельных частиц, кластерному составу и характеристикам внутренней организации агломератов. Особенно существенна задача количественного описания распределения размерных фракций между периферическими, промежуточными и внутренними областями неупорядоченных кластеров, где традиционные интегральные структурные характеристики оказываются недостаточно информативными. Именно поэтому диссертация И.В. Симкина

направлена на установление физических закономерностей размерно-зависимой самоорганизации неупорядоченных полидисперсных систем с управляемым притяжением во внешних полях, проявляющихся во внутренней стратификации кластеров и размер-селективной конденсации. Для достижения сформулированной цели в диссертации применяется комплексный подход, сочетающий экспериментальные исследования, количественный анализ микроскопических данных и молекулярно-динамическое моделирование. Это определяет актуальность работы как для развития физики неупорядоченного конденсированного состояния и мягкой материи, так и для создания новых методов управляемой самосборки дисперсных систем для широкого круга применений.

Структура и содержание диссертации. 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.

Во введении обоснована актуальность работы, сформулированы цель и задачи диссертации, описаны объект и предмет исследования, приведены научная новизна, положения, выносимые на защиту, методы, теоретическая и практическая значимость, достоверность результатов, личный вклад автора, сведения об апробации и публикациях.

В первой главе приведен подробный обзор современного состояния исследований в рассматриваемой области, включая различные физические механизмы структурообразования в полидисперсных системах с управляемыми взаимодействиями. Рассмотрены механизмы управления межчастичными силами во внешних полях, особенности коллоидных систем во вращающихся электрических полях, роль полидисперсности в структурной организации конечных агрегатов, а также существующие способы количественного анализа неупорядоченных структур. Обоснована необходимость многоуровневого описания таких систем, связывающего микроскопическое изображение с физически интерпретируемыми структурными параметрами. Проведенный обзор подтвердил корректность сформулированных цели и задач диссертации.

Во второй главе разработан метод количественной структурной параметризации неупорядоченных систем, в котором на основе микроскопических изображений восстанавливаются индивидуальные параметры частиц, после чего формируется их ансамблевое описание. Метод включает предварительную обработку изображений, детекцию и сегментацию объектов, морфометрическую параметризацию, построение графа межчастичных связей, выделение кластеров, послойную декомпозицию и расчет ансамблевых характеристик. Результатом обработки изображений являются не сами маски объектов или графы, а физические параметры структуры. Для внутренней организации

кластеров введен послойный анализ, не требующий априорного предположения о радиальной симметрии агломерата.

Третья глава является экспериментальной и посвящена структурной стратификации полидисперсных кластеров во внешнем вращающемся электрическом поле. Эксперименты проведены на квазидвумерной полидисперсной эмульсионной системе типа «масло в воде», стабилизированной бычьим сывороточным альбумином. Для управления взаимодействиями использована восьмиэлектродная ячейка с частотой вращения поля 30 кГц и амплитудой напряжения в диапазоне 50–600 В. С ростом напряжения наблюдалось усиление кластерообразования, а при значениях около 300 В и выше — формирование устойчивых многослойных кластеров, пригодных для анализа внутренней структуры. С помощью оригинального метода параметризации выявлены два воспроизводимых типа внутренней размерной стратификации:

- в кластерах А-типа более крупные частицы локализуются во внутренних слоях;
- в кластерах В-типа максимум среднего размера смещается в промежуточные слои.

Для их количественного различения используются послойные профили нормированного среднего диаметра. Показано, что переход между типами связан с размером кластера, степенью полидисперсности, геометрическими ограничениями конечного агломерата и размерно-зависимым характером межчастичного притяжения. Сопоставление распределений энтропии Вороного для кластеров обоих типов показывает, что различие не сводится к общей степени топологического беспорядка, а связано именно с пространственным перераспределением частиц различных размеров. Экспериментальные закономерности сопоставлены с молекулярно-динамическим моделированием и упрощенной теоретической моделью.

Четвертая глава посвящена ансамблевому проявлению того же размерно-зависимого механизма — размер-селективной конденсации. Для полидисперсной квазидвумерной системы использован эффективный потенциал, включающий короткодействующее WCA-отталкивание и дальнодействующее диполь-подобное притяжение, амплитуда которого возрастает с размерами частиц. Для характеристики состава конденсированной фазы введены нормированный средний размер частиц, нормированная ширина распределения размеров и доля частиц в плотной фазе. Численными методами показано существование конечной области параметров, в которой плотная фаза одновременно обогащается более крупными частицами и имеет более узкое распределение размеров по сравнению с исходным ансамблем. Наиболее наглядно этот режим проявился при низкой плотности $\rho=0,2$ и промежуточных значениях параметра взаимодействия $1/\varepsilon=0,432-0,746$. При слабом притяжении конденсация выражена

недостаточно, а при сильном (в частности, при $1/\varepsilon \leq 0,262$) – селективность уменьшается вследствие вовлечения в плотную фазу широкого диапазона размерных фракций. Дополнительное рассмотрение модельной бинарной белковой смеси показало, что качественно аналогичный сценарий может реализовываться при другой форме эффективного потенциала. Это свидетельствует в пользу общности механизма размерно-зависимого энергетического отбора.

В заключении обобщены результаты всех глав, отмечена связь двух различных уровней проявления размерно-зависимой самоорганизации полидисперсных систем: внутренней стратификации отдельных кластеров и размер-селективной конденсации.

Научная новизна и основные результаты. Научная новизна диссертации определяется как разработанным способом количественного описания структуры, так и установленными физическими закономерностями. В качестве наиболее значимых результатов отметим следующие.

1. Предложен и реализован способ количественного описания внутренней размерной организации неупорядоченных полидисперсных кластеров через послойные профили среднего размера и дисперсии размеров частиц без предположения о радиальной симметрии агломерата.
2. В экспериментальной полидисперсной эмульсионной системе во вращающемся электрическом поле выявлены два воспроизводимых типа внутренней размерной стратификации: А-тип с максимумом среднего размера частиц во внутренних слоях и В-тип с максимумом среднего размера в промежуточных слоях.
3. Установлено, что формирование А- и В-структур определяется совместным действием размера конечного кластера, степени полидисперсности, геометрии упаковки и размерной зависимости энергетического выигрыша при межчастичном взаимодействии.
4. Установлен режим размер-селективной конденсации, при котором в конечной области параметров конденсированная фаза одновременно обогащается крупными частицами и характеризуется сужением распределения размеров относительно исходной системы.

Эти результаты образуют цельную физическую картину: при размерно-зависимом притяжении полидисперсность становится энергетически активным параметром, определяющим как вероятность вовлечения частиц различных размеров в плотную фазу, так и их последующее пространственное распределение внутри конечного агрегата.

Обоснованность и достоверность научных положений, результатов и выводов.

Достоверность результатов обеспечивается сочетанием взаимодополняющих экспериментальных, вычислительных и статистических методов. Экспериментальная часть основана на непосредственном наблюдении самоорганизации на уровне отдельных частиц с последующей воспроизводимой цифровой обработкой микроскопических данных. Разработанная процедура связывает первичный сигнал с объектными и ансамблевыми характеристиками и позволяет проследивать переход от выделения отдельных частиц к анализу структуры кластеров.

Физическая интерпретация экспериментальных закономерностей не ограничивается качественным описанием: результаты сопоставлены с молекулярно-динамическим моделированием и упрощенной теоретической моделью, учитывающей размерную зависимость энергетического выигрыша и геометрию конечного агрегата. Дополнительный анализ энтропии Вороного используется для проверки альтернативного объяснения различий между А- и В-кластерами общей дефектностью упаковки. В четвертой главе выводы проверяются на множестве независимых численных реализаций и анализируются не только по интегральным показателям, но и по эволюции распределений размеров.

Согласованность результатов на объектном, кластерном и ансамблевом уровнях, повторяемость выявленных тенденций при варьировании параметров системы и соответствие экспериментальных данных результатам моделирования позволяют считать основные положения диссертации научно обоснованными.

Теоретическая и практическая значимость работы. Теоретическая значимость диссертации состоит в развитии представлений о структурообразовании в полидисперсных неупорядоченных системах с управляемыми взаимодействиями. В работе показано, что полидисперсность во внешнем поле необходимо рассматривать не только как источник геометрического разброса, но и как энергетический фактор, способный задавать селективный состав плотной фазы и внутреннюю архитектуру конечных кластеров. Связь между внутренней размерной стратификацией и размер-селективной конденсацией расширяет описание самоорганизации от уровня отдельного агрегата к ансамблевому.

Практическая значимость определяется разработанным методом количественной структурной параметризации, который после настройки этапа детекции может применяться к анализу различных неупорядоченных дисперсных систем. Подход пригоден для задач, в которых требуется восстанавливать координаты, размеры, форму, связность и кластерную организацию объектов по микроскопическим изображениям. Установленные закономерности могут быть полезны при развитии методов управляемой самосборки и

проектировании мягких дисперсных материалов с заданным пространственным распределением размерных фракций.

Рекомендации по использованию результатов и выводов диссертации.

Разработанный метод структурной параметризации рекомендуется использовать в исследовательских группах, работающих с коллоидными и эмульсионными системами, мягкой материей и анализом микроскопических изображений. Установленные закономерности целесообразно учитывать при проектировании экспериментов по управляемой самосборке и разработке моделей полидисперсных систем с размерно-зависимыми взаимодействиями. Материалы диссертации могут быть использованы в специальных курсах по физике конденсированного состояния, статистической физике и физике мягкой материи.

Соответствие диссертации паспорту научной специальности. По объекту, предмету, методам и основным результатам диссертационная работа соответствует научной специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки). Наиболее непосредственно содержание работы относится к направлению исследований 2. 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. В диссертации исследуются именно неупорядоченные полидисперсные дисперсные системы, преимущественно квазидвумерные, а центральными результатами являются физические закономерности их структурной самоорганизации при внешнем управляющем воздействии.

Апробация результатов, публикации и соответствие автореферата. Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на 13 российских и международных научных конференциях, школах и семинарах, включая серии конференций «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений», международную конференцию «Физика.СПб», конференции «Современные тенденции развития функциональных материалов», «Dynamic phenomena and tunable self-organisation in soft matter and fluids», Saratov Fall Meeting и другие научные мероприятия.

По представленным материалам результаты исследования отражены в серии журнальных публикаций, в том числе в изданиях, индексируемых Web of Science и Scopus, а также в журналах из перечня ВАК. Уровень представления результатов заметно превышает требования к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук. Особо отметим опубликования статей по теме диссертации в таких высокорейтинговых профильных журналах, как:

- *Journal of Colloid & Interface Science* (Impact Factor: 9,6);
- *Journal of Molecular Liquids* (5,2);
- *Scientific Reports* (4,9);
- *IEEE Access* (4,2);
- *The Journal of Chemical Physics* (3,7);
- *Algorithms* (2,6).

Имеются работы и в отечественных изданиях уровня УБС1. Публикации охватывают экспериментальные и методические результаты, физику управляемой самосборки и размерно-зависимой организации полидисперсных систем.

Автореферат отражает содержание диссертации, научную новизну, основные положения, результаты и выводы.

Замечания. По диссертации имеются несколько замечаний / вопросов.

1. В экспериментальной части работы управляющее воздействие характеризуется приложенным к электродам ячейки напряжением. Для более строгого количественного сопоставления с моделью стоило привести значения (оценки) напряженности вращающегося электрического поля в области объекта.
2. Изучалось ли влияние неоднородности вращающегося электрического поля на экспериментальные данные? Например, неоднородность поля может влиять на наблюдаемые границы А/В-перехода.
3. Физическая интерпретация А/В-перехода и значительная часть численного анализа основаны на эффективном парном размерно-зависимом притяжении. Такая модель оправдана как минимальная, однако в реальной эмульсионной системе могут проявляться многочастичные поляризационные эффекты, гидродинамические взаимодействия и деформируемость капель. Более подробное обсуждение границ применимости парного приближения позволило бы точнее отделить универсальный механизм от эффектов конкретной экспериментальной системы.

4. Для идентификации размер-селективной конденсации используются главным образом отношения среднего размера и стандартного отклонения в конденсированной и исходной фазах. При дальнейшем развитии подхода эти критерии целесообразно дополнить статистической мерой различия полных распределений и доверительными интервалами для границ селективного режима. Это особенно важно в переходных областях параметров, где изменения средних характеристик невелики.
5. Рассмотрение модельной бинарной белковой смеси демонстрирует, что выявленный сценарий не привязан к конкретному диполь-подобному потенциалу. Вместе с тем перенос выводов на реальные белковые растворы пока носит качественный характер. В тексте следовало бы отчетливее разграничить демонстрацию общности физического механизма и возможность количественного прогнозирования для конкретных биомолекулярных систем.
6. В ряде рисунков, прежде всего в главах 2–4, внутренние подписи осей, названия режимов и элементы легенд сохранены на английском языке. Поскольку диссертация представлена на русском языке, эти элементы следовало перевести либо дать их русскую расшифровку в подрисуночных подписях. Замечание носит редакционно-оформительский характер.
7. В перечне публикаций по диссертации стоило бы разделить статьи в журналах из перечня ВАК, зарубежных журналах из наукометрических баз Web of Science и Scopus, а также тезисы конференций. При масштабном опубликовании результатов в журналах можно было исключить из этого списка труды конференции.

Указанные замечания не затрагивают основных положений, выносимых на защиту, не ставят под сомнение достоверность полученных результатов и не снижают общей высокой оценки диссертации.

Заключение. Диссертация Симкина Ивана Вячеславовича «Структурная организация неупорядоченной полидисперсной мягкой материи с управляемым межчастичным взаимодействием» представляет собой завершенную научно-квалификационную работу, в которой решена актуальная научная задача установления физических закономерностей размерно-зависимой структурной самоорганизации неупорядоченных полидисперсных систем с управляемыми межчастичными взаимодействиями. Работа соответствует паспорту специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния и требованиям пп. 9–11, 13 и 14 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г.

(в последней редакции), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук. Соискатель – Симкин Иван Вячеславович – заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния.

Диссертация обсуждена, отзыв одобрен на заседании Ученого совета Центра лазерной физики и фотоники ИОФ РАН 24.08.2026 г., протокол № 20.

Доктор физико-математических наук
(специальность – 1.3.6. Оптика),
профессор РАН,
ведущий научный сотрудник,
председатель Ученого совета Центра лазерной физики и фотоники ИОФ РАН,
e-mail: kirzay@gmail.com, kirzay@ran.gpi.ru,
тел.: +7 903 244 41 26

Зайцев Кирилл Игоревич

Кандидат физико-математических наук
(специальность – 01.04.07. Физика конденсированного состояния),
ведущий научный сотрудник,
ученый секретарь Ученого совета Центра лазерной физики и фотоники ИОФ РАН,
e-mail: alexbogach@mail.ru
тел.: +7 909 926 02 04

Богач Алексей Викторович

Доктор физико-математических наук
(специальность – 01.04.07. Физика конденсированного состояния),
заместитель директора по научно-организационной работе,
ВРИО ученого секретаря,
член Ученого совета Центра лазерной физики и фотоники ИОФ РАН,
e-mail: glushkov@lt.gpi.ru, nauka_gpi@mail.ru
тел.: +7 910 455 02 97

Глушков Владимир Витальевич

« 31 » августа 2026 г.

Сведения о ведущей организации:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Федеральный исследовательский центр
«Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук»
(ИОФ РАН),
119991 ГСП-1, г. Москва, ул. Вавилова, д. 38,
тел.: +7 (499) 503-87-34,
e-mail: office@gpi.ru