

На правах рукописи



Симкин Иван Вячеславович

**Структурная организация неупорядоченной
полидисперсной мягкой материи с управляемым
межчастичным взаимодействием**

Специальность 1.3.8.
Физика конденсированного состояния

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук

Москва — 2026

Работа выполнена в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н. Э. Баумана (национальный исследовательский университет)».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук
Юрченко Станислав Олегович

Официальные оппоненты: **Рыльцев Роман Евгеньевич**,
доктор физико-математических наук,
ФГБУН «Институт металлургии имени
академика Н.А. Ватолина Уральского
отделения Российской академии наук»,
главный научный сотрудник лаборатории
неупорядоченных систем

Будков Юрий Алексеевич,
доктор физико-математических наук,
ФГАОУ ВО «Национальный
исследовательский университет «Высшая
школа экономики», ведущий научный
сотрудник лаборатории вычислительной
физики

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное
учреждение науки Федеральный
исследовательский центр «Институт общей
физики им. А.М. Прохорова Российской
академии наук»

Защита состоится «14» октября 2026 г. в 16:30 на заседании диссертационного совета 24.2.331.06, созданного на базе ФГАОУ ВО «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)» по адресу: 248002, Калужская область, г.о. Город Калуга, г. Калуга, ул. Университетский Городок, зд. 1, МГТУ им. Н.Э. Баумана, Калужский филиал.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке МГТУ им. Н.Э. Баумана и на сайтах <https://bmstu.ru>, <https://kf.bmstu.ru>.

Автореферат разослан «__» _____ 2026 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета
24.2.331.06,
канд. техн. наук, доцент

Лоскутов Сергей Александрович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность. Неупорядоченные дисперсные системы составляют широкий класс объектов исследований физики конденсированного состояния и мягкой материи. К ним относятся коллоидные суспензии, эмульсии, микрогели, белковые агрегаты, клеточные ансамбли и другие системы, пространственная организация которых формируется в результате коллективного взаимодействия большого числа частиц. Кроме фундаментального интереса, такие системы находят приложения в функциональных дисперсных материалах, эмульсиях с заданной внутренней архитектурой, коллоидных покрытиях, биомиметических средах, системах направленной доставки, в биомедицинских технологиях, микрофлюидной тканевой инженерии.

В большинстве экспериментальных и прикладных дисперсных систем частицы различаются по размеру, форме или параметрам взаимодействия, а их структура не является идеально упорядоченной. Поэтому полидисперсность необходимо рассматривать как самостоятельный физический фактор структурообразования, влияющий на локальную упаковку, устойчивость агломератов, кинетику самосборки, транспортные и механические свойства, а также состав формирующихся структур. Это делает актуальным переход от идеализированных монодисперсных моделей к описанию экспериментально наблюдаемых полидисперсных систем и разработке способов управления их составом и внутренней архитектурой.

Особый интерес представляют полидисперсные системы с управляемыми межчастичными взаимодействиями. Внешние электрические и магнитные поля индуцируют электрические или магнитные дипольные моменты частиц и позволяют изменять («настраивать») эффективные силы в дальней зоне, управлять отталкиванием, ориентацией и динамикой частиц. Тем самым достигается направленная агрегация, кластеризация и пространственная организация ансамбля частиц. Во вращающихся электрических полях индуцированное притяжение между частицами регулируется параметрами поля, включая форму годографа, и зависит от размера частиц, их формы и внутренней структуры. В таких системах внешнее поле задаёт энергетические условия самосборки, а полидисперсность определяет различие энергетического выигрыша для частиц разных размеров. Поэтому принципиальным является вопрос о том, каким образом размерная неоднородность преобразуется во внутреннюю архитектуру кластеров и в селективное изменение состава конденсированной фазы.

Экспериментальное исследование таких систем требует воспроизводимого перехода от микроскопических изображений к количественным структурным параметрам: координатам, размерам, межчастичным связям, кластерному составу и характеристикам внутренней организации агломератов. Стандартные структурные характеристики неупорядоченных систем

недостаточны для описания распределения частиц различных размеров между периферическими, промежуточными и центральными областями неупорядоченного кластера. В связи с этим актуальная научная задача состоит в установлении закономерностей размерно-зависимой структурной самоорганизации полидисперсных неупорядоченных систем с управляемыми межчастичными взаимодействиями на основе разработки метода количественной структурной параметризации и его применения к анализу внутренней размерной стратификации кластеров и размер-селективной конденсации.

Такая постановка соответствует специальности 1.3.8. Физика конденсированного состояния, поскольку направлена на теоретическое и экспериментальное исследование структуры, самоорганизации и свойств неупорядоченных дисперсных систем, в том числе систем пониженной размерности (монослойные системы), под действием внешних управляющих воздействий.

Степень разработанности темы.

Исследования самоорганизации коллоидных и дисперсных систем активно развиваются в физике мягкой материи и физике конденсированного состояния. В работах В. Манохарана (V. N. Manoharan, 2012, 2015), А. ван Бладерена и М. Дейкстры (A. van Blaaderen, M. Dijkstra, 2011–2021), К. Бехингера и Х. Лёвена (C. Bechinger, H. Löwen, 2013–2016), Р. Далленса (R. P. A. Dullens, 2015–2021) и др. коллоидные системы рассматривались как модельные объекты для изучения кристаллизации, плавления, стеклования, кластерообразования и структурных переходов на уровне отдельных частиц. Сформировано представление о коллоидах как о системах, позволяющих напрямую связывать межчастичные взаимодействия, микроскопическую структуру и коллективные свойства конденсированных сред. Однако значительная часть таких исследований выполнена для монодисперсных или близких к монодисперсным систем, тогда как роль размерной неоднородности в формировании внутренней структуры конечных агломератов изучена существенно менее подробно.

С начала 2000-х гг. активно развивается направление управляемой самосборки дисперсных систем во внешних электрических и магнитных полях. В работах Дж. Мартина и А. Снежко (J. E. Martin, A. Snezhko, 2013), И. Арансона и А. Снежко (I. S. Aranson, A. Snezhko, 2011–2019), П. Тьерно (P. Tierno, 2007–2020), Б. Бхартти, А. Соколова, А. Снежко и соавторов (B. Bharti, A. Sokolov, A. Snezhko, 2022) показано, что внешние поля позволяют управлять эффективными взаимодействиями и формировать цепочки, кластеры, вихревые и другие неравновесные структуры. В российской научной группе С. О. Юрченко, Н. П. Крючкова и Е. В. Яковлева в МГТУ им. Н. Э. Баумана с 2017 г. развиваются подходы к управлению взаимодействиями во вращающихся электрических и магнитных полях. В

работах Е. В. Яковлева, К. А. Комарова, Н. П. Крючкова, С. О. Юрченко и соавторов предложены схемы двумерной самосборки во вращающемся электрическом поле, рассчитаны взаимодействия в конически вращающихся полях, рассмотрена роль годографа поля и показана существенная роль многочастичных взаимодействий (Е. V. Yakovlev, 2017; К. А. Komarov, 2018, 2020; Е. V. Yakovlev, 2021, 2022). Эти исследования создали основу для управляемого изменения межчастичных сил, однако полидисперсность в них, как правило, не рассматривалась как главный физический фактор внутренней организации кластеров.

Роль полидисперсности в фазовом поведении и самоорганизации дисперсных систем изучалась в работах П. Соллиха, М. Фазоло, Н. Уайлдинга (P. Sollich, M. Fasolo, N. Wilding, 2004–2012), Б. Кабана, Ж. Ли, Ф. Артцнера, Л. Гёринга (B. Cabane, J. Li, F. Artzner, L. Goehring, 2016), Р. Далленса и К. Фернандес-Рико (R. P. A. Dullens, C. Fernández-Rico, 2021) и др. Показано, что полидисперсность может приводить к фракционированию, изменению состава сосуществующих фаз, фракционной кристаллизации и образованию иерархических структур. Близкие по физической постановке исследования в России развиваются в работах уральской школы А. О. Иванова, А. Ю. Зубарева, С. С. Канторович и соавторов, посвящённых полидисперсным феррожидкостям, дипольным взаимодействиям, цепообразованию и фазовому разделению в магнитных коллоидах (А. О. Ivanov, 2004, 2007; S. S. Kantorovich, 2007; А. Y. Zubarev, 2020).

Для описания таких систем важны также статистико-физический и численный анализ структуры. В этом контексте следует отметить работы Р. Е. Рыльцева, А. В. Мокшина, В. Н. Рыжова, Ю. Д. Фомина, Е. Н. Циок и соавторов по моделированию жидкостей, фазовых переходов, микроскопической динамики и структурообразования в неупорядоченных системах (R. E. Rytsev, 2019–2022; A. V. Mokshin, 2014–2020; V. N. Ryzhov, Yu. D. Fomin, E. N. Tsiok, 2014–2025). Эти исследования важны для понимания структуры, фазового поведения и динамики неупорядоченных систем, однако не решают непосредственно задачу внутренней размерной стратификации полидисперсных кластеров во вращающемся электрическом поле.

Таким образом, к настоящему времени хорошо разработаны отдельные составляющие рассматриваемой проблемы: управляемые межчастичные взаимодействия во внешних полях, самосборка коллоидных систем, роль полидисперсности в фазовом поведении и фракционировании, а также методы моделирования неупорядоченных конденсированных сред. Однако вопрос о том, как размерно-зависимое притяжение, индуцированное внешним вращающимся электрическим полем, преобразует исходное распределение частиц по размерам во внутреннюю послойную организацию полидисперсных кластеров, не получил систематического рассмотрения. Недостаточно изучена и связь между внутренней размерной стратификацией отдельных кластеров и ансамблевым эффектом

размер-селективной конденсации. Это определяет необходимость разработки метода количественной структурной параметризации таких систем и его применения для установления закономерностей размерно-зависимой самоорганизации в системах с управляемыми межчастичными взаимодействиями во внешних полях.

Цель диссертационной работы состоит в установлении физических закономерностей размерно-зависимой самоорганизации неупорядоченных полидисперсных систем с управляемым притяжением во внешних полях, проявляющихся во внутренней стратификации кластеров и размер-селективной конденсации.

Задачи диссертации:

1. Разработать и обосновать метод перехода от микроскопических изображений к физически интерпретируемым структурным параметрам неупорядоченных дисперсных систем.

2. Ввести послойные и ансамблевые характеристики для количественного описания распределения размерных фракций внутри кластеров и в конденсированной фазе.

3. Апробировать разработанный метод на экспериментальной полидисперсной эмульсионной системе во вращающемся электрическом поле и выявить типы внутренней размерной стратификации кластеров.

4. Установить связь между типом внутренней стратификации, размером кластера, степенью полидисперсности и размерно-зависимым характером межчастичного притяжения.

5. Исследовать условия возникновения размер-селективной конденсации в полидисперсных системах с размерно-зависимым притяжением.

Научная новизна диссертационной работы:

1. Впервые количественно описана внутренняя размерная организация неупорядоченных полидисперсных кластеров через послойные профили среднего размера и дисперсии размеров частиц без предположения о радиальной симметрии агломерата.

2. Впервые экспериментально выявлены два воспроизводимых типа внутренней размерной стратификации полидисперсных кластеров в эмульсионной системе во вращающемся электрическом поле: А-тип с максимумом среднего размера частиц во внутренних слоях и В-тип с максимумом среднего размера в промежуточных слоях.

3. Установлено, что переход от А- к В-типу стратификации является результатом совместного действия размера кластера, степени полидисперсности, геометрических ограничений конечного агломерата и размерно-зависимого характера межчастичного притяжения.

4. Установлен режим размер-селективной конденсации, в котором при конечных значениях параметра притяжения плотная фаза обогащается крупными частицами и имеет более узкое распределение размеров по сравнению с исходным ансамблем.

Положения, выносимые на защиту:

1. Разработанный метод послойного анализа устанавливает распределение размерных фракций между периферическими, промежуточными и внутренними областями неупорядоченного полидисперсного кластера.

2. В полидисперсной эмульсионной системе во внешнем вращающемся электрическом поле формируются два типа внутренней размерной стратификации кластеров: А-тип с максимумом среднего размера частиц во внутренних слоях и В-тип с максимумом среднего размера в промежуточных слоях.

3. Тип внутренней размерной стратификации определяется совместным действием размера кластера, степени полидисперсности, геометрических ограничений конечного агломерата и размерно-зависимого характера межчастичного притяжения.

4. Размерно-зависимое притяжение приводит в конечной области параметров к режиму размер-селективной конденсации, при котором конденсированная фаза обогащается крупными частицами и имеет более узкое распределение размеров по сравнению с исходным ансамблем.

Методология и методы исследования. В работе использованы методы экспериментальной физики мягкой материи и коллоидных систем, оптическая микроскопия, методы цифровой обработки изображений, алгоритмы компьютерного зрения и машинного обучения для детекции и сегментации объектов, методы морфометрического, графового, кластерного, послойного и статистического анализа, а также моделирование методом молекулярной динамики полидисперсных систем с размерно-зависимыми межчастичными взаимодействиями.

Теоретическая значимость состоит в установлении закономерностей размерно-зависимой структурной самоорганизации полидисперсных систем с управляемыми межчастичными взаимодействиями. Вклад в развитие физики неупорядоченного конденсированного состояния вносят: (i) установленная роль полидисперсности во внешнем поле как не только геометрического, но и энергетического фактора структурообразования, определяющего внутреннюю стратификацию кластеров и состав конденсированной фазы; (ii) найденная связь между внутренней размерной стратификацией и размер-селективной конденсацией как кластерным и ансамблевым проявлениями общего размерно-зависимого энергетического механизма.

Практическая значимость заключается в том, что разработанный метод количественной обработки микроскопических изображений может использоваться для анализа структуры неупорядоченных дисперсных систем, в которых необходимо восстанавливать координаты, размеры, форму, связность и кластерную организацию объектов. Метод применим к анализу коллоидных суспензий, эмульсий, микрогелей, пузырьковых сред и клеточных ансамблей после настройки этапа детекции. Полученные

закономерности могут быть использованы при разработке подходов к управляемой самосборке микрочастиц и проектированию мягких материалов, в которых требуется контролировать пространственное распределение частиц различных размеров.

Достоверность обеспечивается физической обоснованностью используемых моделей и структурных параметров, воспроизводимостью разработанной процедуры обработки изображений, статистической устойчивостью полученных послойных и ансамблевых характеристик, анализом большого числа экспериментальных конфигураций, согласованностью результатов на объектном, кластерном и ансамблевом уровнях описания, а также сопоставлением экспериментальных данных с результатами моделирования методом молекулярной динамики.

Личный вклад заключается в разработке и реализации метода количественной структурной параметризации неупорядоченных систем, включая алгоритмы выделения объектов, извлечения морфометрических параметров, построения межчастичных связей, кластеризации и послойного анализа, участия в планировании и проведении экспериментальных исследований полидисперсных эмульсионных систем во внешнем вращающемся электрическом поле, обработке и количественном анализе экспериментальных данных по полидисперсным кластерам, постановке и проведении численного исследования размер-селективной конденсации, анализе, визуализации и физической интерпретации полученных результатов. Экспериментальные исследования и подготовка публикаций выполнялись в соавторстве, при этом результаты, составляющие основное содержание диссертации и выносимые на защиту, получены автором лично или при его определяющем участии.

Результат диссертационной работы заключается в установлении закономерностей размерно-зависимой структурной самоорганизации неупорядоченных полидисперсных систем с управляемыми межчастичными взаимодействиями. Разработан метод количественной структурной параметризации, выявлены два типа внутренней размерной стратификации полидисперсных кластеров и установлен режим размер-селективной конденсации. Показано, что полидисперсность является самостоятельным фактором структурообразования, определяющим внутреннюю архитектуру кластеров и состав конденсированной фазы.

Апробация работы.

Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на 13 российских и международных научных конференциях, школах и семинарах.

Среди них: Всероссийская конференция «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений»: XX, XXI, XXII, XXIII конференции (Сочи, 2021–2024), Международная конференция «Физика А.СПб» (Санкт-Петербург, 2022, 2023); Международная конференция «Современные тенденции

развития функциональных материалов» (Сочи, 2021, 2023), Международная конференция «Dynamic phenomena and tunable self-organisation in soft matter and fluids»: Queen Mary University of London (London, 2022), Международная конференция «Saratov Fall Meeting» (Саратов, 2024, 2025), Всероссийская конференция «Необратимые процессы в природе и технике»: XII и XIII конференции (Москва, 2023, 2025).

Публикации. Основные научные результаты по теме диссертации опубликованы в 18 работах, 2 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК, 7 — в периодических научных журналах, индексируемых Web of Science и Scopus, 9 — в материалах и тезисах докладов конференций.

Среди научных изданий, в которых опубликованы результаты диссертации, представлены журналы, входящие в перечень ВАК по категории К1 и в Белый список научных журналов, уровень 1: Письма в Журнал технической физики [1], Оптика и спектроскопия [2], и ведущие мировые журналы, индексируемые в Web of Science и Scopus: журналы квартиля Q1 по Scopus/SJR — Journal of Molecular Liquids [3], Journal of Colloid and Interface Science [4], Scientific Reports [5], The Journal of Chemical Physics [6; 7], IEEE Access [8]; а также журнал квартиля Q2 — Algorithms [9].

Благодарности. Автор выражает искреннюю благодарность своему научному руководителю, д-ру физ.-мат. наук С. О. Юрченко, за научное руководство, постоянное внимание к выполнению работы и помощь в обсуждении полученных результатов. Автор благодарит коллег НОЦ «Мягкая материя и физика флюидов» МГТУ им. Н. Э. Баумана за плодотворные научные обсуждения и помощь на всех этапах выполнения работы. Отдельную благодарность автор выражает родным и близким за поддержку на протяжении всего периода подготовки диссертации.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 4 глав, и заключения, содержит 147 страниц, включая 27 рисунков и 4 таблицы. Список литературы содержит 179 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во **введении** обосновывается актуальность работы, формулируются цель и задачи исследования, приводятся научная новизна, положения, выносимые на защиту, объект и предмет исследования, методология и методы, достоверность результатов, личный вклад автора, теоретическая и практическая значимость, сведения об апробации и публикациях, а также кратко описывается структура диссертации.

Глава 1 посвящена анализу физических механизмов структурообразования в полидисперсных системах с управляемыми взаимодействиями и

постановке задачи исследования. В разделе 1.1 рассматриваются управляемые межчастичные взаимодействия в дисперсных системах. Кратко обсуждаются механизмы возникновения управляемых взаимодействий во внешних полях, а также коллоидные системы во вращающихся электрических полях как модельные объекты, в которых внешнее поле позволяет изменять эффективное межчастичное притяжение и тем самым управлять процессами самосборки.

В разделе 1.2 рассматриваются полидисперсность и внутренняя структурная организация кластеров. Полидисперсность анализируется как физический фактор структурообразования, влияющий на локальную упаковку, энергетический выигрыш при образовании межчастичных контактов и пространственное распределение частиц различных размеров внутри агломератов. Отдельно обсуждается внутренняя стратификация полидисперсных кластеров как одно из проявлений размерно-зависимой самоорганизации.

В разделе 1.3 рассматриваются методы количественного анализа структуры неупорядоченных систем и их ограничения. Анализируются интегральные и локальные статистические характеристики структуры, геометрические, графовые и топологические представления, а также морфометрия и анализ изображений. Показывается, что для описания послойной размерной стратификации полидисперсных кластеров необходима многоуровневая параметризация, связывающая микроскопическое изображение с физически интерпретируемыми структурными параметрами. В разделе 1.4 формулируются выводы по Главе 1, обобщающие физическую и методическую постановку дальнейшего исследования.

Глава 2 посвящена разработке метода количественной структурной параметризации неупорядоченных систем. Общая схема разработанного метода приведена на Рисунке 1. В разделе 2.1 вводятся методологические основы такого подхода: микроскопическое изображение рассматривается как исходная измерительная форма, из которой должны быть восстановлены координаты, размеры, форма, взаимное расположение частиц и характеристики образуемых ими структур.

В разделе 2.2 рассматривается предварительная обработка изображений как необходимый этап уменьшения погрешностей последующей объектной и ансамблевой параметризации. Обсуждаются физическая природа искажений изображения, влияние этих искажений на измерение структурных параметров и основные процедуры предварительной обработки.

В разделе 2.3 рассматриваются методы детекции, сегментации и параметризации объектов на изображениях неупорядоченных систем. Последовательно обсуждаются квазисферические и слабо перекрывающиеся объекты, анизотропные объекты, перекрывающиеся объекты и объекты

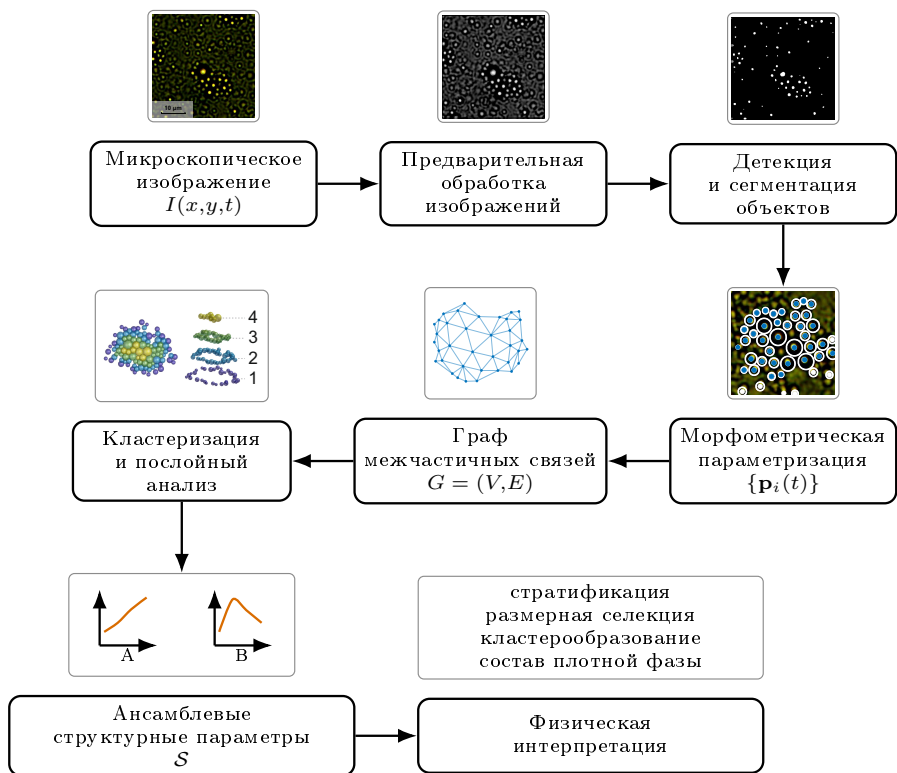


Рисунок 1 — Структура разработанного метода количественной параметризации неупорядоченных систем

сложной морфологии; в завершение раздела формулируются критерии выбора метода сегментации и параметризации в зависимости от морфологии исследуемых объектов.

В разделе 2.4 описывается структура разработанного метода и основные этапы количественной параметризации: объектная параметризация и структурное представление локального окружения, кластеризация объектов, послойный анализ кластеров и расчёт ансамблевых структурных параметров. В заключительной части раздела устанавливается связь разработанного метода с задачами диссертации: анализом внутренней стратификации полидисперсных кластеров и расчётом ансамблевых характеристик конденсированной фазы. В разделе 2.5 приведены выводы по Главе 2.

Глава 3 посвящена структурной стратификации полидисперсных кластеров во внешнем вращающемся электрическом поле. В разделе 3.1

описывается экспериментальная система и условия управляемой самосборки. Рассматривается квазидвумерная полидисперсная эмульсионная система типа масло-в-воде, в которой вращающееся электрическое поле индуцирует эффективное размерно-зависимое притяжение между каплями и приводит к формированию кластеров. При увеличении амплитуды внешнего поля наблюдается усиление самосборки и переход к формированию многослойных кластерных структур.

В разделе 3.2 с использованием метода, разработанного в Главе 2, проводится экспериментальное выявление двух типов внутренней структуры кластеров. Показано, что в полидисперсной системе формируются кластеры типа А, для которых характерна локализация более крупных частиц во внутренних слоях, и кластеры типа В, в которых максимум среднего размера частиц смещён в промежуточные слои. Характерные экспериментальные кластеры и соответствующие им послойные профили нормированного среднего диаметра частиц представлены на Рисунке 2.

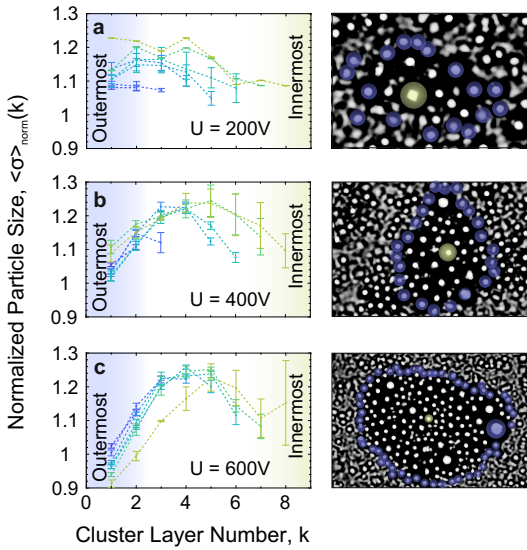


Рисунок 2 — Характерные экспериментальные кластеры и соответствующие им послойные профили нормированного среднего диаметра частиц при различных амплитудах напряжения внешнего поля

В разделе 3.3 анализируется зависимость внутренней стратификации от параметров системы и даётся её физическая интерпретация. Рассматриваются экспериментальные закономерности перехода между структурами типов А и В, проводится сопоставление экспериментальных данных с результатами моделирования методом молекулярной динамики, а также

используется упрощённая теоретическая модель, позволяющая интерпретировать А/В-переход как результат конкуренции размерно-зависимого энергетического выигрыша, геометрии упаковки и конечного размера агломерата. В рамках этой модели показано, что тип внутренней стратификации определяется совместным влиянием числа частиц в кластере N_c и степени полидисперсности системы PDI, что иллюстрируется на Рисунке 3. Для проверки того, что различие между А- и В-кластерами связано именно с размерным перераспределением, а не с общей дефектностью упаковки, проводится анализ топологического беспорядка на основе энтропии Вороного. Существенное перекрытие распределений энтропии для кластеров типов А и В показывает, что оба типа имеют сопоставимый уровень топологического беспорядка, а различие между ними определяется прежде всего внутренним размерным перераспределением частиц.

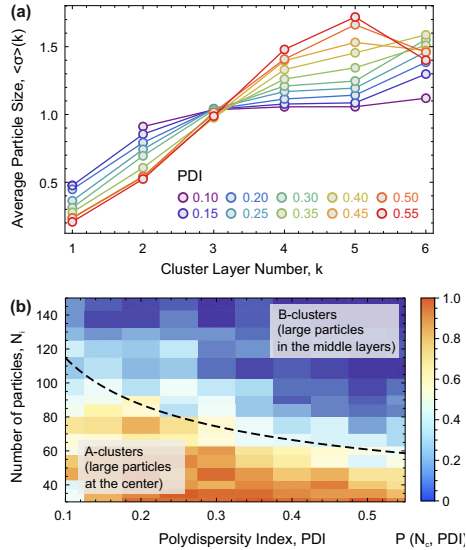


Рисунок 3 — Влияние размера кластера и полидисперсности частиц на тип внутренней размерной стратификации по данным упрощённой теоретической модели: а — послойные профили среднего диаметра частиц $\langle\sigma\rangle(k)$ для кластера из $N_c = 60$ частиц при различных значениях PDI; б — вероятность $P(N_c, \text{PDI})$ того, что максимум $\langle\sigma\rangle(k)$ расположен во внутренних слоях кластера

В разделе 3.4 приведены выводы по Главе 3.

Глава 4 посвящена размер-селективной конденсации в полидисперсных системах. В разделе 4.1 формулируется постановка задачи, вводится

модель системы и описывается методика моделирования методом молекулярной динамики. Рассматривается минимальная модель полидисперсной системы с короткодействующим отталкиванием и размерно-зависимым дальнедействующим притяжением; для количественного описания состава плотной фазы вводятся параметры размерного состава конденсированной фазы.

В разделе 4.2 на основе моделирования методом молекулярной динамики анализируется размер-селективная конденсация в модели управляемых коллоидов. Рассматриваются режимы размер-селективной конденсации, а также влияние плотности, полидисперсности и эволюции распределений размеров на состав конденсированной фазы. Показывается, что при определённых значениях управляющих параметров плотная фаза обогащается более крупными частицами и одновременно характеризуется более узким распределением размеров по сравнению с исходным ансамблем. Карты состояния конденсированной фазы для различных степеней полидисперсности представлены на Рисунке 4.

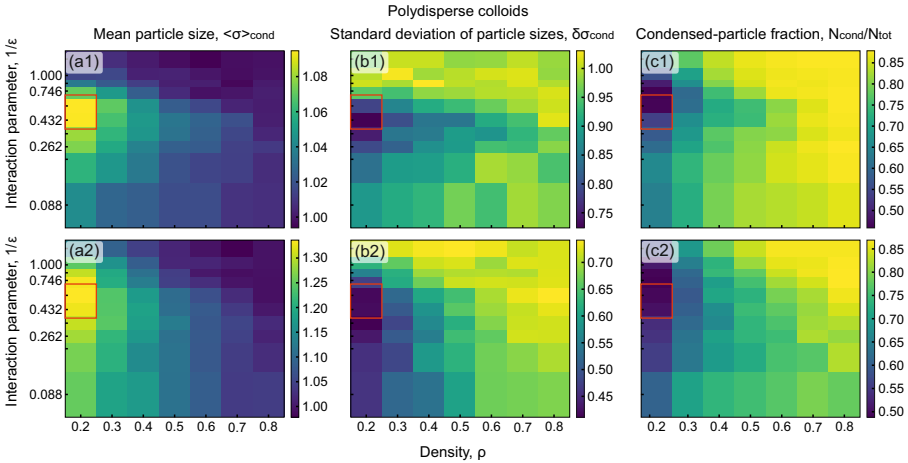


Рисунок 4 — Карты состояния конденсированной фазы в координатах ρ и $1/\varepsilon$ для различных степеней полидисперсности. Область размер-селективной конденсации соответствует промежуточному режиму, в котором плотная фаза одновременно обогащается крупными частицами, $\langle\sigma\rangle_{\text{cond}}/\langle\sigma\rangle_{\text{parent}} > 1$, и характеризуется более узким распределением размеров, $\delta\sigma_{\text{cond}}/\delta\sigma_{\text{parent}} < 1$

В разделе 4.3 обсуждается общность механизма размер-селективной конденсации и его связь с внутренней стратификацией кластеров. Для этого проводится сопоставление с модельной бинарной белковой смесью, после

чего даётся физическая интерпретация полученных результатов и устанавливается связь с результатами Главы 3. Показано, что размер-селективная конденсация не является частным следствием конкретного потенциала управляемых коллоидов, а отражает общий механизм самоорганизации полидисперсных систем с размерно-зависимым притяжением. В разделе 4.4 приведены выводы по Главе 4.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ РАБОТЫ

В диссертационной работе решена научная задача, состоящая в установлении закономерностей размерно-зависимой структурной самоорганизации неупорядоченных полидисперсных систем с управляемыми межчастичными взаимодействиями. Для решения этой задачи разработан метод количественной структурной параметризации неупорядоченных систем и применён к анализу внутренней размерной стратификации кластеров и размер-селективной конденсации в системах с размерно-зависимым притяжением.

В основе работы лежит представление о том, что в системах с размерно-зависимым притяжением полидисперсность выступает не только геометрическим, но и энергетическим фактором структурообразования. Это проявляется на двух уровнях: в распределении размерных фракций внутри отдельных кластеров и в изменении размерного состава конденсированной фазы.

Основные результаты диссертационной работы состоят в следующем:

1. Разработан метод количественной структурной параметризации неупорядоченных дисперсных систем, обеспечивающий переход от микроскопических изображений и координатных данных к объектному, графовому, кластерному, послойному и ансамблевому описанию структуры. Метод позволяет восстанавливать координаты, размеры, связи и кластерную организацию объектов и применим к системам различной физической природы после настройки этапа детекции.

2. Введён послойный способ анализа неупорядоченных полидисперсных кластеров, не требующий предположения о радиальной симметрии агломерата. Послойные профили среднего размера и дисперсии размеров частиц позволяют количественно описывать распределение размерных фракций между периферическими, промежуточными и внутренними областями кластера.

3. На экспериментальных данных по полидисперсной эмульсионной системе типа масло-в-воде во внешнем вращающемся электрическом поле установлены два воспроизводимых типа внутренней размерной стратификации кластеров. Для А-типа максимум среднего размера частиц расположен во внутренних слоях, тогда как для В-типа максимум среднего размера смещён в промежуточные слои.

4. Показано, что переход от А- к В-типу стратификации связан с ростом характерного размера кластера, степенью полидисперсности и геометрическими ограничениями конечного агломерата при размерно-зависимой энергии межчастичного взаимодействия. Установлено, что различие между А- и В-кластерами не сводится к изменению общего уровня топологического беспорядка, а определяется пространственным перераспределением частиц различных размеров между слоями агломерата.

5. Установлен режим размер-селективной конденсации, в котором плотная фаза одновременно обогащается крупными частицами и имеет более узкое распределение размеров по сравнению с исходным ансамблем. Этот режим реализуется не в пределе сильного притяжения, а в конечной области параметров, в частности при $\rho = 0.2$ и промежуточных значениях параметра взаимодействия $1/\epsilon \in [0.432, 0.746]$. При более слабом притяжении конденсация выражена слабо, а при более сильном притяжении селективность ослабевает из-за вовлечения в плотную фазу широкого диапазона размерных фракций.

6. Установлена связь между внутренней размерной стратификацией кластеров и размер-селективной конденсацией как кластерным и ансамблевым проявлениями общего механизма размерно-зависимой самоорганизации. На уровне отдельного кластера этот механизм приводит к перераспределению размерных фракций между слоями агломерата, а на ансамблевом уровне проявляется в обогащении конденсированной фазы крупными частицами и сужении её размерного состава.

Полученные результаты показывают, что внешние вращающиеся электрические поля могут использоваться не только для инициирования самосборки, но и для направленного изменения внутренней структуры полидисперсных кластеров и размерного состава конденсированной фазы. Перспективы дальнейшей разработки темы связаны с распространением предложенного подхода на трёхмерные и квазитрёхмерные системы, учётом многочастичных эффектов, деформируемости частиц и гидродинамических взаимодействий, а также применением методики к другим системам мягкой материи и биофизики.

Основные результаты диссертации отражены в следующих работах:

1. Метод исследования механизмов трехмерной самосборки коллоидных микрочастиц с применением глубокого обучения / И. В. Симкин [и др.] // Письма в Журнал технической физики. 2025. Т. 50, № 24. С. 22–25. (0,29 п. л. / 0,29 п. л.)

2. Метод автоматизированного отслеживания морфологии астроцитов *in vitro* на основе фазово-контрастной микроскопии и глубокого обучения / И. В. Симкин [и др.] // Оптика и спектроскопия. 2026. Т. 134, № 5. С. 496—501. (0,69 п. л. / 0,34 п. л.)
3. Engineering of cluster structure in polydisperse colloids by tunable self-assembly in a rotating electric field / I. V. Simkin [et al.] // Journal of Molecular Liquids. 2025. Vol. 439. P. 128856. (1,30 п. л. / 0,65 п. л.)
4. Spinning microrods in a rotating electric field with tunable hodograph / I. V. Simkin [et al.] // Journal of Colloid and Interface Science. 2025. Vol. 692. P. 137456. (1,77 п. л. / 0,44 п. л.)
5. Machine learning approach for recognition and morphological analysis of isolated astrocytes in phase contrast microscopy / I. V. Simkin [et al.] // Scientific Reports. 2024. Vol. 14, № 1. P. 9846. (0,96 п. л. / 0,24 п. л.)
6. Tunable colloidal spinners: Active chirality and hydrodynamic interactions governed by rotating external electric fields / I. V. Simkin [et al.] // The Journal of Chemical Physics. 2024. Vol. 161, № 4. P. 044903. (1,15 п. л. / 0,19 п. л.)
7. Kinetically blocked self-assembly of colloidal strings with tunable interactions in magnetic fields / I. V. Simkin [et al.] // The Journal of Chemical Physics. 2024. Vol. 161, № 18. P. 184907. (1,45 п. л. / 0,48 п. л.)
8. BCSnet: A U-Net-Based Model for Segmentation of Brain Cells in Trypan Blue Images / I. V. Simkin [et al.] // IEEE Access. 2024. Vol. 12. P. 192915—192930. (1,21 п. л. / 0,60 п. л.)
9. Assessing the Mass Transfer Coefficient in Jet Bioreactors with Classical Computer Vision Methods and Neural Networks Algorithms / I. V. Simkin [et al.] // Algorithms. 2023. Vol. 16, № 3. P. 125. (1,99 п. л. / 0,10 п. л.)
10. Calculation of correlation lengths in 2D Lennard-Jones fluids / I. V. Simkin [et al.] // St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. Vol. 16. 2023. P. 197—204. (0,50 п. л. / 0,50 п. л.)
11. Изучение самосборки полидисперсных систем во внешних вращающихся электрических полях / И. В. Симкин [и др.] // Необратимые процессы в природе и технике: Сборник статей XIII Всероссийской конференции. Часть II. М. 2025. С. 152—155. (0,25 п. л. / 0,12 п. л.)
12. Изучение метастабильных состояний при самосборке коллоидных структур в вертикальных управляющих магнитных полях с помощью методов машинного обучения / И. В. Симкин [и др.] // Необратимые процессы в природе и технике: Сборник статей XIII Всероссийской конференции. Часть I. М. 2025. С. 212—214. (0,19 п. л. / 0,19 п. л.)

13. Цифровые двойники клеток-компонентов нейроваскулярной единицы / И. В. Симкин [и др.] // Биохимия человека: Материалы Всероссийской конференции с международным участием. М. 2024. С. 61. (0,06 п. л. / 0,03 п. л.)

14. Анализ корреляционных длин в области спинодального распада в коллоидных суспензиях с регулируемым межчастичным взаимодействием / И. В. Симкин [и др.] // Необратимые процессы в природе и технике: Труды XII Всероссийской конференции. Часть II. М. 2023. С. 208—212. (0,31 п. л. / 0,31 п. л.)

15. Применение алгоритмов и методов машинного обучения для исследования динамики в мягкой материи / И. В. Симкин [и др.] // Современные тенденции развития функциональных материалов: Материалы докладов Международной молодежной научной конференции. М. 2023. С. 58. (0,06 п. л. / 0,06 п. л.)

16. Новые методы анализа динамики самосборки мягкой материи / И. В. Симкин [и др.] // Современные тенденции развития функциональных материалов: Сборник тезисов докладов Международной молодежной научной конференции. М. 2021. С. 117. (0,06 п. л. / 0,06 п. л.)

17. Применение алгоритмов и методов машинного обучения для исследования динамики самосборки коллоидной мягкой материи / И. В. Симкин [и др.] // Проблемы физики твердого тела и высоких давлений: Сборник научных трудов XXII Всероссийской конференции. М. 2023. С. 131. (0,06 п. л. / 0,06 п. л.)

18. Методы исследования кинетики самосборки мягкой материи во внешних управляющих полях с помощью алгоритмов машинного обучения / И. В. Симкин [и др.] // Физика. СПб: Тезисы докладов Международной конференции. СПб. 2023. С. 325—326. (0,13 п. л. / 0,13 п. л.)

Подписано к печати 30.06.2026. Заказ № _____

Объем 1 печ.л. Тираж 100 экз.
Типография МГТУ им. Н.Э. Баумана
105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д.5, стр.1
(499) 263-62-01