

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Халаимова Даниила Вячеславовича
«Локальная плотность и ближний порядок в классических жидкостях»,
представленную на соискание учёной степени кандидата физико-
математических наук по специальности 1.3.8. «Физика конденсированного
состояния»

Диссертационная работа посвящена разработке методов исследования структурных характеристик классических жидкостей и их граничных слоёв на основе метода интегральных уравнений для частичных функций распределения.

Актуальность работы обусловлена неполнотой наших знаний в области физики жидкого состояния, структура которого принципиально отличается как от твердого тела, так и от газа. Например, применение методов равновесной статистической физики жидкостей для описания структурных характеристик метастабильных состояний до сих пор вызывает вопросы несмотря на то, что в последние 30 лет в описании стеклования переохлажденных жидкостей на основе репличной теории был достигнут существенный прогресс.

Развитие теоретических методов описания жидкостей необходимо для решения многих неотложных задач в области физики, химии, биологии и других естественных и технических наук. В этой связи метод интегральных уравнений в сочетании с численным экспериментом является одним из основных для исследования структурных особенностей классических жидкостей на молекулярном уровне.

Недостатки существующих теоретических моделей в физике жидкостей связаны с учетом нелокальных молекулярных взаимодействий. Целью диссертационной работы является попытка решить указанную проблему путем разработки способа вычисления структурных и

термодинамических характеристик жидкостей и их граничных слоев с учетом вклада неприводимых диаграмм.

Предлагается метод решения полной системы уравнений Орнштейна-Цернике, основанный на аппроксимации всего ряда неприводимых диаграмм, в отличие от существующих подходов, в которых рассматриваются лишь диаграммы определенного порядка. Достоинством такого подхода является возможность его обобщения для вычисления структурных характеристик стекол, получаемых при быстром охлаждении расплава. Такое обобщение позволит расширить область применимости репличной теории стеклообразного состояния, первоначально сформулированной для описания перехода переохлаждённой жидкости в идеальное стекло.

Таким образом, актуальность работы связана с общим положением дел в теории жидкого состояния, требующего новых подходов, с оригинальностью постановки задачи и новизной полученных результатов, а также возможной областью применения.

Структура и содержание работы

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы. Общий объем диссертации составляет 92 страницы, включая 10 рисунков, 2 таблицы. Список цитируемой литературы состоит из 45 наименований.

В **Главе 1** рассмотрены основные представления и методы современной статистической физики жидкостей и стекол. Описаны существующие подходы – метод интегральных уравнений и численные эксперименты. Сформулированы достоинства и недостаток существующих подходов в методе интегральных уравнений. Разработан алгоритм вычисления первой неприводимой диаграммы, учитывающей нелокальные взаимодействия.

В **Главе 2** представлена обобщенная аппроксимация Перкуса-Йефика для структуры граничных слоев на основе модельной жидкости твердых сфер. Традиционный подход к решению интегральных уравнений для одночастичной и двухчастичной функций распределения основан на

аппроксимации двухчастичной функции распределения её граничным значением вдали от поверхности (синглетное приближение). Это вносит неизвестную погрешность при расчетах структурных характеристик граничных слоев, где локальная плотность и ближний порядок существенно отличаются от объемных. В связи с этим в работе предложена модификация синглетного приближения, учитывающая поправку к прямой корреляционной функции одночастичного уравнения, что позволяет оценить изменение ближнего порядка в граничных слоях жидкостей по сравнению с объемным значением.

В **Главе 3** получено аналитическое решение линейного интегрального уравнения Фредгольма второго рода для одночастичной корреляционной функции. Вычислены адсорбция и локальная плотность. Показано, что полученные значения этих термодинамических величин близки к значениям численного эксперимента и превосходят по точности результаты, полученные только в приближении Перкуса-Йефика.

В **Главе 4** предложена аппроксимация бесконечного ряда неприводимых диаграмм, входящих в уравнение для одночастичной функции распределения. Вычислена поправка к прямой корреляционной функции. Задача сведена к решению линейного интегрального уравнения Вольтерра первого рода. Получено численное решение с использованием преобразования Фурье. Произведен расчёт химического потенциала. С помощью известного термодинамического соотношения вычислено давление как функция плотности. Расчёт проведён, не прибегая к процедуре согласования по уравнению состояния и сжимаемости, что присуще большинству приближенных интегральных уравнений. Проведен анализ полученных результатов.

В **Заключении** сформулированы основные результаты работы. Диссертация в целом изложена логично, материалы работы хорошо структурированы и оформлены. Автореферат полно и правильно передаёт содержание и смысл результатов диссертации. Полученные в работе

результаты, сделанные на их основе выводы и защищаемые положения прошли апробацию на всероссийских конференциях и были опубликованы в профильных физических журналах, поэтому их обоснованность не вызывает сомнений. Публикации в рецензируемых научных изданиях отражают содержание диссертационного исследования. Выводы по диссертации являются полными, обоснованными и не противоречат общезначимым представлениям.

Новизна исследования

Структурной характеристикой пространственно-однородных жидкостей является ближний порядок, для теоретического описания которого необходимо задавать соотношения (замыкания) между прямой и парной корреляционной функциями. Наиболее известными из них являются полученные в 60-80-х годах прошлого века замыкания Перкуса-Йевики, гиперцепная и Мартынова-Саркисова.

Однако, структурные характеристики пространственно-неоднородных жидкостей определяются не только ближним порядком, который отличается от ближнего порядка пространственно-однородных жидкостей, но и локальной плотностью. В частности, для определения структуры граничных слоёв жидкостей необходимо решать совместную систему двух уравнений, описывающих локальную плотность и ближний порядок. Соответственно, необходимо задавать два соотношения (замыкания) между прямой и парной корреляционной функциями. Такая задача впервые решена в данной диссертации на основе «обобщённой аппроксимации Перкуса-Йевики».

Таким образом, впервые после 60-80-х годов прошлого века получены новые замыкания, позволившие рассчитать как локальную плотность, так и изменение ближнего порядка в граничных слоях жидкостей.

Теоретическая и практическая значимость

Результаты данной диссертации могут быть использованы для разработки микроскопической теории структурных характеристик жидкостей, их граничных слоёв и стёкол на основе полной системы интегральных

уравнений для частичных функций распределения. Это может позволить расширить область применимости репличной теории стеклообразного состояния, первоначально сформулированной для описания перехода переохлаждённой жидкости в идеальное стекло.

Также представляет интерес развитие предложенной методики в направлении описания процессов в системах другой масштабной иерархии, например, самоорганизации ансамблей сферических наночастиц и образования коллоидных кластеров.

Обоснованность и достоверность научных положений, выводов и заключения

Достоверность результатов подтверждается в том числе, вычислением корреляционных функций различными методами и их согласованием: численное интегрирование уравнений в координатном пространстве и решение методом Фурье

Результаты отражены в 10 печатных работах, включая 4 статьи в профильных физических журналах, в том числе в журнале «Известия РАН (серия Физика)» и в журнале «Ядерная физика и инжиниринг» из списка ВАК по специальности 1.3.8.-Физика конденсированного состояния. По результатам исследований подготовлены и сделаны доклады на 5 Всероссийских научных конференциях.

Диссертация обладает внутренним единством, содержит новые научные результаты и положения, выносимые на защиту, отражает личный вклад автора диссертации в исследование структурных и термодинамических характеристик жидкостей.

Замечания по существу работы

1.В диссертационной работе рассматриваются модельные задачи на основе потенциала твёрдых сфер. Однако, для рассмотрения реалистических жидкостей и тем более для стёкол, как предполагается делать в дальнейшем, необходимо учитывать температурную зависимость структурных характеристик.

2. Переход из расплава в стекло является термодинамически-неравновесным процессом и происходит посредством теплоотвода от расплава с определённой скоростью. Этот факт необходимо учесть в уравнениях Орнштейна-Цернике для частичных функций распределения. Поэтому утверждение автора «Результаты диссертации создают основу для построения полной микроскопической теории жидкостей и стекол на основе системы уравнений Орнштейна-Цернике» (стр.87) необходимо рассматривать как заявку на продолжение исследований для описания стеклования расплавов.

В целом работа выполнена качественно и на достойном уровне, но есть отдельные **недостатки**:

1. В диссертационной работе используется заметное количество специальных аббревиатур, однако отсутствует единый список сокращений, что затрудняет изучение материала.
2. Поскольку разработка программного кода для численного решения уравнения Вольтерра является важным элементом работы, возможно, в состав диссертации следовало бы включить Приложение, содержащее методику численного расчета и фрагменты программного кода.

Заключение

Отмеченные недостатки не имеют характер принципиальных возражений против основных положений работы, не снижают теоретической и практической значимости рассмотренной диссертации. Полученные результаты соответствуют поставленной цели.

Сделанные замечания не влияют на общую положительную оценку выполненной диссертационной работы. Диссертация Халаимова Даниила Вячеславовича представляет собой завершённое научное исследование. Результаты, полученные соискателем, являются достоверными и имеют научную и практическую значимость. Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации. Диссертация соответствует научной специальности 1.3.8.- Физика конденсированного состояния.

Представленная диссертационная работа удовлетворяет требованиям пп.9-14 «Положения о порядке присуждения учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013г., а её автор Халаимов Даниил Вячеславович заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8.- Физика конденсированного состояния.

Официальный оппонент:

кандидат физико-математических наук
по специальности 1.3.14. «теплофизика
и теоретическая теплотехника»,
ведущий научный сотрудник Отделения
«Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова»
Курчатовского комплекса кристаллографии и фотоники
НИЦ «Курчатовский институт»



Лебедев-Степанов Петр Владимирович

«16» июля 2026 г.

Адрес места работы: 119421, г. Москва, ул. Новаторов, д.7а, к.1

Раб. тел. 8 (495) 935-0120, E-mail: petrsl@mail.ru

Подпись к.ф.-м.н. П.В. Лебедева-Степанова заверяю,
Заместитель директора – главный ученый секретарь Национального
исследовательского центра «Курчатовский институт»,
доктор физико-математических наук

Алексеева Ольга Анатольевна

