



УТВЕРЖДАЮ

Директор ИФВД РАН

академик РАН

В.В.Бражкин

«16»

июля

2026 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт физики высоких давлений им. Л.Ф.Верещагина Российской академии наук (ИФВД им. Л.Ф.Верещагина РАН) на диссертационную работу Халаимова Даниила Вячеславовича «Локальная плотность и ближний порядок в классических жидкостях», представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8. «Физика конденсированного состояния»

Актуальность выполненной работы

Метод интегральных уравнений в сочетании с численным экспериментом является одним из основных для исследования структурных особенностей классических жидкостей на молекулярном уровне.

Ближний порядок и локальная плотность в объёмных жидкостях и их граничных слоях вычисляются с помощью парных корреляционных функций, являющихся решением формально точной системы двух нелинейных интегральных уравнений для одно- и двухчастичной функций распределения. Ядра этих уравнений представлены бесконечными рядами неприводимых диаграмм, обусловленных необходимостью учитывать нелокальные межмолекулярные взаимодействия в конденсированных средах. Вычисление даже первой неприводимой диаграммы, учитывающей нелокальные взаимодействия, вызывает вычислительные сложности. При рассмотрении объёмных жидкостей эту проблему обходят аппроксимацией бесконечного ряда неприводимых диаграмм простыми аналитическими функциями, что приводит к различным приближённым уравнениям для двухчастичной функции распределения. В результате, все термодинамические величины (кроме химического потенциала), вычисленные с помощью уравнения состояния или сжимаемости, дают разные значения. Соответственно, приходится прибегать к их согласованию. Тем не менее, в литературе

такой подход является общепринятым. Однако, проблема аппроксимации бесконечного ряда неприводимых диаграмм в уравнении для одночастичной функции распределения и, соответственно, химического потенциала, в литературе до сих пор не рассматривалась. Такой подход позволит рассчитать термодинамические характеристики жидкостей и их граничных слоёв без процедуры термодинамического согласования.

Особую сложность представляет описание структурных характеристик стёкол, полученных охлаждением расплава, для которых эргодическая гипотеза не выполняется. Одним из наиболее перспективных теоретических подходов к описанию процессов стеклования является метод реплик, предложенный в работах Джорджо Паризи и других авторов, в которых теплоотвод от расплава заменяется неким «формальным» внешним полем, фиксирующим частицы в определённых точках пространства. Математическим аппаратом являются интегральные уравнения физики жидкостей, специальным образом сконструированные так, чтобы они описывали локальную структуру стеклообразного состояния.

Подчеркнём, что внешнее поле естественным образом входит в систему уравнений для частичных функций распределения. Поэтому представляется естественным описание перехода из переохлаждённой жидкости в стекло на их основе.

Таким образом, разработка методов решения системы нелинейных интегральных уравнений для одно- и двухчастичной функций распределения применительно к конденсированным средам, является **актуальной проблемой**.

Структура и содержание работы

Диссертация 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 недостатки существующих подходов в методе интегральных уравнений. Проведена оценка 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 приближённой синглетной аппроксимации. Это вносит

неизвестную погрешность при расчетах структурных характеристик граничных слоев, где локальная плотность и корреляции существенно отличаются от объемных. В связи с этим предложена модификация синглетного приближения, вводящая 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 при использовании только приближения Перкуса-Йевики.

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 описывает структуру и смысл результатов диссертации. Публикации в рецензируемых научных изданиях отражают одержание диссертационного исследования. Выводы по диссертации являются полными, обоснованными и не противоречат общефизическим представлениям.

Новизна исследования и полученных результатов

Из представленного выше краткого описания содержания диссертационной работы видно, что в ней рассмотрен широкий круг вопросов, связанных с применением метода интегральных уравнений к вычислению структурных и термодинамических параметров конденсированных сред. К числу наиболее значимых новых научных результатов можно отнести следующие:

1. Разработан алгоритм вычисления первой неприводимой диаграммы для прямой корреляционной функции объёмных жидкостей.

2. Впервые предложена аппроксимация бесконечного ряда неприводимых диаграмм для прямой корреляционной функции в уравнении для одночастичной функции распределения (обобщённая аппроксимация Перкуса - Йефика).
3. На основе обобщённой аппроксимации Перкуса - Йефика вычислены прямая корреляционная функция и структурные характеристики граничных слоёв жидкостей.
4. Вычислен химический потенциал в зависимости от плотности молекулярной системы, что позволило рассчитать термодинамические характеристики жидкостей, не прибегая к их согласованию на основе уравнения состояния или сжимаемости.
5. Сформулировано предположение о способе описания процесса стеклования расплава с учётом теплоотвода от него.

Научная и практическая значимость результатов

Результаты данной диссертации могут быть положены в основу вычисления структурных и термодинамических характеристик практически важных жидкостей и их граничных слоёв. На основе разработанных методов возможно создание подхода к описанию стеклования расплава с учётом теплоотвода от него.

Результаты работы могут быть использованы в научно-исследовательских организациях и университетах, специализирующихся в исследованиях структурных и термодинамических параметров жидкостей и их граничных слоёв: ИГХ СО РАН, Новосибирский государственный университет, НИЯУ МИФИ, СПбГУ, ОИВТ РАН, ИФВД РАН.

Обоснованность и достоверность научных положений, выводов и заключения

Достоверность результатов, представленных в диссертации, обеспечивается адекватным использованием математического аппарата, совпадением полученных аналитических результатов в предельных частных случаях с известными из литературы, а также использованием для моделирования хорошо апробированных численных схем решения интегральных уравнений.

Результаты, представленные в диссертации, отражены в 10 печатных работах, включая 4 статьи в рецензируемых журналах: Известия РАН (серия Физика), Ядерная физика и инжиниринг.

Результаты исследований опубликованы в 3 журналах из списка ВАК по специальности 1.3.8.-Физика конденсированного состояния.

По результатам исследований подготовлены и сделаны доклады на 5 Всероссийских научных конференциях.

В соответствии с пунктом 10 диссертация написана автором самостоятельно, обладает внутренним единством, содержит новые научные результаты и положения,

выносимые на публичную защиту, отражает личный вклад автора диссертации в исследование структурных и термодинамических характеристик жидкостей.

Замечания по содержанию диссертационной работы.

1. В работе приведены результаты расчёта парной корреляционной функции. Следует отметить, что Фурье преобразование этой функции позволяет вычислить структурный фактор и провести непосредственное сравнение с экспериментальными данными по дифракции рентгеновского излучения. К сожалению, в работе данные вычисления не выполнены.
2. В диссертации довольно подробно рассмотрены современные подходы к описанию перехода переохлаждённая жидкость - стекло (теория RFOT). Однако в работе не рассматривается теория связанных мод (МСТ), в рамках которой можно определить температуру динамического перехода, при которой возникает большое число локальных минимумов на энергетическом ландшафте. В приближении МСТ этому соответствует переход в состояние стекла с алгебраической расходимостью времени релаксации. Для микроскопического описания перехода, в принципе, необходимы структурные характеристики жидкостей, которые можно было бы рассчитать в рамках методов, используемых в диссертации. Однако применительно к стеклообразному состоянию высказано только эвристическое соображение без его реализации. Данное замечание следует рассматривать как предложение по дальнейшему развитию полученных в диссертации результатов.
3. В разделе «Научная и практическая значимость» на стр.9 утверждается, что разрабатываемый метод «может быть применён для изучения структурных характеристик поверхностных слоёв диэлектриков». Это утверждение может быть реализовано только после получения фактических результатов в процессе дальнейших исследований по расчёту структурных характеристик объёмных стёкол.

Неточности и опечатки:

4. Нет единообразия в подписях к рисункам. Значения волновых чисел и графики корреляционных функций (рис.2-7) построены в единицах приведённой плотности $\eta = \pi n / 6$, в то время как химический потенциал и давление (рис.8-10) приведены в зависимости от численной плотности n .
5. Пропущенные знаки препинания, например на стр.10 пропущена запятая перед фразой «, чем металлы»

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. Основные результаты получены лично самим автором, либо при его непосредственном участии. Автор принимал участие в выводе аналитических выражений для одночастичной функции распределения и прямой корреляционной функции граничных слоёв жидкостей. Автору принадлежит самостоятельная разработка программного кода для численного решения уравнений Фредгольма второго рода и Вольтерра первого рода. Анализ и интерпретация результатов осуществлялись совместно с научным руководителем. Автореферат отражает содержание диссертации. Диссертация соответствует научной специальности 1.3.8.- Физика конденсированного состояния.

Диссертационная работа Халаимова Даниила Вячеславовича на тему «Локальная плотность и ближний порядок в классических жидкостях» является законченной научно-квалификационной работой, обладающей признаками актуальности, научной новизны и значимости для теории и практики.

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.

Доклад Халаимова Д.В. заслушан и обсуждён на семинаре Лаборатории фазовых переходов в сильно коррелированных и неупорядоченных системах ИФВД им. Л.Ф. Верещагина РАН «17» марта 2026г. <http://hppi.troitsk.ru/meetings/seminar/seminar-1.htm>

Отзыв подготовил:

Рыжов Валентин Николаевич, 1.3.8.-Физика конденсированного состояния, д.ф.-м.н., член.-корр. РАН, тел. +7 (495) 851 0013, Россия, Москва, Троицк, 108840, Калужское шоссе, стр. 14, email: ryzhov@hppi.troitsk.ru

Дата «16» июля 2026 г.


подпись

Рыжов Валентин Николаевич

Подпись сотрудника В.Н. Рыжова заверяю:
Ученый Секретарь ИФВД РАН
к.ф.-м.н.

«16» июля 2026 года



 Анкудинов Владимир Евгеньевич