

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 24.2.306.01 НА БАЗЕ
Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения
высшего образования «Иркутский государственный университет»
Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
по диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета
от «23» сентября 2026 г. № 11

О присуждении Халаимову Даниилу Вячеславовичу, гражданину РФ, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Локальная плотность и ближний порядок в классических жидкостях» по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния принята к защите 23 июня 2026 г., протокол №8, диссертационным советом Д 24.2.306.01 на базе Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Иркутский государственный университет» Министерства образования и науки Российской Федерации (664003, г. Иркутск, бульвар Гагарина, д. 20, приказ Рособнадзора о создании диссертационного совета № 1634–894 от 13.07.2007 г.).

Соискатель – Халаимов Даниил Вячеславович 1998 года рождения. В 2022 г. окончил с отличием магистратуру Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Иркутский государственный университет» (ФГБОУ ВО «ИГУ») по направлению подготовки 03.04.03. «Радиофизика» и в 2026 г. аспирантуру ФГБОУ ВО «ИГУ» по направлению подготовки 1.3.8 - Физика конденсированного состояния. Удостоверение о сдаче кандидатских экзаменов выдано в 2026 г. ФГБОУ ВО «ИГУ».

В период подготовки диссертации и по настоящее время соискатель Д.В.Халаимов работает младшим научным сотрудником в НИИПФ ФГБОУ ВО «ИГУ» и в ФГБУН ФИЦ Иркутском Институте химии СО РАН в должности инженера.

Диссертация выполнена на кафедре общей и экспериментальной физики ФГБОУ ВО «ИГУ».

Научный руководитель – Аграфонов Юрий Васильевич, доктор физико-математических наук (1.3.8 - Физика конденсированного состояния), профессор кафедры радиофизики и радиоэлектроники Федерального бюджетного государственного образовательного учреждения высшего образования Иркутский государственный университет (ФГБОУ ВО «ИГУ»).

Официальные оппоненты:

Апфельбаум Евгений Михайлович, доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединённый институт высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН), старший научный сотрудник лаборатории №7.2 теплофизических и кинетических свойств вещества;

Лебедев-Степанов Пётр Владимирович, кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» – Отделение «Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова» Курчатова комплекса кристаллографии кристаллографии и фотоники; дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики высоких давлений им. Л.Ф.Верещагина (ИФВД им. Л.Ф.Верещагина РАН) Российской академии наук – в своем положительном заключении, подготовленным Рыжовым Валентином Николаевичем, член.-корр. РАН, доктором физико-математических наук (1.3.8 –

Физика конденсированного состояния), заведующим Лабораторией фазовых переходов в сильно коррелированных и неупорядоченных системах ИФВД им. Л.Ф.Верещагина и утверждённом директором ИФВД РАН, академиком РАН В.В.Бражкиным, указала, что представленная диссертация является законченной научно- квалификационной работой, обладающей признаками актуальности, научной новизны и значимости для теории и практики и удовлетворяет всем требованиям п.п. 9-14 «Положения о порядке присуждения учёных степеней» (постановление Правительства РФ №842 от 24 сентября 2013 г., ред. от 18.03.2023), предъявляемым к кандидатским диссертациям, а её автор, Халаимов Даниил Вячеславович, заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико- математических наук по специальности 1.3.8. – Физика конденсированного состояния.

Результаты научной деятельности по теме диссертации Халаимова Даниила Вячеславовича опубликованы в 10 работах, 4 из которых в научных изданиях, включённых в международные реферативные базы данных Scopus и Web of Science, в том числе 1 статья в журнале «Известия РАН (Серия Физика)» (англоязычная версия в журнале Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics.) и 3 статьи в журнале «Ядерная физика и инжиниринг» (англоязычная версия в журнале Physics of Atomic Nuclei) из списка ВАК по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния, 6 – в сборниках трудов конференций.

В опубликованных работах по теме диссертации представлены методы исследования молекулярной структуры классических жидкостей на основе формализма интегральных уравнений для частичных функций распределения. Для достижения этой цели построен аналитический способ расчёта старших членов диаграммного разложения, позволяющий продвинуться за пределы существующих на данный момент подходов к решению уравнений, что позволило рассчитать структурные и термодинамические характеристики как однородных, так и пространственно-неоднородных систем.

В диссертации не обнаружены недостоверные сведения об опубликованных соискателем учёной степени работах, авторском вкладе и объёме научных изданий.

Наиболее значимые научные публикации по теме диссертации:

1. Agrafonov Y. V. Percus–Yevick Approximation for the Direct Correlation Function of the Boundary Layers of Liquids / Y. V. Agrafonov, I. S. Petrushin, D. V Khalaimov et al. // Physics of Atomic Nuclei. – 2025. – Т. 88, №. 9. – P. 1658-1664.
2. Agrafonov Y. V. Nonlocal Effects of Intermolecular Interaction in Boundary Layers of Liquids / Y. V. Agrafonov, I. S. Petrushin, D. V Khalaimov et al. // Physics of Atomic Nuclei. – 2024. – Т. 87, №. 10. –P. 1444-1448.
3. Agrafonov Y. V. Singlet Equations for the One-Particle Distribution Function of Surface Layers in Liquids / Y. V. Agrafonov, I. S. Petrushin, D. V. Khalaimov et al. // Physics of Atomic Nuclei. – 2023. – Т. 86, №. 9. – P. 2064-2067.
4. Agrafonov Y. V. Long-Range Correlations in the Surface Layers of Liquids / Y. V. Agrafonov, I. S. Petrushin, D. V Khalaimov // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. – 2022. – Т. 86, №. 7. – P. 820- 822.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

Официальный оппонент Апфельбаум Евгений Михайлович, доктор физико-математических наук, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединённый институт высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН), старший научный сотрудник лаборатории №7.2 теплофизических и кинетических свойств вещества. Отзыв положительный, содержит следующие замечания:

1. Диссертант существенным образом опирается на систему с потенциалом твёрдых сфер. И в тексте (глава 2.1) присутствует словесное описание её фазовой диаграммы с указанием параметров упаковки, соответствующим фазовым границам. Но можно было бы и добавить иллюстрацию. Кроме этого, помимо уравнения Карнахана-Старлинга следовало бы указать и более свежие

уравнения состояния. И бесспорно следовало бы добавить ссылки на оригинальные работы, где получено аналитическое решение для системы твёрдых сфер с замыканием Перкуса-Йевики (уравнение (2.6.)).

2. Развитый метод применяется только для системы твёрдых сфер. Это вполне объяснимо, так как именно для этой системы с замыканием Перкуса-Йевики существует аналитическое решение. Но нужно рассмотреть и другие системы с более сложными потенциалами взаимодействия. Хотя это и потребовало бы больше численных расчётов, но сделало бы работу ещё более ценной как с теоретической, так и с практической точек зрения.

3. Нет никаких сравнений с экспериментом. Между тем в диссертации есть ссылка на классическую работу Розенфельда и Ашкрофта, в которой было сказано, что в окрестности кривой плавления поведение жидкости становится в ряде аспектов универсальным и подобным, с определённой точностью, именно системе твёрдых сфер. Поэтому надо было бы сравнить структурные факторы – экспериментальные и рассчитанные по предлагаемому методу для твёрдых сфер – в соответствующей области фазовой диаграммы, чтобы понять точность такого подобия.

4. Стр.28. Следующие фразы точные, но неполные: «Бридж-функционалы в методе интегральных уравнений статистической физики по существу являются аналогом диаграмм Майера в теории неидеальных газов. Отличие в том, что разложение происходит по степеням парной корреляционной функции h ». Необходимо отметить, что разложение Майера – это тоже разложение по степеням h , но при плотности, стремящейся к нулю.

5. Стр.28. Следующее определение неполное: «Диаграммы называются неприводимыми так как их не представляется возможным свести к выражению типа свёртки, то есть прямое и обратное преобразование не применимо». Нужна более аккуратная формулировка, так как есть и другие определения неприводимых диаграмм, не связанные с возможностью возникновения свёртки.

Официальный оппонент Лебедев-Степанов Петр Владимирович, кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» – Отделение «Институт кристаллографии им. А.В.Шубникова» Курчатова комплекса кристаллографии и фотоники. Отзыв положительный, содержит следующие замечания:

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

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина

(ИФВД им. Л.Ф.Верещагина РАН) Российской академии наук. Отзыв положительный, содержит следующие замечания:

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 преобразования 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 стеклольному 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.
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. Встречаются пропущенные знаки препинания, например на стр.10 пропущена запятая перед фразой «, чем металлы»

Отзывы на автореферат:

1. Булатов Михаил Валерьянович, доктор физико-математических наук (специальность 05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ), главный научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт динамики систем и теории управления им. В. М. Матросова СО РАН. Отзыв положительный, содержит следующие замечания:

- Поскольку разработка программного кода для численного решения уравнений является важным элементом работы, в диссертацию следовало бы включить методику численного расчета и программного кода.

2. Дамдинов Баир Батуевич, доктор физико-математических наук (специальность 1.3.8 – Физика конденсированного состояния), старший научный сотрудник лаборатории физики молекулярных структур Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт физического материаловедения СО РАН. Отзыв положительный, содержит следующие замечания:

- К недостаткам работы следует отнести отсутствие в обзоре литературы упоминания о структурных характеристиках диэлектриков, свойства которых существенно отличаются от свойств модельных жидкостей.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается широкой известностью их достижений в области физики конденсированного состояния, наличием публикаций по данному направлению, а также способностью определить научную и практическую значимость диссертационной работы.

Официальный оппонент доктор физико-математических наук, Апфельбаум Е.М. – известный учёный в области теоретических исследований теплофизических свойств вещества в жидком и газообразном состоянии, в частности в его научные интересы входят – статистическая физика, законы подобия на основе идеальных линий на фазовой диаграмме жидкостей, метод Монте-Карло, методы интегральных уравнений теории жидкостей, численные модели коэффициентов переноса металлов в жидкой и газообразной фазах. Имеет более 60 научных работ, в том числе в высокорейтинговых российских и зарубежных журналах.

Официальный оппонент кандидат физико-математических наук Лебедев-Степанов П.В. – высококвалифицированный специалист по физике конденсированного состояния, чьи научные разработки направлены на применение физико-химических методов и компьютерного моделирования в области многомасштабного тепломассопереноса, изучение термодинамических свойств материалов под воздействием различных внешних полей, исследование кристаллизации растворов в микрокаплях, в частности в его научные интересы входят акусто-микрофлюидика, физические основы (статистическая физика) самоорганизации и самосборки ансамблей наночастиц в микрокаплях и тонких плёнках жидкостей. Имеет более 30 значимых научных публикаций в области физики конденсированного состояния.

Ведущая организация – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина (ИФВД им. Л. Ф. Верещагина РАН) Российской академии наук – научное учреждение, широко известное своими работами в области структурных особенностей и фазовых переходов в конденсированных средах, которые непосредственно связаны с темой диссертации. Член-корреспондент РАН, д.ф.-м.н Рыжов В.Н., является высококвалифицированным специалистом в области фазовых переходов в сильно коррелированных и неупорядоченных средах.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных

соискателем исследований **предложен:** новый подход к вычислению структурных и термодинамических характеристик объёмных жидкостей и их граничных слоев, основанный на обобщенной аппроксимации Перкуса-Йевики, который сводит сложную задачу суммирования бесконечного ряда неприводимых диаграмм в одночастичном уравнении Орнштейна-Цернике к последовательному решению двух линейных интегральных уравнений для прямой корреляционной функции; **показано**, что обобщённая аппроксимация Перкуса-Йевики позволяет вычислять химический потенциал и другие характеристики жидкостей не привлекая процедуру их термодинамического согласования; **применена** модель твёрдых сфер, позволяющая провести аналитические вычисления структурных и термодинамических характеристик граничных слоёв жидкости; **подтверждено**, что предложенный подход повышает точность расчетов термодинамических величин по сравнению с традиционным приближением Перкуса-Йевики для парной корреляционной функции пространственно- однородных жидкостей.

Теоретическая значимость исследования обусловлена тем, что в диссертации предложена обобщённая аппроксимация Перкуса-Йевики для граничных слоёв жидкостей, позволяющая свести вычисление вклада неприводимых диаграмм в одночастичной функции распределения к последовательному решению линейных интегральных уравнений Фредгольма второго рода и Вольтерра первого рода. Такая аппроксимация является принципиально новой в статистической физике граничных слоёв жидкостей, в отличие от существующих аппроксимаций, справедливых только для пространственно-однородных жидкостей вдали от ограничивающих поверхностей.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики. Практическая значимость полученных результатов заключается в том, что в существующих подходах термодинамические параметры вычисляются с помощью парной функции распределения. Однако, численное решение интегральных уравнений на основе приближённых аппроксимаций для парной

функции распределения как правило приводит к несогласованности термодинамических параметров, вычисленных либо по уравнению состояния, либо по сжимаемости. Тем самым, корректность вычисления термодинамических величин определяется сравнением с данными численного эксперимента, служащего эталоном точности, в результате чего теряется внутренняя логика теории.

Практически важным результатом диссертации является то, что приближённое значение парной функции распределения применяется для вычисления химического потенциала, с помощью которого определяются остальные термодинамические величины, в результате чего устраняется проблема термодинамического согласования. Это важно для решения тех задач теории жидкостей, для которых затруднено проведение численного эксперимента. В частности, знание химического потенциала как функции плотности и температуры позволяет перейти к решению уравнений, описывающих стеклование расплава, что важно для физического материаловедения.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что все основные результаты, полученные в диссертационном исследовании, являются достоверными. Достоверность основных результатов подтверждается адекватным использованием математического аппарата интегральных уравнений для частичных функций распределения, хорошим согласованием вычисленных термодинамических характеристик с известными данными численного моделирования (методы молекулярной динамики). Полученные в диссертации результаты не противоречат известным физическим представлениям, результатам работ других авторов в аналогичных областях исследований.

Личный вклад соискателя. 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, на основе численных решений, выполненных автором самостоятельно. Автору принадлежит разработка программного кода, для численного решения уравнения Фредгольма второго рода и Вольтерра

первого рода. Анализ и интерпретация результатов осуществлялись совместно с научным руководителем.

У автора нет конфликта интересов с соавторами публикаций и другими коллегами, принимавшими участие в исследованиях, отражённых в диссертации.

Диссертационный совет пришёл к выводу, что диссертация Халаимова Даниила Вячеславовича, является законченным научным исследованием, выполненным по актуальной тематике, результаты которого имеют высокую научную и практическую значимость.

Работа соответствует специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния и п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г., редакция от 18.03.2023, а также отвечает требованиям ВАК РФ, предъявляемым к кандидатским диссертациям.

На заседании 23 сентября 2026 г. диссертационный совет принял решение присудить Халаимову Даниилу Вячеславовичу ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 14 человек, из них 4 доктора наук по специальности 1.3.8 – Физика конденсированного состояния, участвовавших в заседании, из 20 человек, входящих в совет, проголосовали: за – 13, против – нет, недействительных бюллетеней – 1.

Председатель

диссертационного совета Д 24.2.306.01,

доктор физико-математических наук,

старший научный сотрудник

Буднев Николай Михайлович

Ученый секретарь диссертационного совета

Д 24.2.306.01, доктор физико-математических наук, доцент

Растёгин Алексей Эдуардович

23 сентября 2026 г.

