

На правах рукописи



НАСИРОВ АРТУР ДАМИРОВИЧ

Обобщенный интерполяционный метод расчета парных корреляционных функций в классических жидкостях и мягкой материи

Специальность 1.3.8. Физика конденсированного состояния

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой 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:

Мокшин Анатолий Васильевич

доктор физико-математических наук, профессор
ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет», заведующий кафедрой вычислительной физики и моделирования физических процессов

Рыльцев Роман Евгеньевич

доктор физико-математических наук, ФГБУН
«Институт металлургии им.Н.А. Ватолина Уральского отделения Российской академии наук», главный научный сотрудник лаборатории неупорядоченных систем

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки «Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук» (ИФВД РАН)

Защита диссертации состоится «14» октября 2026 г. в 14:00 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 г.

Ученый секретарь диссертационного
совета, кандидат технических наук,
доцент



Лоскутов Сергей
Александрович

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность. Теоретическое и экспериментальное исследование физических свойств неупорядоченных конденсированных систем, включая классические жидкости и конденсированную мягкую материю (в т.ч. пониженной размерности), прогнозирование изменения их физических свойств в зависимости от внешних условий представляет собой актуальную задачу физики конденсированного состояния. В особенности стоит подчеркнуть важность разработки методов расчета корреляций в классических жидкостях и комплексных флюидах, т.н. мягкой конденсированной материи (молекулярные жидкости и эмульсии, биологические коллоидные системы, допускающие описание в терминах классического аппарата физики конденсированного состояния).

Одной из ключевых структурных характеристик конденсированного состояния является функция радиального распределения или парная корреляционная функция $g(r)$ (ПКФ), отражающая пространственную организацию частиц. Функция $g(r)$ играет фундаментальную роль в статистической физике, связывая макроскопические термодинамические свойства с межчастичными взаимодействиями (в приближении парных взаимодействий) и позволяя вычислять давление, изотермическую сжимаемость и внутреннюю энергию в рамках вириальных уравнений. ПКФ также является ключевым объектом теории флуктуаций и необходима для интерпретации экспериментальных и численных данных. Задача вычисления $g(r)$ хорошо изучена для разреженных газов, однако для жидкостей и плотных систем остаётся существенно более сложной. Интегральные уравнения Орнштейна-Цернике (ОЦ) с разными замыкающими соотношениями обладают сильно ограниченной точностью и требуют заранее неизвестных замыкающих соотношений. Применение иерархии Боголюбова-Борна-Грина-Кирквуда-Ивона также осложнено необходимостью заранее неизвестных замыкающих соотношений и высокой вычислительной сложностью. Методы расчета парных корреляций в жидкостях остаются недостаточно проработанной областью физики классического конденсированного состояния.

В настоящее время основным инструментом поиска $g(r)$ в жидкостях остаются методы молекулярной динамики и Монте-Карло, требующие значительных вычислительных ресурсов и не предоставляющие аналитически параметризованных аппроксимаций для парных корреляционных функций. Вследствие этого в теоретических и экспериментальных исследованиях часто применяются

упрощённые модели или численные данные, что ограничивает точность анализа, особенно вблизи линии плавления (кристаллизации) и в комплексных флюидах. Таким образом, разработка новых аналитических и вычислительно эффективных методов описания парных корреляционных функций в жидкостях остаётся актуальной задачей современной физики конденсированного состояния.

Степень разработанности темы диссертации. Степень разработанности темы, связанной с описанием парной корреляционной функции $g(r)$ в жидкостях, имеет длительную историю в статистической физике конденсированного состояния. Первые систематические представления о радиальной функции распределения были сформулированы в работах Дж. Гиббса, где $g(r)$ введена как ключевая характеристика пространственной структуры многочастичных систем. Существенный этап развития теории связан с уравнением Орнштейна–Цернике, установленным Л. Орнштейном и Ф. Цернике, связывающим полную и прямую корреляционные функции. Параллельно развивалась иерархия уравнений Боголюбова–Борна–Грина–Кирквуда–Ивона (ББГКИ), обеспечивающая строгое описание многочастичных распределений и связь структурных и термодинамических характеристик жидкости. Значительный вклад внесли работы по вириальному разложению и теории флуктуаций, установившие связь $g(r)$ с макроскопическими термодинамическими величинами. Для разреженных газов и слабовзаимодействующих систем аналитические выражения $g(r)$ получаются в рамках кинетической теории и разложений по плотности, включая подходы Больцмана–Уленбека–Ферми. В кристаллических системах $g(r)$ вычисляется суммированием по узлам решётки с учётом фононных возбуждений, а также в рамках интерполяционных подходов, основанных на кратчайших графах. Для плотных жидкостей основными методами остаются молекулярная динамика, Монте-Карло моделирование и решения интегральных уравнений статистической физики, включая уравнение Орнштейна–Цернике с различными замыканиями. В настоящее время $g(r)$ представляет собой важный междисциплинарный инструмент физики конденсированного состояния, используемый при решении широкого круга задач — от анализа структуры и термодинамики жидкостей до разработки новых методов численного моделирования и интерпретации экспериментальных данных в химии и материаловедении. Вместе с тем, несмотря на значительный прогресс в применении $g(r)$, развитию универсаль-

ных и вычислительно эффективных методов её расчёта уделяется сравнительно меньшее внимание, особенно в контексте сложных жидкоподобных систем, неравновесных сред и систем с нетривиальными типами взаимодействий.

Цель диссертационной работы – проверить применимость интерполяционного метода для расчета парной корреляционной функции в широком классе физических систем, включая двумерные и трёхмерные, классические и комплексные жидкости разной природы с разными типами межчастичных взаимодействий.

Задачи диссертации:

1. Проверить применимость интерполяционного метода для восстановления парных корреляционных функций в двумерных и трёхмерных жидкостях с парными и многочастичными типами межчастичных взаимодействий.
2. Провести экспериментальную проверку интерполяционного метода на основе данных о коллоидных частицах во внешних вращающихся электрических полях.
3. Разработать на основе интерполяционного метода подход восстановления парной корреляционной функции однородного состояния на основе данных о кластере конечного размера.
4. Продемонстрировать работу интерполяционного метода на активных живых системах мягкой материи и изучить влияние подвижности частиц на вид фазовой диаграммы неравновесных систем с межчастичным притяжением.

Научная новизна диссертационной работы:

1. Впервые продемонстрирована универсальность нового интерполяционного метода расчета парных корреляционных функций в широком классе двумерных флюидов, включая монослойные классические жидкости, агентные клеточные модели и мягкую материю с управляемым взаимодействием во внешних электрических вращающихся полях.
2. Впервые получено экспериментальное подтверждение ключевых положений интерполяционного метода для жидкостей.

3. Впервые выполнено обобщение интерполяционного метода на объемные (трехмерные) жидкости, с разными типами межчастичных взаимодействий, многочастичные взаимодействия по модели встроеного атома.
4. Продемонстрирована возможность восстановления парной корреляционной функции однородного состояния систем на основе данных о кластере конечного размера.

Положения, выносимые на защиту:

1. Экспериментально подтверждены основополагающие принципы интерполяционного метода для расчета парных корреляционных функций в широком классе двумерных жидкостей.
2. Интерполяционный метод применим к трёхмерным жидкостям с парными и многочастичными взаимодействиями.
3. В рамках интерполяционного метода парная корреляционная функция однородного состояния восстанавливается по данным для систем конечного размера.

Методология и методы исследований. Основу решения сформулированных задач составляют современные методы физики конденсированного состояния, статистической физики, химической физики, физики мягкой материи, физики активной материи и компьютерного моделирования. Расчеты методом молекулярной динамики выполнены в открытых программных пакетах LAMMPS и HOOMD-Blue. Моделирование клеточных тканей выполнено в открытом программном пакете CompuCell3D. Постобработка результатов моделирования и экспериментов выполнена с использованием программных кодов, реализованных на Python3 / C++ / CUDA автором настоящей диссертации.

Обоснованность и достоверность результатов и выводов подтверждается корректностью использования методов физики конденсированного состояния и методов вычислительной физики (в частности, методов молекулярной динамики); полученные результаты согласуются с ранее известными результатами, представленными в литературе; результаты моделирования методом молекулярной динамики, результаты моделирования клеточных тканей воспроизводимы и устойчивы к изменениям основных параметров. Кроме того, досто-

верность результатов подтверждается согласованностью результатов, полученных на основе разных подходов, включающих теоретические, вычислительные и экспериментальные методы.

Личный вклад автора состоит в разработке программных кодов для проведения расчетов, подготовке и проведении компьютерных моделирований, постобработке результатов моделирования методом молекулярной динамики, участии в постобработке экспериментальных результатов, в разработке теоретических моделей, сопоставлении результатов теории, моделирования и экспериментов и последующем анализе и интерпретации результатов. Все основные результаты получены автором лично, либо при непосредственном участии.

Теоретическая значимость. Обобщенный и проверенный на экспериментальных данных интерполяционный метод расчета парной корреляционной функции $g(r)$ в классических жидкостях различной природы позволяет по-новому теоретически проанализировать двумерные и трёхмерные системы, а также системы с многочастичными и дальнodelствующими взаимодействиями, включая равновесные и неравновесные активные жидкости. Выявленные пределы универсальности структурных характеристик, связанные с ближайшими корреляционными оболочками, где асимметрия и эксцесс корреляционных пиков отклоняются от газоподобного поведения, указывают на существование характерного пространственного масштаба, разделяющего газоподобные и кристаллоподобные режимы корреляций, что вносит вклад в развитие физики жидкости. Продемонстрированная возможность восстановления парной корреляционной функции однородного состояния систем на основе данных о кластере конечного размера вводит физически-обоснованный подход к определению т.н. физически-малого объема, в котором формируются свойства жидкостей разной природы. Обнаруженная роль подвижности частиц в изменении фазовой диаграммы, возникновение новых областей фазового поведения, доменов параметров, в которых сосуществуют три фазы и возникает бифуркационное и гистерезисное поведение системы вносит вклад в неравновесную физику классического конденсированного состояния.

Практическая значимость диссертационной работы заключается в возможности применения предложенного интерполяционного метода для вычислительно эффективного восстановления парной корреляционной функции $g(r)$ в широком классе жидких и неупорядоченных систем. Предложенный подход

может быть использован при обработке экспериментальных данных рентгеновского и нейтронного рассеяния, а также спектроскопических методов, включая EXAFS, для исследования структуры жидкостей, стеклообразных и других неупорядоченных материалов.

Результат диссертационной работы представляет собой решение актуальной задачи физики конденсированного состояния – разработка нового подхода к анализу структур и корреляций жидкостей, а также его проверка на разных системах, включая эксперименты с коллоидными частицами во внешних вращающихся электрических полях и системы биологических клеток.

Апробация работы. Результаты работы представлены на 10 всероссийских и международных конференциях: Всероссийская конференция «Необратимые процессы в природе и технике» (Москва, 2021, 2025), Школа-конференция молодых ученых «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений» (Сочи, 2021, 2022, 2023, 2024, 2025), Международная конференция «ФизикА. СПб.» (Санкт-Петербург 2022), Международная молодежная научная конференция «Современные тенденции развития функциональных материалов» (федеральная территория «Сириус» 2021, 2023).

Публикации. Основные результаты диссертационной работы опубликованы в 7 научных работах, индексируемых в Scopus/WoS и в журналах рекомендуемых ВАК РФ. Среди научных изданий, в которых опубликованы результаты диссертации ведущие мировые журналы, такие как Physical Review E [1, 6, 7], Journal of Molecular Liquids [2], The Journal of Chemical Physics [3, 4], Scientific Reports [5]. Все журналы на момент опубликования работ входили в Q1 Scopus / WoS.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, 3 глав и заключения, содержит 113 страниц, 37 рисунка и 2 таблицы. Список литературы включает 209 источников.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

В **Введении** кратко обосновывается актуальность работы, формируется цель, перечисляются положения, выносимые на защиту, указывается научная новизна, достоверность, практическая и фундаментальная значимость результатов, личный вклад автора, апробация и содержание по главам.

Глава 1 является обзорной: рассматривается роль парной корреляционной

функции в физике конденсированного состояния, ее связь с термодинамическими параметрами системы, например энергией, давлением и т. д. Кратко изложены теория ОЦ, теория ББГКИ и теория интерполяционного метода (ИМ) кратчайших графов для описания парных корреляционных функций в кристаллах. Представлены актуальные научные результаты в области ФКС, полученные с использованием парной корреляционной функции.

На Рис. 1 показано сравнение ряда современных моделей воды, включая mW, iAmoeba, SPC/E и TIP4P/2005, путём сопоставления рассчитанных радиальных функций распределения кислород–кислород с экспериментальными данными. На Рис. 2 проведено сравнение различных замыкающих соотношений в рамках теории интегральных уравнений Орнштейна–Цернике для однокомпонентной жидкости Леннарда–Джонса.

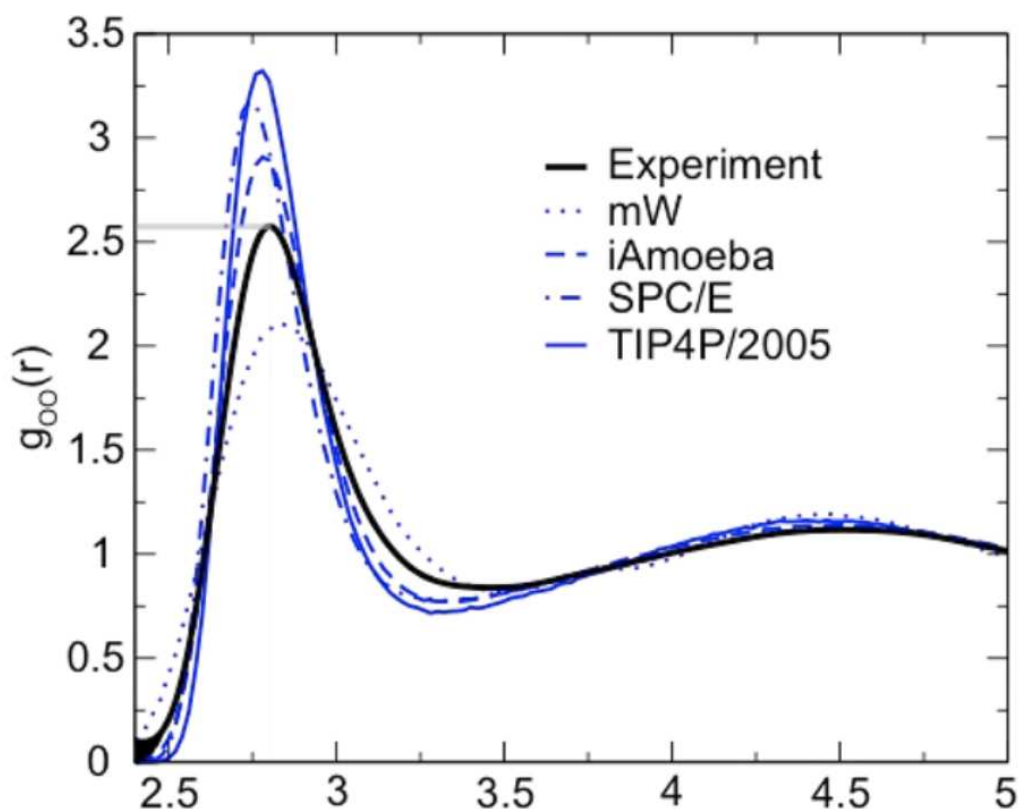


Рисунок 1 — Расхождение моделирований и экспериментальных данных для пар $O - O$ в H_2O . Chemical Reviews. 2016. May. Vol. 116 № 13. P. 7570–7589

Рассмотрены основные теоретические и вычислительные методы расчёта парной корреляционной функции в жидкостях. Показано, что существующие подходы обладают рядом ограничений и не всегда обеспечивают качественное согласие с экспериментальными данными. На основании проведённого анализа обоснована актуальность разработки новых методов расчёта парной корреляци-

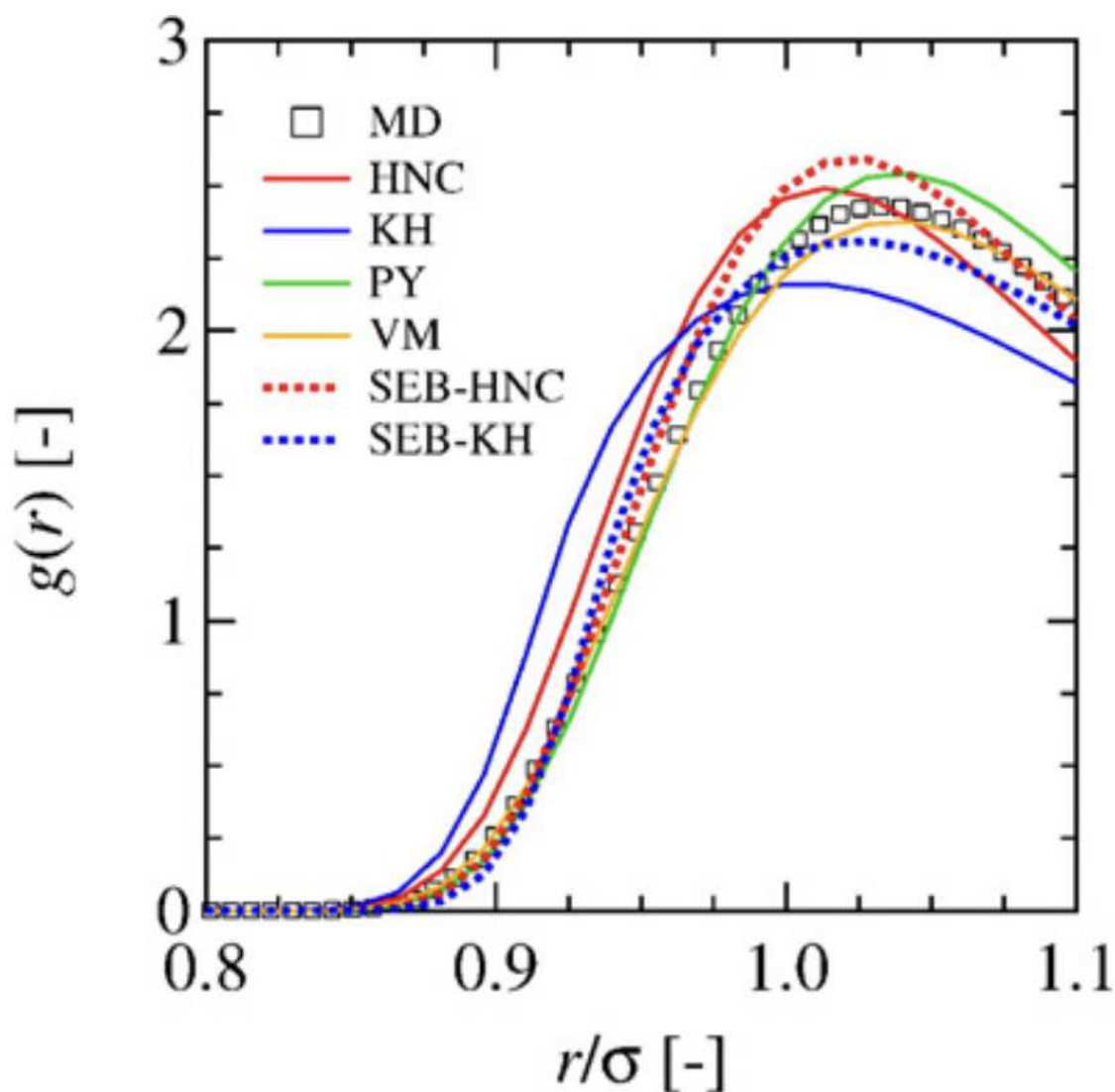


Рисунок 2 — Расхождение между МД и теорией ОЦ для ЛД-жидкости при $k_B T / \epsilon = 2.4$ Journal of Molecular Liquids. 2016. May. Vol. 217. P. 75–82.

онной функции, а также сформулированы цель и основные задачи диссертационной работы.

Глава 2 посвящена обобщению и широкомасштабному тестированию ранее разработанного интерполяционного метода (ИМ) для жидкостей. Показана теория ИМ для жидкостей, продемонстрирована работа ИМ на различных двумерных неупорядоченных жидкоподобных системах, включая клеточные ткани и активные жидкости. На Рис. 3 продемонстрировано разложение парной корреляционной функции для различных двумерных систем, в том числе двух серий экспериментов с коллоидными частицами во внешних вращающихся электрических полях. Продemonстрирована работа ИМ для описания парных корреляций в трехмерных ЛД системах и трехмерных системах с многочастичными взаимодействиями Рис.4. Проведено экспериментальное подтверждение осно-

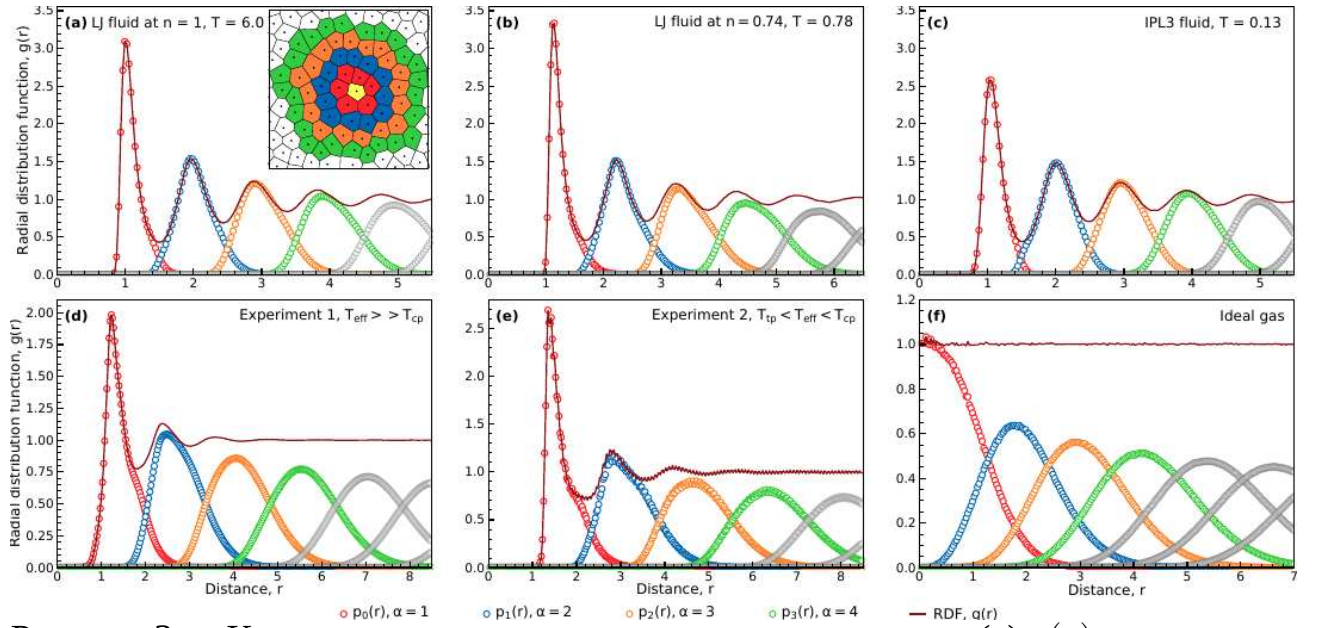
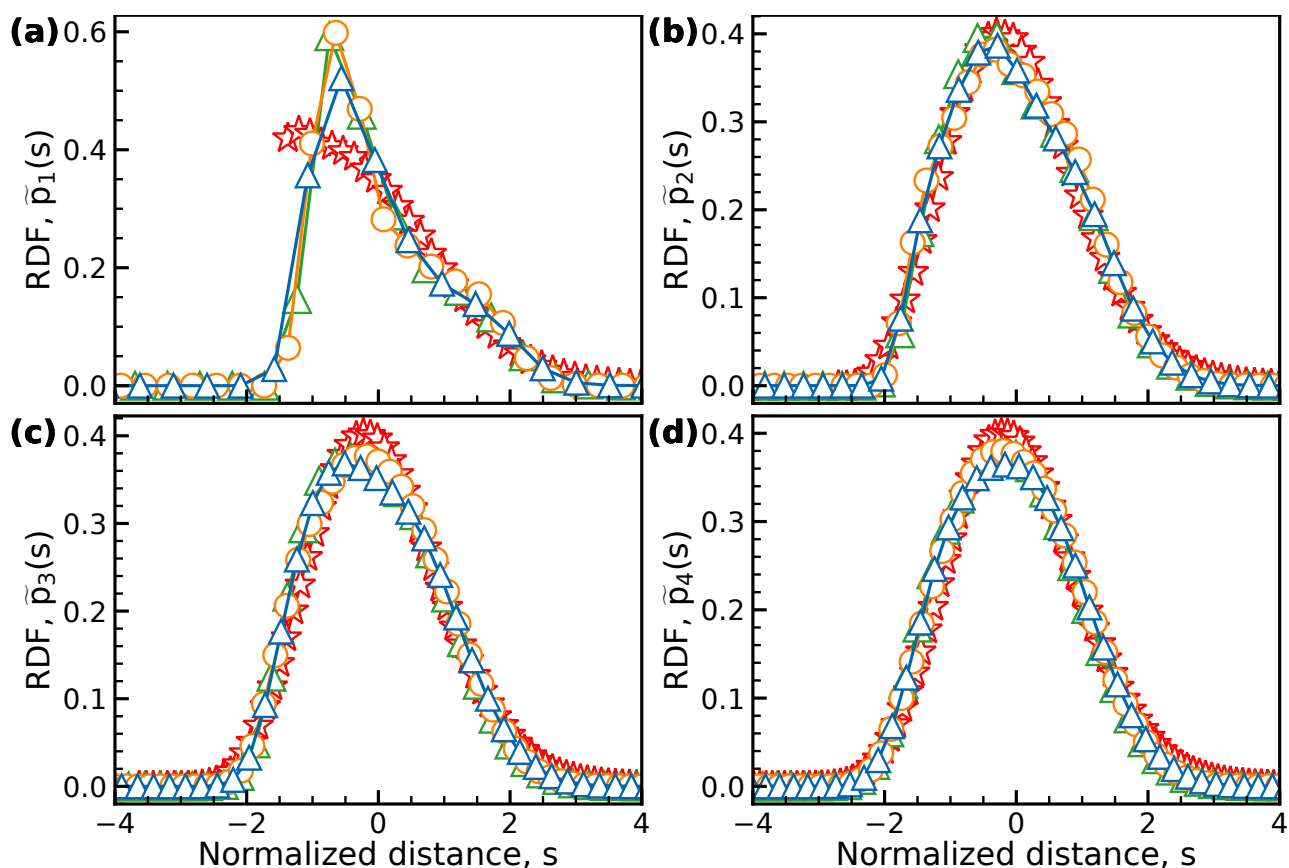


Рисунок 3 — Корреляционные пики для различных систем: (а) $g(r)$ -разложение при $T = 6$ по корреляционным сферам Вороного. Сплошная линия представляет $g(r)$, тогда как красные, синие, оранжевые и зелёные символы обозначают вклады первой, второй, третьей и четвёртой корреляционных сфер соответственно. (b) $g(r)$ -разложение для жидкости ЛД при $n = 0,74$ и $T = 0,78$ (с) $g(r)$ -разложение при $T = 0,13$ для жидкости ОСПЗ (d) $g(r)$ -разложение для первого эксперимента при $T_{eff} > T_{cp}$ (e) $g(r)$ -разложение для второго эксперимента при $T_{tp} < T_{eff} < T_{cp}$ (f) $g(r)$ -разложение для идеального газа. На врезке показаны мгновенные корреляционные сферы, определенные с помощью кратчайших графов и ячеек Вороного

вополагающих принципов ИМ. Показано, что ИМ может быть применим для анализа систем фазового расслоения конечного размера и восстановления из них парной корреляционной функции для однородных бесконечных систем. В ходе экспериментальных исследований двумерной коллоидной жидкости с регулируемыми взаимодействиями во вращающихся электрических полях и компьютерных моделирований двумерных и трёхмерных ансамблей частиц показано, что радиальная функция распределения $g(r)$ в жидкостях может быть разложена на корреляционные пики $p_\alpha(r)$. Эти пики представляют собой вклады частиц, находящихся внутри корреляционных сфер порядка α , выявленных триангуляцией Вороного, что обеспечивает экспериментальное подтверждение гипотезы, ранее основанной исключительно на МД-моделировании двумерных систем. При соответствующей нормировке параметры нормы $M(\alpha)$, средние расстояния $\bar{R}(\alpha)$ и среднеквадратичное отклонение $\Sigma^2(\alpha)$ функции $p_\alpha(r)$ сходятся к универсальной зависимости Рис.5 для всех рассматриваемых систем,



☆ Ideal gas 2D ○ Hg, 3D fluid at $n = 13.546\text{g/cm}^3$, $T = 741.8\text{K}$
 △ LJ 3D fluid at $n = 1$, $T = 4.8$ △ Fe, 3D fluid at $n = 10\text{g/cm}^3$, $T = 4500\text{K}$

Рисунок 4 — Корреляционные пики для различных 3D- и 2D-систем: (a)–(d) первый, второй, третий и четвёртый нормализованные пики $\tilde{p}_1(s)$, $\tilde{p}_2(s)$, $\tilde{p}_3(s)$, $\tilde{p}_4(s)$ для 3D-модели ЛД, жидких Hg и Fe и 2D-модели идеального газа для сравнения

несмотря на различия в 1) плотностях; 2) температуре; 3) межчастичных потенциалах, варьирующихся от хорошо известных парных потенциалов ЛД или ОСП до сложных многочастичных взаимодействий в экспериментах с коллоидными частицами или в моделях ЕАМ и даже в случае идеального газа, где взаимодействия отсутствуют; 4) природе систем, включая как равновесные жидкости, так и неравновесные активные жидкости; 5) размерности системы.

Обнаружено, что, несмотря на свою простоту, предложенный метод интерполяции функции $g(r)$ в жидкостях обеспечивает высокую точность, и относительные ошибки составляют менее 1.5%. Соответствующие температурные зависимости ошибок показаны на Рис. 6. После построения интерполяции расчёт каждой новой функции распределения с такой точностью занимает миллисекунды, тогда как аналогичный расчёт на основе МД-моделирования, осо-

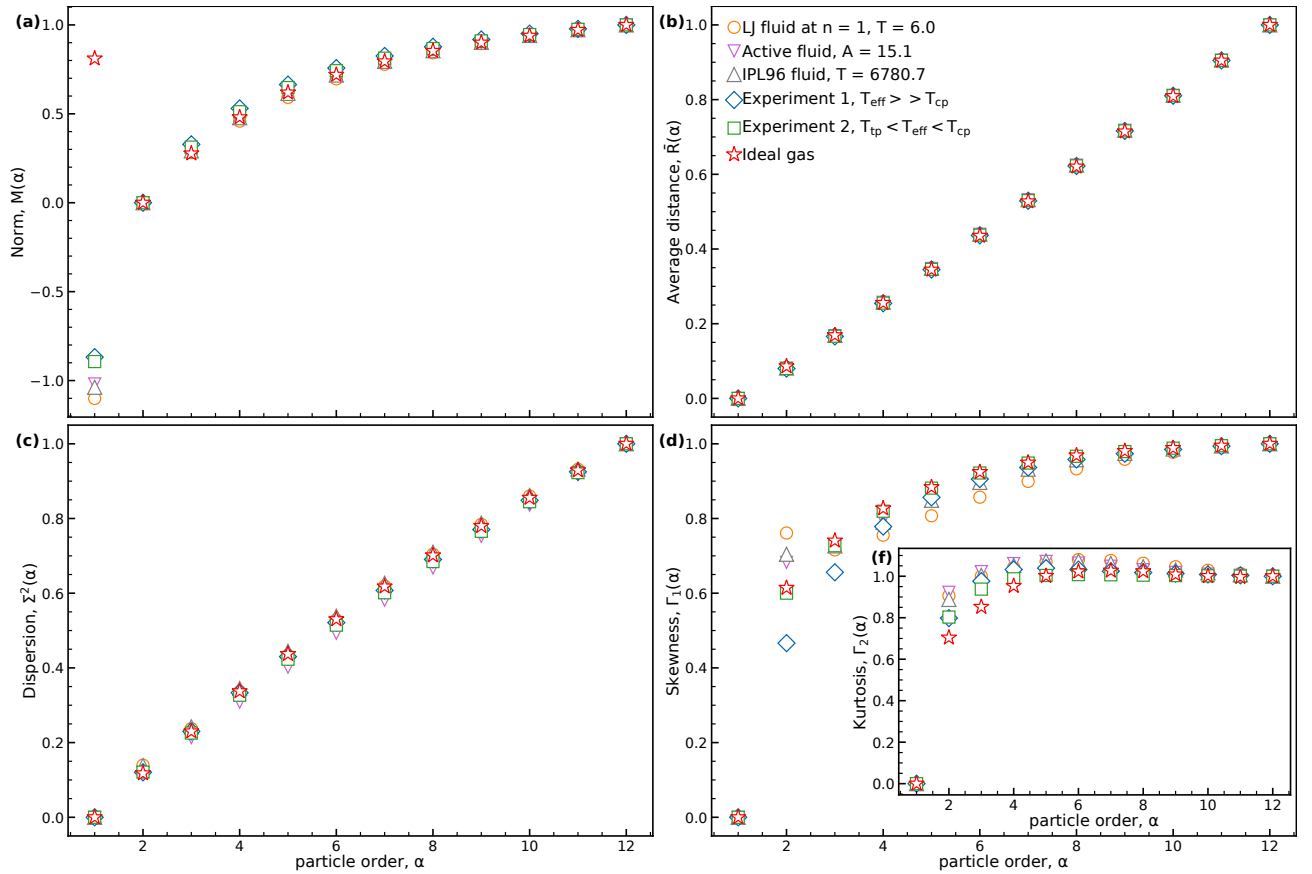


Рисунок 5 — Нормированные параметры корреляционных пиков $p_\alpha(r)$ для двумерных систем: (a) - (f) порядковые зависимости параметров среднего расстояния $\bar{R}(\alpha)$, СКО $\Sigma^2(\alpha)$, асимметрии $\Gamma_1(\alpha)$ и эксцесса $\Gamma_2(\alpha)$, полученные из $\bar{r}(\alpha)$, $\sigma^2(\alpha)$, $\gamma_1(\alpha)$, $\gamma_2(\alpha)$ для ЛД, активных жидкостей и жидкостей ОСП96, а также двух серий экспериментов с настраиваемыми взаимодействиями и идеальным газом

бенно для сложных или далекодействующих взаимодействий, может занимать минуты или часы. Точность, наблюдаемая для исследованных систем различной природы, от жидкостей ЛД и ОСПЗ до жидкоподобных состояний в модели биологической ткани, надёжно подтверждает универсальность представленного метода интерполяции для жидкостей и открывает новые перспективы для его будущих приложений.

Глава 3 посвящена исследованию фазового расслоения активной системы с межчастичным притяжением. Приводится описание проводимых расчетов методом МД и распознавания фаз. Показана эволюция бинодалей фазовой диаграммы системы активных частиц с межчастичным притяжением, при увеличении активности системы. Рассчитанные бинодали показаны на Рис.7 (a) - (d) для 8 значений активности в диапазоне $A \in [0, 29.18]$. Бинодали в представленных расчетах уходят далеко за критическую точку, это связано: 1) с применением ме-

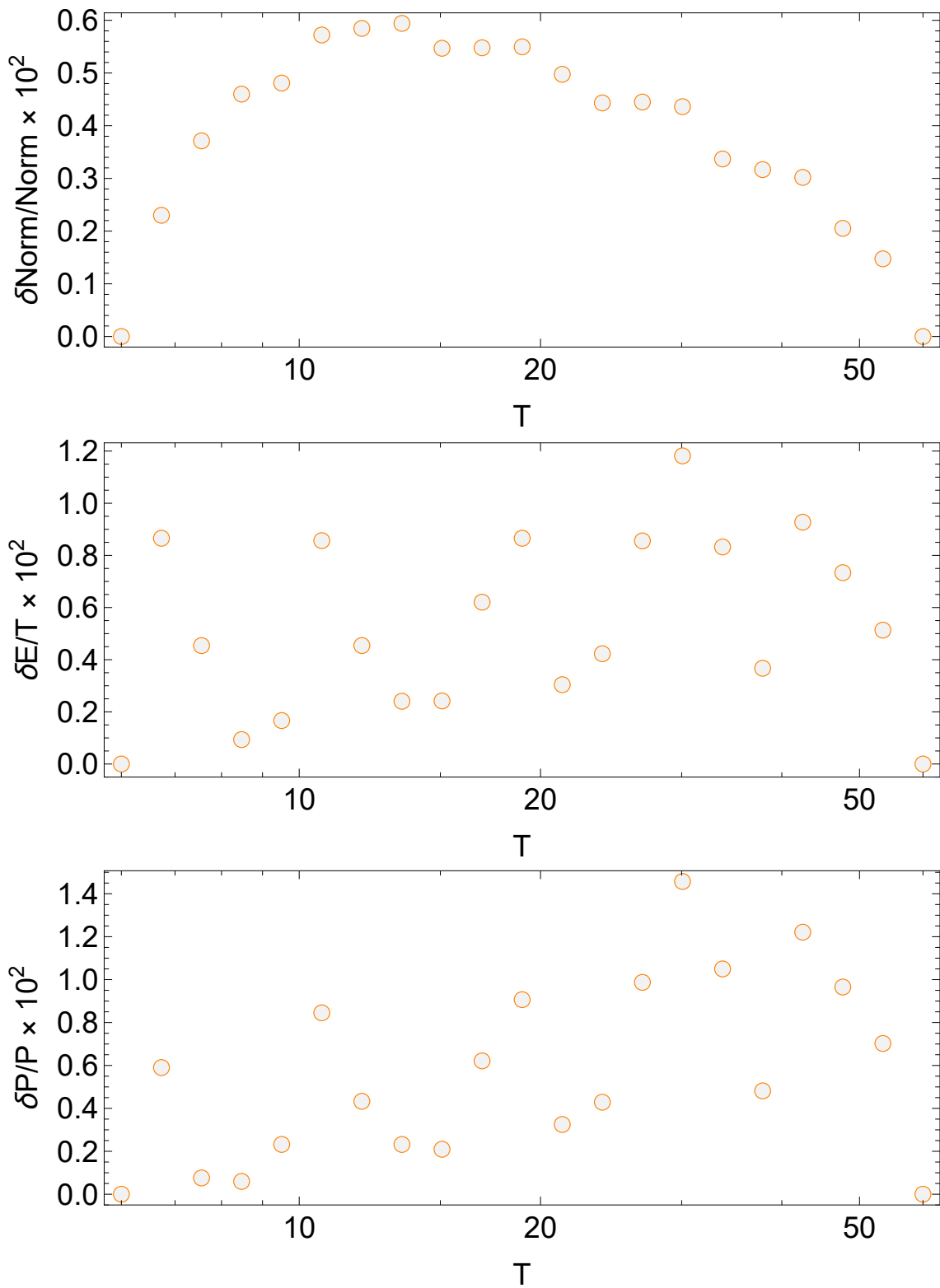


Рисунок 6 — Температурные зависимости точности предлагаемого подхода для интерполяции $g(r)$

тогда распознавания фаз на всем промежутке температур и активностей, даже в регионах, где система уже имеет однородное состояние; 2) с особенностью метода распознавания фаз, который способен обнаруживать локальные изменения плотности в однородной системе. Изучено гистерезисное поведение системы,

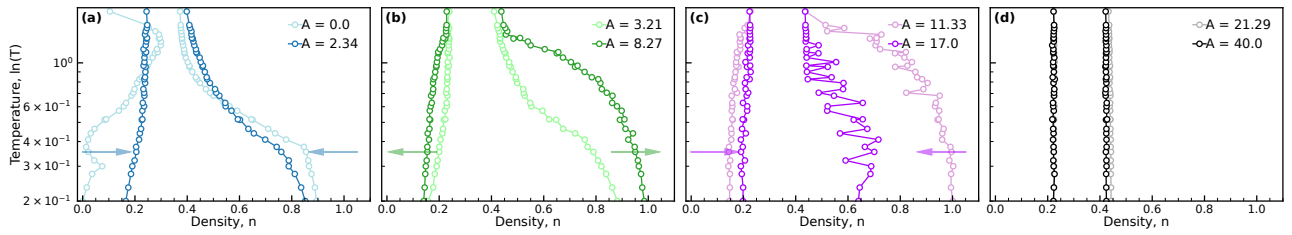


Рисунок 7 — Газ-жидкостная бинодаль для системы ЛД12-6 для (а) первой; (б) второй; (с) третьей и (д) четвёртой областей

и показана невозвратимость фазового состояния при изменении температуры термостата. Систематически изучено фазовое расслоение в активной системе монослоя частиц ЛД12-6 с ланжевеновской динамикой в широком диапазоне активности частиц и температуры термостата. С помощью МД моделирования, обнаружено, что активность изменяет фазовую диаграмму системы. Обнаружено, что поведение ветвей бинодалей характеризуется четырьмя регионами в зависимости от диапазона активности частиц. Каждый регион соответствует доминированию одного из двух механизмов фазового расслоения.

В **общих выводах и заключении** обобщаются основные результаты диссертации.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1) Систематически изучено фазовое расслоение в активной системе монослоя ЛД12-6 частиц с ланжевеновской динамикой в широком диапазоне активности частиц и температуры термостата. Используя моделирование МД, обнаружено, что активность изменяет фазовую диаграмму системы. Обнаружено, что поведение ветвей бинодалей характеризуется четырьмя регионами в зависимости от диапазона активности частиц. Каждый диапазон связан с доминированием одного механизма фазового расслоения над другим.

2) В ходе экспериментальных исследований двумерной коллоидной жидкости с настраиваемыми взаимодействиями, вызванными вращающимися электрическими полями, и МД-моделирования ансамблей двумерных и трёхмерных частиц, показано, что радиальная функция распределения $g(r)$ в жидкостях может быть разложена на корреляционные пики $p_\alpha(r)$. Эти пики представляют собой вклады частиц, находящихся внутри корреляционных сфер порядка α , выявленных триангуляцией Вороного, что обеспечивает экспериментальное подтверждение гипотезы, ранее основанной исключительно на МД-моделировании двумерных систем.

3) При соответствующей нормировке параметры $M(\alpha)$, средние расстояния $\bar{R}(\alpha)$ и среднеквадратичное отклонение $\Sigma^2(\alpha)$ функции $p_\alpha(r)$ сходятся к универсальной зависимости для всех рассматриваемых систем, несмотря на различия в (i) плотности, (ii) температуре, (iii) межчастичных потенциалах, варьирующихся от хорошо известных парных потенциалов ЛД или IRL до сложных многочастичных взаимодействий в экспериментах с коллоидными частицами или в моделях ЕАМ и даже в случае идеального газа, где взаимодействия отсутствуют, (iv) природе систем, включая как равновесные жидкости, так и неравновесные активные жидкости и (v) размерности системы.

4) Обнаружено, что более чувствительные к форме параметры, асимметрия $\Gamma_1(\alpha)$ и эксцесс (или негауссовость) $\Gamma_2(\alpha)$, демонстрируют меньшую универсальность: они проявляют универсальное поведение только на дальних пиках корреляции, в то время как отклонения возникают на ближайших пиках. Пространственный масштаб, на котором исчезают различия в поведении этих параметров между данной системой и идеальным газом, определяется конкретным состоянием системы. Этот характерный масштаб потенциально может быть использован для определения точки перехода между кристаллоподобным и газоподобным режимами в парных корреляционных функциях жидкости.

5) Полученные результаты демонстрируют принципиальную возможность восстановления парной корреляционной функции и её параметров для однородных систем на основе данных фазового расслоения. Это открывает путь к применению ИМ для анализа ограниченных, неоднородных и экспериментально наблюдаемых систем, где прямое моделирование или измерение бесконечного ансамбля затруднено.

Данные результаты открывают путь для будущих исследований того, как диапазон и мягкость межчастичных потенциалов влияют на обнаруженные области фазового поведения системы, влияние общей плотности системы, параметров поступательного и вращательного затухания на наблюдаемые явления. Как межчастичное притяжение влияет и на другие феномены активной материи, например на коллективные микротечения жидкостях. Результаты могут послужить основой для новых усовершенствованных алгоритмов обработки экспериментальных данных в области нейтронного или рентгеновского рассеяния, а также в спектроскопических методах, таких как EXAFS (Extended X-ray Absorption Fine Structure), для различных неупорядоченных материалов, вклю-

чая жидкости и стекла. В частности, это может оказаться полезным для изучения динамически остановленных состояний или различения перекрывающихся корреляционных пиков, слившихся из-за близкого расположения или высокой дисперсии. Кроме того, применение этого метода к коллоидным экспериментам должно сократить необходимость проведения многочисленных сложных экспериментов, позволяя искать более эффективные экспериментальные режимы и выявлять новые закономерности. В целом, результаты будут интересны широкому сообществу специалистов в области физики жидкостей, статистической физики, коллоидной науки, мягких сред и биофизики. В частности, они могут способствовать развитию методов анализа и характеристики структуры жидкостей. Представленный метод, использующий ИМ, открывает путь к комплексному исследованию парных корреляций как в жидкостях, так и в квазикристаллах. Результаты, окажутся ценными и актуальными для исследователей в различных областях, включая конденсированные состояния, материаловедение, химическую физику и исследования мягких сред.

Публикации по результатам диссертации

1. Denisenko I. R., Nasyrov A. D., Kryuchkov N. P. Influence of pinning on diffusion in two-dimensional colloidal systems with tunable interparticle interactions // *Physical Review E*. 2025. Aug. Vol. 112 № 2. (1.17 п.л. / 0.3 п.л.)
2. Experimental validation of correlation peak universality in classical fluids / Nasyrov A. D. [et al.] // *Journal of Molecular Liquids*. 2025. May. Vol. 426. P. 127241. (1.62 п.л. / 1.1 п.л.)
3. Kinetically blocked self-assembly of colloidal strings with tunable interactions in magnetic fields / Nasyrov A. D. [et al.] // *Journal of Chemical Physics*. 2024. Nov. Vol. 161 № 18. 184907. (1.45 п.л. / 0.1 п.л.)
4. Interpolating the radial distribution function in a two-dimensional fluid across a wide temperature range / Nasyrov A. D. [et al.] // *Journal of Chemical Physics*. 2024. Sep. Vol. 161 № 9. (1.1 п.л. / 0.4 п.л.)
5. Machine learning approach for recognition and morphological analysis of isolated astrocytes in phase contrast microscopy / Nasyrov A. D. [et al.] // *Scientific*

Reports. 2024. Apr. Vol. 14 № 1. P 9846. (0.95 п.л. / 0.15 п.л.)

6. Influence of anomalous agents on the dynamics of an active system / Nasyrov A. D. [et al.] // Physical Review E. 2024. Mar. Vol. 109 № 3. (0.7 п.л. / 0.25 п.л.)
7. Inertia changes evolution of motility-induced phase separation in active matter across particle activity / Nasyrov A. D. [et al.] // Physical Review E. 2023. Apr. Vol. 107 № 4. (0.95 п.л. / 0.25 п.л.)

Подписано к печати 30.06.2026 Заказ №634

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