

## ОТЗЫВ

доктора физико-математических наук, профессора кафедры общей и теоретической физики физического факультета ФГБОУ «Самарский государственный университет» Крутова Александра Федоровича на автореферат диссертации Еремина Романа Александровича на тему **«Молекулярно-динамическое моделирование в анализе данных малоуглового рассеяния нейтронов органическими растворами»**, представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Работа выполнена под научным руководством д.ф.-м.н., профессора Холмуродова Холмирзо Тагойкуловича и д.ф.-м.н. Авдеева Михаила Васильевича на базе Лаборатории нейтронной физики имени И.М. Франка Объединенного института ядерных исследований (ОИЯИ) и представлена в диссертационный совет Д 720.001.06 при Лаборатории нейтронной физики имени И.М. Франка и Лаборатории ядерных реакций имени Г.Н. Флерова.

В автореферате представлены результаты исследования микроструктуры растворов жирных монокарбоновых кислот в органических растворителях (бензол и декалин) при комплементарном использовании методов молекулярно-динамического (МД) моделирования и малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН). По данным МД расчетов были проанализированы особенности сольватации молекул монокарбоновых кислот в органических растворителях и изучен эффект влияния размера растворителя на данные МУРН растворами. Особенностью работы является совместное комплементарное использование данных экспериментальных и теоретико-модельных подходов к анализу микроструктуры вещества, которое является актуальной методологической задачей физики конденсированного состояния вещества в настоящее время. Актуальность работы Романа Александровича подтверждается и возможностями практического использования полученных им результатов, поскольку изученные растворы применяются для синтеза различных по своей природе коллоидных систем, где кислоты играют роль стабилизирующего компонента (поверхностно-активного вещества).

Следует отдельно отметить научную новизну и практическую значимость работы. Как отмечается самим автором, комплементарное исследование растворов методами малоугловой дифракции и компьютерных модельных подходов может проводиться в настоящее время для широкого круга систем. Это связано с развитием вычислительных мощностей современных компьютеров и эффективных технологий распараллеливания расчетов. В представленной работе указанный подход впервые применен к растворам анизотропных монокарбоновых кислот, а использование растворителей с различными размерами молекул позволило сделать ряд критически важных выводов. В частности, были продемонстрированы существенная неоднородность сольватной оболочки декалина и некорректность использования приближения Гинье для структурной интерпретации данных рассеяния. Также в работе впервые была построена МД модель декалина, детально описывающая его молекулярную структуру и плотностные свойства, и модель рассеивающей частицы для анализа данных МУРН насыщенных кислот в бензоле и

декалине, учитывающая особенности упорядочения растворителя на границе раздела с молекулами кислот, их димеризацию и транс-гош изомерию. В работе изучено поведение предельных парциальных молярных объемов молекул кислот в растворах по данным метода МД моделирования при замене растворителя (бензола на декалин). Также диссертантом установлена связь между значениями предельных концентраций начала агрегации кислот в изученных растворителях со свойствами их сольватных оболочек. Разработанные Ереминым Романом Александровичем подходы и методы оценки влияния упорядочения растворителя на границе раздела с растворенным веществом на данные МУРН представляют большую практическую значимость в том числе и для Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ в силу возможности их использования при интерпретации данных, полученных на малоугловом дифрактометре ЮМО на базе реактора ИБР-2.

Материал автореферата представлен на 23 страницах, написан ясным научным языком и содержит 7 рисунков и 3 таблицы. Структура автореферата включает общую характеристику диссертационной работы, краткое изложение ее содержания, а также списки цитированных в автореферате источников и основных публикаций по теме диссертации. Выводы по работе и положения, выносимые на защиту, сформулированы четко и однозначно. Пропущенных обозначений, не введенных сокращений или некорректных ссылок при ознакомлении с авторефератом не обнаружено.

По теме диссертации опубликовано 18 печатных работ, 5 из которых в изданиях, входящих в списки Высшей аттестационной комиссии (для российских изданий), а также системы цитирования Scopus (для переводных версий российских и иностранных изданий).

Замечаний по представленному автореферату диссертации Романа Александровича не имею.

Работа Р.А. Еремина полностью соответствует требованиям Высшей аттестационной комиссии, предъявляемым к кандидатским диссертациям, представленным в Разделе II «Положения о порядке присуждения ученых степеней», а сам диссертант достоин присуждения искомой степени кандидата физико-математических наук. Материал диссертации полностью соответствует специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния в области исследований «Теоретическое и экспериментальное исследование физических свойств неупорядоченных неорганических и органических систем, включая классические и квантовые жидкости, стекла различной природы и дисперсные системы».

И. о. проректора по научно-исследовательской работе  
ФГБОУ «Самарский государственный университет»,  
доктор физико-математических наук,  
профессор кафедры общей и теоретической физики

Подпись А.Ф. Крутова заверяю *специалист*

*Коновалова*

*Крутов*  
А.Ф. Крутов

27 февраля 2015 г.

