

## ОТЗЫВ НАУЧНЫХ РУКОВОДИТЕЛЕЙ

на диссертацию Еремина Романа Александровича на тему «**Молекулярно-динамическое моделирование в анализе малоуглового рассеяния нейтронов органическими растворами**», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Роман Александрович Еремин начал свою работу в Лаборатории нейтронной физики имени И.М. Франка Объединенного института ядерных исследований (ЛНФ ОИЯИ) в 2010 году при выполнении дипломной работы. После ее защиты в Самарском государственном университете (физический факультет, кафедра общей и теоретической физики) в 2011 году он был зачислен в очную аспирантуру Учебно-научного центра ОИЯИ по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния, где проходил обучение до сентября 2014 года. За указанный период им были в полном объеме усвоены дисциплины, предусмотренные программой послевузовской подготовки, а также сданы все необходимые экзамены кандидатского минимума. Развиваемая диссертантом тематика является в настоящее время актуальным направлением в исследовании и развитии методов малоугловой дифракции, позволяющих изучать микроструктуру очень широкого класса систем. Важной особенностью работы диссертанта является и вопрос повышения эффективности использования современных вычислительных мощностей в моделировании и интерпретации экспериментальных данных, в том числе с применением методов компьютерного молекулярно-динамического (МД) моделирования, Монте-Карло и *ab initio* расчетов.

На начальных этапах работы по теме диссертации Р.А. Еремин в короткие сроки освоил программный пакет МД расчетов DL\_POLY версии 2 на уровне необходимом для решения поставленных перед ним задач по исследованиям стереоизомерных эффектов для растворителя декалина. По результатам проведенного исследования диссертантом был предложен метод уточнения параметров межмолекулярного взаимодействия в изучаемых системах. При использовании последнего с привлечением предшествующих (литературных) экспериментальных данных была построена полноатомная МД модель декалина, детально описывающая его плотностные свойства, после чего диссертант провел серию успешных модельных расчетов для растворов монокарбоновых (миристиновой, стеариновой и олеиновой) кислот в названном растворителе.

Другая часть работы Романа Александровича была посвящена интерпретации данных малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН) органическими растворами монокарбоновых кислот в дейтерированных бензоле и декалине. Р.А. Ереминым была решена задача построения микроскопической модели рассеивающей частицы для интерпретации спектров МУРН с учетом набора характерных для растворов жирных кислот структурных особенностей. К последним можно отнести: 1) образование сольватационного слоя вокруг молекул кислот, изученное по результатам МД расчетов; 2) димеризацию молекул кислот, уровень которой определен по данным инфракрасной спектроскопии, использованной диссертантом в качестве дополняющей экспериментальной методики; и 3) конформационную подвижность алкильных радикалов (т.н. транс-гош изомерию). В ходе работы было продемонстрировано, что используемое



до настоящего времени при интерпретации спектров МУРН приближение Гинье, вследствие неоднородности рассеивающей плотности на границе раздела кислота – растворитель, может применяться к изучаемым системам с существенными ограничениями и, в частности, для растворов кислот в декалине приводит к некорректным результатам.

Следует отметить, что, кроме методического интереса, понимание процессов сольватации и особенностей взаимодействия кислота – растворитель актуально и с практической точки зрения, принимая во внимание развитие синтеза материалов с заранее заданными свойствами. Изучаемые кислоты часто используются при стабилизации жидких коллоидных систем (например, феррожидкостей), где они играют роль поверхностно-активных веществ (стабилизирующих агентов). Ранее было экспериментально подтверждено, что различные кислоты имеют различную стабилизационную активность. Естественным образом свойства растворителей оказывают существенное влияние на микроструктуру коллоидных систем и, как следствие, их макроскопические свойства. Так, в диссертации Р.А. Еремина на основе модельных расчетов предсказано существенное влияние размера молекул растворителя на лиофильные свойства растворенных насыщенных кислот (взаимодействие кислота–растворитель), что подтвердилось в экспериментальном исследовании методом МУРН жидкокристаллической агрегации монокарбоновых кислот в концентрированных растворах.

За время работы Роман Александрович показал себя квалифицированным специалистом, овладевшим предметом исследования и обладающим необходимыми навыками проведения компьютерных вычислений и экспериментов, а также работы с литературными данными по теме проводимого исследования. Стоит отметить, что работа диссертанта на всех этапах ее выполнения рассматривалась в контексте результатов экспериментальных и теоретических исследований аналогичных систем, что является наиболее важным аспектом современного использования всей совокупности модельных подходов. С набором поставленных задач диссертант справился в полном объеме. Диссертация Р.А.Еремина представляет собой законченную квалификационную работу, полностью соответствующую требованиям, предъявляемым к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата наук. Содержание и значимость работы Еремина Романа Александровича позволяют считать автора достойным присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Научные руководители:

Ведущий научный сотрудник ЛНФ ОИЯИ,  
доктор физико-математических наук, профессор

Х.Т.Холмуродов

Начальник сектора ЛНФ ОИЯИ,  
доктор физико-математических наук

М.В.Авдеев

Подписи Х.Т.Холмуродова и М.В.Авдеева заверяю,  
ученый секретарь ЛНФ ОИЯИ

И.И.Зиньковская

