

## ОТЗЫВ

официального оппонента заведующего отделом компьютерной теплофизики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный институт высоких температур РАН (ОИВТ РАН) д.ф.-м.н., доцента Стегайлова Владимира Владимировича (125412, г. Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2, тел. 8-(495)-485-85-45, stegailov@ihed.ras.ru) на диссертационную работу Еремина Романа Александровича **«Молекулярно-динамическое моделирование в анализе данных малоуглового рассеяния нейтронов органическими растворами»**, представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Процессы сольватации и упорядочения растворителя (или его компонентов) на границе раздела с растворенным веществом определяют взаимодействие «растворенное вещество – растворитель» и представляют интерес для растворов (водных и водно-солевых) белковых структур, молекул поверхностно-активных веществ (ПАВ) (в неполярных и полярных растворителях), наночастиц и других объектов. Эффекты влияния этих процессов на малоугловое рассеяние нейтронов (МУРН) и рентгеновского излучения (МУРР) при экспериментальном изучении указанных систем, очевидно, могут эффективно изучаться на атомистическом уровне методами компьютерного моделирования и, в частности, молекулярной динамики (МД).

Рассмотренные в диссертационной работе растворы монокарбоновых (жирных) кислот в органических растворителях активно изучаются методами МУРН и представляют интерес благодаря возможности их практического использования при приготовлении магнитных жидкостей и других стабилизированных коллоидных систем, где молекулы кислот играют роль стабилизирующего агента (ПАВ). Особенности взаимодействия «кислота – растворитель» для них определяет ряд микроструктурных особенностей коллоидов и, как следствие, их макроскопических свойств. Возможность изучения влияния сольватации на данные рассеяния и последующий их учет в структурной интерпретации данных рассеяния в рамках комплементарного МД/МУРН подхода обуславливает актуальность исследования, выполненного в рамках диссертационной работы Еремина Романа Александровича.

Диссертационная работа содержит значительное количество новых результатов. Данные МД расчетов для органических растворов кислот проанализированы в смысле пространственных распределений плотности длины рассеяния (ПДР) нейтронов, и доказано существенное влияние сольватных оболочек на результаты МУРН исследованными растворами, учет которых необходим для корректной структурной интерпретации данных рассеяния. Впервые с учетом набора эффектов для органических растворов монокарбоновых кислот (димеризации, транс/гош изомерии и сольватной оболочки) построена микроскопическая модель рассеивающей частицы. На основании сравнительного анализа данных МУРН экспериментов для двух типов растворителей демонстрируется ограниченная применимость, используемого ранее для анализа рассеяния растворами малых молекул, приближения Гинье. Различия в свойствах сольватных оболочек для бензола и декалина, обнаруженные с использованием построенной в работе модели при обработке экспериментальных данных МУРН разбавленными растворами, оказывают влияние на процессы агрегации молекул кислот в растворах при повышении содержания кислоты, что подтверждается доложенными в рамках диссертации экспериментами по МУРН в растворах в декалине.

Значительное место в диссертационном исследовании занимают вопросы обоснованности и достоверности результатов. Данные вопросы рассматриваются как на стадии разработки МД модели и определения ее параметров, так и на стадии сравнения результатов расчетов с экспериментом. Обоснованность и достоверность изложенных результатов не вызывает сомнений.

Результаты проведенного исследования имеют как методологическое, так и практическое значение. Установленная связь параметров сольватных оболочек бензола и декалина с критическими концентрациями начала агрегации в растворах монокарбоновых кислот может быть использована в дальнейшем при изучении кинетики этих процессов и поиска пары «растворенное вещество – растворитель» с необходимым (минимальным или максимальным) значением концентрации начала агрегации, а также при синтезе стабилизированных коллоидных систем с заранее заданными свойствами.

Особенным достоинством диссертационной работы является наличие в ней не только теоретико-вычислительных, но и новых экспериментальных результатов, полученных при непосредственном участии диссертанта.

Диссертация включает введение, обзор литературы, описание методов и объектов исследования, представление собственных результатов диссертанта (разделенное на две

главы), результаты и выводы, список сокращений, список опубликованных по теме диссертации работ и библиографический список. Материал изложен на 157 страницах машинописного текста в строгом диссертационном стиле с незначительным числом опечаток. Библиографический список содержит 115 источников.

Тем не менее необходимо отменить несколько замечаний по содержанию работы:

1. Вызывает удивление использование приближения жестких молекул при описании растворителя в рамках метода МД. Если жесткая структура молекулы кислоты может быть обоснована удобством анализа результатов, то в отношении молекул растворителя этот выбор представляется необоснованным.

2. Значительные усилия приложены в работе для определения параметров межатомного потенциала, хорошо соответствующих свойствам растворителя. При этом на стр. 90 говорится, что «предложенный подход ... качественно восстанавливает термодинамические свойства реального растворителя». С этим утверждением нельзя согласиться, так как, фактически, проводилась проверка только согласия по плотности. Не были рассмотрены, например, теплоемкость или сжимаемость. Более того, используемое приближение жесткой структуры молекул (исключение внутренних степеней свободы молекул) неизбежно должно негативно повлиять на термодинамические свойства модели.

3. Несколько более частных замечаний:

На стр. 50 не точно сформулировано математическое соотношение расчета сил, действующих на атомы.

На стр. 53 условие на радиус обрезки потенциала, видимо, должно быть  $2R_{\text{cut}} < L_{\text{min}}$  (пропущена двойка).

На стр. 58 используется словосочетание «термодинамическая траектория», смысл которого не понятен.

На стр. 58 указано, что «интегралом движения при этом является свободная энергия Гельмгольца». Данное утверждение неверно и нуждается в корректировке или пояснении. Аналогичное замечание относится к уравнению (2.10) на стр. 60.

На стр. 87 говорится, что «была поставлена задача уточнения параметров потенциала Леннарда-Джонса». Однако в тексте не поясняется, откуда брался первоначальный набор параметров.

Сделанные замечания не умаляют значения полученных результатов и не снижают высокого научного уровня диссертации. По материалам диссертации опубликовано 18 работ, 5 из которых в изданиях, удовлетворяющих требованиям, предъявленным Высшей аттестационной комиссией. Работа апробирована диссертантом в ходе российских и международных научных школ и конференций. Автореферат соответствует диссертации и отражает содержание работы достаточно полно.

Диссертация Еремина Романа Александровича **«Молекулярно-динамическое моделирование в анализе данных малоуглового рассеяния нейтронов органическими растворами»** полностью отвечает требованиям Раздела II «Положения о порядке присуждения ученых степеней», предъявляемых к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата наук, а сам диссертант, безусловно, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния.

Заведующий отделом компьютерной теплофизики ОИВТ РАН,  
доктор физико-математических наук, доцент

/В. В. Стегайлов/

Подпись В. В. Стегайлова удостоверяю  
Ученый секретарь ОИВТ РАН,

доктор физико-математических наук

/Р. Х. Амиров/

Дата: 27 февраля 2015 г.



Адрес института: 125412, г. Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2,

<http://www.jiht.ru/> ,

Телефон служ.: 8-(495)-485-85-45,

E-mail: stegailov@ihed.ras.ru