

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 720.001.06**  
**НА БАЗЕ ОБЪЕДИНЁННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ**  
**ИССЛЕДОВАНИЙ (МЕЖДУНАРОДНАЯ МЕЖПРАВИТЕЛЬСТВЕННАЯ**  
**ОРГАНИЗАЦИЯ)**  
**ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЁНОЙ СТЕПЕНИ**  
**КАНДИДАТА ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИХ НАУК**

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 20 марта 2015 г. № 234

о присуждении **Еремину Роману Александровичу** ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Молекулярно-динамическое моделирование в анализе малоуглового рассеяния нейтронов органическими растворами» в виде рукописи по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния принята к защите 5 декабря 2014 года, протокол №232 диссертационным советом Д 720.001.06 на базе международной межправительственной организации Объединённый институт ядерных исследований, 141980, г. Дубна Московской обл., ул. Жолио-Кюри, д. 6, созданного приказом №1902-1333 от 10.10.2008 и приказом №105/НК от 11.04.2012.

Соискатель Еремин Роман Александрович 1989 года рождения, в 2011 году соискатель окончил Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования Самарский государственный университет (443011, г. Самара, ул. Ак. Павлова, д. 1). Соискатель окончил аспирантуру Учебно-научного центра Объединённого института ядерных исследований в 2014 году и в настоящее время работает в должности младшего научного сотрудника Научно-экспериментального отдела нейтронных исследований конденсированных сред Лаборатории нейтронной физики имени И.М. Франка, в период подготовки диссертации - аспирант Объединённого института

ядерных исследований (141980, г. Дубна Московской обл., ул. Жолио-Кюри, д. 6).

Диссертация выполнена в Лаборатории нейтронной физики имени И.М. Франка в Международной межправительственной организации Объединенный институт ядерных исследований (141980, г. Дубна Московской обл., ул. Жолио-Кюри, д. 6.).

Научные руководители – Холмуродов Холмирзо Тагойкулович, доктор физико-математических наук, профессор, начальник сектора компьютерного молекулярного моделирования, Лаборатории радиационной биологии Объединенного института ядерных исследований Авдеев Михаил Васильевич, доктор физико-математических наук, начальник сектора нейтронной оптики Научно-экспериментального отдела нейтронных исследований конденсированных сред Лаборатории нейтронной физики имени И.М. Франка Объединенного института ядерных исследований.

Официальные оппоненты: Стегайлов Владимир Владимирович, доктор физико-математических наук, доцент, заведующий отделом компьютерной теплофизики, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук; и Лебедев Василий Тимофеевич, доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией нейтронных исследований физико-химических исследований, ведущий научный сотрудник, Федеральное государственное бюджетное учреждение Петербургский институт ядерной физики имени Б.П. Константинова, НИЦ Курчатовский институт, дали положительные отзывы о диссертации.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт кристаллографии имени А.В. Шубникова Российской академии наук, г. Москва в своём положительном заключении (заключение подготовил Волков Владимир Владимирович, доктор химических наук, ведущий научный сотрудник) подписанным и. о. директора института, доктором физ-мат наук, профессором Каневским В.М. указала, что диссертация

Р. А. Еремина посвящена изучению структурного состояния монокарбоновых кислот в органических растворителях методами малоуглового рассеяния нейтронов и молекулярно-динамического моделирования. Актуальность работы обусловлена необходимостью детального изучения особенностей взаимодействия растворенных молекул и наночастиц с молекулами растворителя, так как такие взаимодействия существенно влияют на конечную структуру синтезируемых из раствора систем. Работы такого сорта должны быть неотъемлемой частью любого исследования по созданию новых функциональных материалов. Сложность исследования, обусловленная необходимостью изучения структур, в условиях, близких к естественным, диктует необходимость привлечения не только взаимодополняющих физико-химических методов, разработки новых методических подходов, но и методов компьютерного моделирования строения самоорганизующихся молекулярных систем. Все эти моменты нашли отражение в данной диссертационной работе. Примененная в работе методология исследований позволила автору определить структурные параметры как самих растворенных молекул, так и их сольватного окружения. Автором впервые предложена микроструктурная модель описания данных малоуглового нейтронного рассеяния для растворов монокарбоновых кислот в органических растворителях и развит комплексный подход на основе совместного использования ИК спектроскопии, рассеяния и компьютерного моделирования.

Соискатель имеет 18 опубликованных работ по теме диссертации, из которых 3 статьи в научных журналах и изданиях, которые включены в перечень российских рецензируемых научных журналов и изданий для опубликования основных научных результатов диссертаций, имеющих переводные версии; 2 работы (статья и глава в книге) в зарубежных научных изданиях, цитируемых базой данных Scopus; 1 публикация в журнале свободного доступа; 1 препринт; 11 работ опубликовано в материалах всероссийских и международных конференций и симпозиумов.

Наиболее значимые научные работы по теме диссертации (в скобках указаны выходные данные переводных версий):

1. **Eremin R.**, Kholmurodov Kh., Avdeev M., Petrenko V., Yasuoka K. Molecular Dynamics Simulations on *trans*-and *cis*-Decalins: The Effect of Partial Atomic Charges and Adjustment of "Real Densities" //International Journal of Chemistry. – 2012. – Т. 4. – №. 1. – С. 14-23.
2. **Еремин Р. А.**, Холмуродов Х. Т., Петренко В. И., Авдеев М. В. Расчет объемных свойств декалинов и жирных кислот в декалине по данным молекулярно-динамического моделирования //Журнал физической химии. – 2013. – Т. 87. – №. 5. – С. 759-756. (**Eremin R. A.**, Kholmurodov Kh. T., Petrenko V. I., Avdeev M. V. Calculating the bulk properties of decalins and fatty acids in decalin according to data from molecular dynamics simulation //Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2013. – Т. 87. – №. 5. – С. 745-751.)
3. **Eremin R. A.**, Kholmurodov Kh. T., Petrenko V. I., Rosta L., Avdeev M. V. Effect of the solute-solvent interface on small-angle neutron scattering from organic solutions of short alkyl chain molecules as revealed by molecular dynamics simulation //Journal of Applied Crystallography. – 2013. – Т. 46. – №. 2. – С. 372-378.
4. **Еремин Р. А.**, Холмуродов Х. Т., Петренко В. И., Авдеев М. В. Молекулярно-динамическое моделирование взаимодействия растворителя с растворенным веществом в неполярных растворах олеиновой кислоты //Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2013. – №. 12. – С. 15-20. (**Eremin R. A.**, Kholmurodov Kh. T., Petrenko V. I., Avdeev M. V. Solute-solvent interaction in nonpolar solutions of oleic acid as revealed by molecular dynamics simulation //Journal of Surface Investigation. X-ray, Synchrotron and Neutron Techniques. – 2013. – Т. 7. – №. 6. – С. 1128-1132.)
5. **Еремин Р. А.**, Холмуродов Х. Т., Петренко В. И., Rosta L., Авдеев М. В. Анализ малоуглового рассеяния нейтронов раствором стеариновой

кислоты в бензоле с использованием молекулярно-динамического моделирования //Физика твердого тела. – 2014. – Т. 56. – №. 1 – С. 86-89. (Eremin R. A., Kholmurodov Kh. T., Petrenko V. I., Rosta L., Avdeev M. V. Molecular dynamics simulation analysis of small-angle neutron scattering by a solution of stearic acid in benzene //Physics of the Solid State. – 2014. – Т. 56. – №. 1. – С. 81-85.)

6. **Eremin R. A.**, Kholmurodov Kh. T., Petrenko V. I., Rosta L., Avdeev M. V. Chapter 10. Molecular Dynamics Simulation for Small-Angle Neutron Scattering: Scattering Length Density Spatial Distributions for Mono-carboxylic Acids in d-Decalin – С. 139-154. Глава в Kholmurodov Kh. T. (Editor) *Models in bioscience and materials research: molecular dynamics and related techniques*. New York: Nova Science Publishers, 2013. – 219 С.
7. **Еремин Р. А.**, Холмуродов Х. Т., Петренко В. И., Авдеев М. В. Молекулярно-динамическое моделирование растворов монокарбоновых кислот в декалине //Препринт ОИЯИ Р17-2012-23. – 2012. – С. 1-14.

На автореферат диссертации поступил отзыв от Крутова Александра Федоровича, доктора физико-математических наук, профессора, и.о. проректора по научно-исследовательской работе, Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего профессионального образования Самарский государственный университет. Отзыв положительный и не содержит замечаний по автореферату.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается необходимостью оценки диссертации, посвящённой как, разработке экспериментальной методики, проведению многочисленных прецизионных экспериментов, обработке значительных объёмов информации, так и глубокому анализу полученных данных методами компьютерного моделирования. Официальные оппоненты пользуются высоким авторитетом среди специалистов в физике конденсированного состояния вещества, продолжают активно работать в своих областях, имеют многочисленные публикации в ведущих научных изданиях. Ведущая организация – Институт кристаллографии

имени А.В. Шубникова Российской академии наук широко известен современной экспериментальной базой и развитием исследований в области физики конденсированного состояния. Подробные справки об оппонентах и ведущей организации размещены на сайте ОИЯИ [http://www.info.jinr.ru/announce\\_disser.htm](http://www.info.jinr.ru/announce_disser.htm)

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований разработан подход к структурному анализу данных малоуглового рассеяния нейтронов органическими растворами монокарбоновых кислот с использованием данных метода молекулярно-динамического моделирования, а также выявлена связь закономерностей агрегации жирных кислот в растворах в бензоле и декалине со структурными свойствами этих растворителей.

Диссертантом предложена полноатомная молекулярно-динамическая модель растворителя (декалина), детально описывающая его плотностные свойства с учетом стереоизомерного эффекта, а также модель рассеивающей частицы для анализа экспериментальных данных малоуглового рассеяния нейтронов растворами кислот. Последняя учитывает ряд структурных особенностей систем исследования, а именно, свойства сольватной оболочки (по данным молекулярной динамики), эффекты димеризации кислот (по данным инфракрасной спектроскопии, используемой в работе в качестве дополняющей экспериментальной методики) и транс/гош изомерии алкильных радикалов в составе молекул кислот.

С использованием построенной в ходе работы модели были определены эффективные конформации молекул кислот в растворах в органических растворителях и механизм влияния упорядочения растворителя на границе раздела с растворенным веществом на значения пороговых концентраций начала агрегации кислот в растворах. Так, для растворителя с большим размером молекулы (декалин) обнаружено увеличение объема недоступного растворителю, что согласуется с исследованными в работе значениями предельных парциальных молярных объемов молекул кислот.

В результате работы и на основании сравнительного анализа экспериментальных данных для растворов в бензоле и декалине была наглядно продемонстрирована ограниченная применимость однородного приближения Гинье и моделей простых форм в анализе экспериментальных данных рассеяния, используемого до настоящего момента при изучении растворов малых частиц методами малоугловой дифракции.

Полученные экспериментальные и теоретические знания о специфике упорядочения растворителя на границе раздела с растворенным веществом, а также развитый подход использования данных МД моделирования при анализе МУРН могут быть использованы при структурных исследованиях методами малоугловой дифракции, когда в процессе интерпретации данных рассеяния применение однородного приближения не может быть строго обосновано или приводит к некорректным результатам аппроксимаций.

Помимо методологического аспекта растворы монокарбоновых кислот представляют интерес при синтезе магнитных жидкостей и других стабилизированных коллоидных систем, а исследованные бензол и декалин являются широко используемыми на практике органическими растворителями. Детальное понимание совокупности эффектов, влияющих на малоуглового рассеяния нейтронов исследуемыми системами, и их учет при интерпретации данных рассеяния является существенным шагом в изучении особенностей взаимодействий поверхностно-активное вещество (ПАВ) – растворитель и ПАВ – ПАВ и расширения возможностей создания коллоидных систем с заранее заданными свойствами.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что эксперименты проводились на оборудовании, которое мировым сообществом исследователей признаётся как эталонное. В диссертационной работе применялись принципиально различающиеся, взаимодополняющие методы получения данных, которые показали согласующиеся результаты. Многие результаты были воспроизведены в независимых исследованиях. Результаты работы опубликованы в ведущих отечественных и зарубежных журналах,

входящих в список ВАК, докладывались на национальных и международных конференциях, хорошо известны специалистам в данной отрасли.

Личный вклад соискателя состоит в его непосредственном участии в получении и анализе экспериментальных данных, представленных в диссертации, организации расчетов в рамках метода молекулярно-динамического моделирования и обработке их результатов с последующим использованием в структурной интерпретации данных малоуглового рассеяния нейтронов, а также выполненных при определяющем вкладе диссертанта основных публикаций по работе.

Диссертация охватывает основные вопросы поставленной научной задачи и соответствует критериям внутреннего единства, что подтверждается выбором взаимодополняющих непротиворечивых методик исследования. Выводы, сделанные в диссертации, концептуально взаимосвязаны.

На заседании 20 марта 2015 года диссертационный совет принял решение присудить Еремину Р.А. учёную степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 20 человек, из них 7 докторов наук по профилю рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 25 человек, входящих в состав совета, проголосовали: за присуждение ученой степени 20, против присуждения ученой степени - нет, недействительных бюллетеней нет.

Зам. председателя диссертационного совета,  
чл.-корр. РАН

В.Л. Аксенов

Ученый секретарь диссертационного совета

А.Г. Попеко