

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

на выпускную квалификационную работу **Нестеровой Ольги Сергеевны** «Структура нитратов этил-, пропил- и бутиламмония по данным метода молекулярной динамики», представленную на соискание степени бакалавра по специальности «Прикладные физика и математика».

Основной целью работы О.С. Нестеровой являлось выявление влияния числа метиленовых групп на особенности микроструктуры нитратов этил-, пропил- и бутиламмония. Данная информация была бы крайне полезна как для интерпретации имеющихся экспериментальных данных, так и для углубления наших знаний о природе ионных жидкостей.

Перед студенткой была поставлена задача, ознакомиться с методом компьютерного моделирования молекулярной динамики, провести моделирование трех ионных жидкостей: нитратов этил-, пропил- и бутиламмония, отличающихся числом метиленовых групп в составе катиона, и также детально проанализировать полученную фазовую траекторию. О.С. Нестерова успешно справилась с поставленной задачей. В ходе исследования она проявила трудолюбие, аккуратность и интерес к работе. Полученные ей новые данные позволили детально описать изменения в структуре рассмотренных ионных жидкостей при изменении числа метиленовых групп в составе катиона.

Считаю, что работа О.С. Нестеровой отвечает всем требованиям, предъявляемым к выпускным квалификационным работам, представляемым на соискание академической степени бакалавра по специальности «Прикладные физика и математика», а О.С. Нестерова заслуживает присвоения степени бакалавра по указанной специальности.

Доцент, канд. физ.-мат. наук



А. В. Егоров

30.05.2017

Санкт-Петербург