

ОТЗЫВ
на выпускную квалификационную работу
Нестеровой Ольги Сергеевны
«Структура нитратов этил-, пропил- и бутиламмония
по данным метода молекулярной динамики»

Хотя ионные жидкости известны уже более ста лет (например, свойства нитрата этиламмония были описаны еще в 1914 году), мощный всплеск интереса к подобным системам пришелся на начало 2000-х годов, и даже по прошествии полутора десятков лет ионные жидкости по-прежнему привлекают к себе пристальное внимание исследователей. Рецензируемая работа посвящена изучению структуры трех нитратов алкиламмония, относящихся к классу протонных ионных жидкостей. Содержание работы полностью соответствует заявленной теме, а ее структура естественным образом определяется поставленными задачами. Для решения поставленных задач используется компьютерное моделирование методом молекулярной динамики. Выбранный метод и используемая методика моделирования обеспечивают возможность получения необходимой информации о свойствах исследуемых систем, что и подтверждается результатами работы.

Полученные в работе данные обеспечивают детальное описание структуры исследуемых систем с помощью набора функций распределения. В дополнение к этому автором была выполнена оценка скорости переориентации аниона, что добавило к описанию структуры жидкости еще и динамическое измерение. С моей точки зрения, еще одним вполне естественным шагом могло бы стать изучение подвижности ионов, что, вероятно, даже не потребовало бы дополнительных расчетов, хотя и вышло бы за рамки заявленной темы работы. В целом, описание результатов не вызывает существенных вопросов и замечаний, а сделанные в работы выводы представляются вполне обоснованными и непротиворечивыми.

Тем не менее, рецензируемая работа не лишена недостатков. Так, единственная попытка увязать полученные данные с результатами других исследований была предпринята на стр. 12, где обсуждается расчетная плотность нитрата этиламмония (для других солей аналогичное сравнение не проводилось). Весь остальной массив полученных данных описывается достаточно подробно, однако абсолютно никак не сравнивается с результатами экспериментальных и, что было бы даже более актуально, расчетных работ. По моему мнению, это является следствием недостаточно внимательного отношения к изучению современного состояния исследований в данной области. Приходится констатировать, что подбор литературных источников для введения и обзора литературы носит довольно случайный характер. С одной стороны, отсутствуют ссылки на достаточно полные и авторитетные обзорные работы по теме ВКР (например, [Chem.Rev. 108, 206 (2008)] или только что опубликованный обзор [Chem.Rev. 117, 6636 (2017)]), которых было бы естественно ожидать в обзоре литературы. С другой стороны, почему-то упомянуто всего три работы, посвященных компьютерному моделированию протонных ионных жидкостей, причем ссылка на одну из них ([16]) дана с ошибкой (указан неправильный журнал). Даже с учетом заявленной «краткости» (стр.5), подобный подход к построению обзора литературы не позволил автору получить достаточно полное представление о состоянии данной области и полноценно вписать полученные интересные результаты в контекст современных исследований протонных ионных жидкостей. Уверен,

что детальное сравнение результатов выполненного автором молекулярно-динамического моделирования с имеющимися в литературе данными позволило бы сразу вывести работу на качественно иной уровень.

Рецензируемая работа читается легко, поскольку изложена вполне доступным языком и адекватно проиллюстрирована. Есть ряд недочетов в представлении графического материала, которые, однако, не являются критичными. Замечания по оформлению можно высказать и по отношению к данным в приложениях, которые, на мой взгляд, представлены неоптимальным образом и воспринимаются с некоторым трудом (особенно табл. 10-12).

Несмотря на высказанные замечания, работа Нестеровой О.С. в целом производит благоприятное впечатление и заслуживает оценки «ХОРОШО».



кандидат химических наук,
доцент Института химии СПбГУ

Сизов Владимир Викторович