

РЕЦЕНЗИЯ

на выпускную квалификационную работу
студента физического факультета СПбГУ
Бешанова Всеволода Витальевича

«Влияние вида модельных потенциалов на модельную структуру протонных ионных жидкостей на основе солей аммония по данным метода молекулярной динамики»

Задачей выпускной квалификационной работы Бешанова Всеволода Витальевича являлось исследование влияния вида модельных потенциалов для нитрат-аниона на микроструктуру и молекулярную подвижность трёх протонных ионных жидкостей (ИЖ): нитратов этил-, пропи- и бутиламмония. Для решения поставленной задачи автором было проведено моделирование указанных ИЖ методом молекулярной динамики с использованием программного пакета MDynaMix. Изучение свойств рассмотренных автором ионных жидкостей является актуальной научной проблемой.

Работа В.В.Бешанова состоит из введения, трех глав, заключения, списка литературы из 14 наименований и приложения. Структура ВКР представляется обоснованной задачами исследования. Во введении ставится задача исследования, обосновывается актуальность и практическая значимость научной проблемы. В первом разделе приведен литературный обзор по тематике работы. Материал изложен последовательно, при этом В.В.Бешанов ссылается на современные статьи. Во втором разделе приведено описание объектов исследования и методики моделирования. В третьем разделе проанализированы полученные в работе результаты, а также проведено их сопоставление с результатами экспериментальных работ других авторов. Содержание ВКР В.В.Бешанова соответствует заявленной в названии теме, при этом тема, заявленная в названии, полностью раскрыта. ВКР В.В.Бешанова достаточно хорошо оформлена, доступна читателям с точки зрения языка, стиля, расположения материала и наглядности рисунков. Тем не менее, в процессе чтения ВКР В.В.Бешанова у меня возник ряд вопросов и замечаний:

1. В тексте ВКР в начале абзацев отсутствуют отступы.
2. На стр. 7 сказано: «Потенциальные параметры для катионов этил-аммония, пропи-аммония и бутил-аммония были взяты из работ [2, 3, 8]». Тут было бы уместно написать, каким силовым полям эти потенциалы соответствуют.
3. Стр. 7. На рис. 4 можно было бы привести обозначения атомов.
4. Стр.9. «Перед непосредственным моделированием каждая система уравнивалась 300 пс. Время самого же моделирования составило 2 нс». Представляется, что молекулярно-динамическая траектория длиной 2 наносекунды может оказаться недостаточной.
5. Стр. 9. В формуле (1) не указано, к чему стремится t .
6. Стр. 12. «Для целей, поставленных перед данной работой, детальный количественный анализ всех представленных ФРП представляется излишним». Зачем тогда эти радиальные функции распределения приведены в работе?

7. Вместо символа Å, обозначающего ангстрем, в нескольких местах встречается латинская буква A (см. стр. 13).

8. Стр.13. Представленные на рис. 6 радиальные функции распределения имеют многочисленные максимумы. Все ли эти максимумы имеют физический смысл или часть из них может исчезнуть, если взять более длинную молекулярно-динамическую траекторию?

9. Два рисунка обозначены одним и тем же номером — 6.

10. Стр.15. В Таблице 3 отсутствуют погрешности для полученных коэффициентов самодиффузии. Зависимость среднеквадратичного смещения иона от времени (см. рис.6) приведена для слишком короткого интервала времен (от нуля до 100 фс). Останется ли прежним значение коэффициента диффузии, если расширить этот диапазон? Вывод, сделанный автором на стр.14, что «модельной траектории длительностью 2 нс недостаточно для вычисления коэффициентов самодиффузии компонентов протонных ИЖ на основе нитратов алкиламмония», требует дополнительного обсуждения.

11. На стр. 17. сказано, что «вращательная переориентация нитрат-аниона может быть описана в рамках двухэкспоненциальной модели и двух характерных времен переориентации: “быстрой” (порядка 10-15 пс) и “медленной” (от приблизительно 100 пс до нескольких наносекунд)». Получается, что характерное время «медленной» переориентации превышает время моделирования.

Несмотря на перечисленные вопросы и замечания, ВКР Бешанова Всеволода Витальевича, в целом, производит благоприятное впечатление, работа соответствует требованиям, предъявляемым к выпускным квалификационным работам, а ее автор заслуживает оценки «хорошо» и присуждения ему степени бакалавра.

« 7 » июня 2018 г.


Подпись

к.ф.-м.н., Волков Н.А.
ФИО