

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ

на выпускную квалификационную работу **Мацидон Марии Викторовны** «Изучение влияния изотопного замещения дейтерий-водород на подвижность молекул воды методом молекулярной динамики», представленную на соискание академической степени бакалавра по направлению обучения «Прикладные математика и физика».

Основной целью работы М.В. Мацидон являлось развитие методологии моделирования эффектов изотопного замещения дейтерий-водород в молекулах воды в рамках метода молекулярной динамики. Несмотря на то, что в научной литературе предложено уже около двухсот различных моделей молекулы воды, вопрос описания эффектов изотопного замещения в широком диапазоне внешних условий еще не нашел окончательного решения.

Перед студенткой была поставлена задача, ознакомиться с методом молекулярной динамики, а также методиками обработки и анализа получаемых фазовых траекторий, провести моделирование обычной и тяжелой воды в диапазоне температур от -30 до 110°C с использованием трех различных моделей молекулы воды (SPC/E, SPC-F и TIP5P), а затем детально проанализировать полученные результаты. М.В. Мацидон успешно справилась с поставленной задачей. В ходе работы она проявила трудолюбие и аккуратность. Полученные ей новые данные не только позволили детально описать влияние изотопного замещения дейтерий-водород на микроструктуру и молекулярную подвижность модельной воды в диапазоне температур от -30 до 110°C , но и дали возможность отобрать модельные представления оптимальные для описания данного эффекта.

Считаю, что работа М.В. Мацидон отвечает всем требованиям, предъявляемым к выпускным квалификационным работам, представляемым на соискание академической степени бакалавра по направлению обучения «Прикладные математика и физика», а М.В. Мацидон заслуживает присвоения степени бакалавра по направлению «Прикладные математика и физика».

Доцент, канд. физ.-мат. наук

А. В. Егоров

05.06.2018

Санкт-Петербург