Отзыв научного руководителя на выпускную работу бакалавра

Новикова Валентина Анатольевича

**Электрические свойства обратных мицелл**

Новиков Валентин рано заинтересовался методами молекулярного моделирования, все более активно применяемыми в химии. Под руководством аспиранта Копаничука Ильи Владимировича на третьем курсе он приступил к теме курсовой работы, посвященной моделированию обратных мицелл. Ему пришлось освоить достаточно сложные алгоритмы молекулярной динамики в применении к многокомпонентным растворам и научиться анализировать полученные результаты. Валентин работал много и увлеченно, а в последнее время и совершенно самостоятельно.

В качестве модели обратной мицеллы была взята анионная мицелла поверхностно активного вещества АОТ в изооктане. Особое внимание уделялось электрическим свойствам мицелл и их зависимости от размера мицеллы и так называемого водного числа, определяемого отношением числа молекул воды к числу молекул ПАВ. В качестве электрических свойств рассчитывались локальный электрический потенциал и локальное электрическое поле относительно центра масс мицеллы в предположении ее сферичности в среднем. Оценки электрического поля показывают, что в поверхностном слое мицелл его интесивность достигает очень высоких значений, что ставит вопрос о необходимости учета возможной диссоциации молекул воды в этой области. Помимо локальных свойств проводились оценки средне-квадратичного дипольного момента мицелл, который дает заметный вклад во взаимодействие мицелл в растворах. Полученные бакалавром данные по электрическим характеристикам обратных мицелл вошли в статью, принятую к публикации в 2019 году в Journal of Molecular Liquids.

Учитывая вышесказанное, я считаю, что выпускная работа бакалавра Новикова Валентина Анатольевича заслуживает отличной оценки.

 /Бродская Е.Н./