**РЕЦЕНЗИЯ**

На выпускную квалификационную работу магистра

специализации «Техническая физика»

Дмитрюка Никиты Александровича

«РОЛЬ ДАЛЬНОДЕЙСТВИЯ ПРИТЯЖЕНИЯ В ДИФФУЗИИ И СПЕКТРАХ ВОЗБУЖДЕНИЙ ПРОСТЫХ ЖИДКОСТЕЙ»

В данной работе объектом исследования были системы частиц, взаимодействующих посредством обобщенного потенциала Леннарда-Джонса с переменной степенью притяжения, с помощью которых выявлялась роль дальнодействия притяжения на фазовые диаграммы, роль в транспортных свойствах и их корреляция со спектрами возбуждений. Для решения данной задачи были смоделированы системы методом молекулярной динамики. Пост обработка проводилась с использованием MATLAB и python.

Представленная на рецензию работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка использованных источников, в общей сложности на 68 листов А4.

В ходе работы были проведены моделирования систем с различным дальнодействием притягивающей ветви потенциала взаимодействия. Рассчитаны фазовые диаграммы систем, а также их транспортные свойства и спектры возбуждений на бинодали жидкость-газ. Предложен новый метод классификации частиц на конденсат, газ и поверхность в системах с фазовым расслоением. На основании полученных результатов, впервые выявлено влияние дальнодействия притяжения в молекулярных системах на фазовые диаграммы, положения тройных и критических точек и корреляции транспортных свойств со спектрами возбуждений на бинодали жидкость-газ. С помощью нового метода классификации частиц, основанного на методе кластеризации DBSCAN (Density-Based Spatial Clustering of Applications with Noise), предложен способ расчета фазовых диаграмм и анализа нуклеации.

К достоинствам данной работы можно отнести большой объем проделанной работы по созданию алгоритмов и обработке множества моделирований, а также существенное усовершенствование уже существующих методов исследования молекулярных систем с разрешением отдельных частиц. Кроме того, в работе присутствует множество качественного и наглядного демонстрационного материала, сопровождающего повествование и результаты.

Выпускная квалификационная работа выполнена в полном объеме, соответствует требованиями ГОСТ, и может быть рекомендована к защите с оценкой «отлично».