

ОТЗЫВ НАУЧНОГО РУКОВОДИТЕЛЯ
на бакалаврскую выпускную квалификационную работу

Поляченко Юрия Анатольевича

“Молекулярно-динамическая модель кристаллического лизоцима”

Направление подготовки/специальность: 03.03.01 - Прикладная математика и физика

Направленность (профиль) подготовки: Вычислительная физика конденсированного состояния и живых систем

Юрий Поляченко начал работать по теме дипломной работы летом 2020 года. За время работы им были освоены необходимые методы молекулярного моделирования и удаленной работы на суперкомпьютерных системах. Юрий продемонстрировал умение работать с научной литературой и смог разобраться в деталях эксперимента по свойствам кристалла лизоцима, на который ориентировано расчетно-теоретическое исследование его дипломной работы.

Юрий доложил промежуточные результаты исследований на 63-й Всероссийской научной конференции МФТИ в ноябре 2020 года и на Международной конференции ПЕФМ-2021 в марте 2021 года.

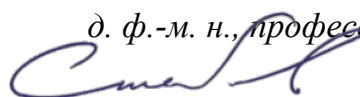
Юрий работал над моделью вода+лизоцим, для которой различными способами вычислялся модуль упругости. Показано совпадение значений модуля упругости кристалла K , рассчитанных двумя рассмотренными в работе прямыми методами. В рамках двухфазного моделирования получены оценки уровней гидратации белка при различных влажностях. Однако имеется заметное расхождение полученных результатов со значениями K , измеренными в эксперименте. Разрешение этого несоответствия является одним из направлений дальнейших исследований.

Считаю, что дипломная работа Поляченко Ю.А. заслуживает оценки «отлично». Выпускная работа соответствует требованиям, установленным для ВКР студентов МФТИ. Рекомендую присвоить Поляченко Ю.А. квалификацию «Бакалавр» по направлению «Прикладная математика и физика».

Научный руководитель:

Стегайлов Владимир Владимирович

д. ф.-м. н., профессор МФТИ



27.06.2021 г.