

РЕЦЕНЗІЯ

на навчальний посібник “Чисельні методи. Молекулярно-динамічні розрахунки в LAMMPS. Моделювання полімеру в водному середовищі”

Автор: Бур'ян Сергій Анатолійович

Рецензований навчальний посібник забезпечує детальне розуміння методів молекулярної динаміки з використанням програмного забезпечення LAMMPS, що є актуальним як для теоретичних, так і практичних аспектів сучасних досліджень у галузі фундаментальної та медичної фізики. Матеріал посібника є важливим доповненням до навчальних матеріалів для студентів фізичного факультету Київського національного університету імені Тараса Шевченка, спеціальності 104 “Фізика та астрономія”, освітньої програми “Фізика” ОКР Бакалавр.

Автором посібника вдало викладено теоретичні засади, практичні інструкції, а також демонстровано приклади моделювання, що значно спрощує процес засвоєння складних концепцій та технічних деталей програмування симуляцій. Посібник включає обговорення основних принципів моделювання в пакеті молекулярної динаміки LAMMPS, опис водного середовища для полімеру та конкретні методи моделювання молекули поліетиленгліколю в воді.

Особливо варто виділити розділ, присвячений детальному аналізу міжмолекулярних взаємодій у водних середовищах, який поглиблює розуміння важливих біологічних процесів та їх імітації у симуляціях. Розділ про використання моделі води TIP4P/2005f ілюструє складність та детальність, з якою автор підійшов до питання моделювання взаємодій у молекулярних системах.

Навчальний посібник написаний ясною та доступною мовою, оформлення тексту та графічних матеріалів виконано на високому рівні. Автор вдало поєднав складність наукових понять із зрозумілою подачею, що робить матеріал доступним для студентів різного рівня підготовки.

Рецензований навчальний посібник є корисним ресурсом для освіти та дослідження, рекомендується для використання в навчальному процесі, а також може бути корисним для науковців, які працюють в галузі моделювання матеріалів. Вважаю, що рецензований навчальний посібник “Чисельні методи. Молекулярно-динамічні розрахунки в LAMMPS. Моделювання полімеру в водному середовищі” може бути рекомендований до друку.

Завідувач кафедри фізики металів,
канд.фіз.-мат. наук, доцент



Василь КУРИЛЮК