

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ
ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК**

СТЕНОГРАММА

заседания диссертационного совета Д 002.110.02
на базе федерального государственного бюджетного учреждения науки
Объединенного института высоких температур Российской академии наук
(125412, г. Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2)
от 26 декабря 2018 года (протокол № 22)

**Защита диссертации Дьячкова Сергея Александровича
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
«Квазиклассическая модель термодинамических свойств электронов с учетом
состояний дискретного спектра и область ее применимости»**

Специальность 01.04.08 – Физика плазмы

Москва – 2018

СТЕНОГРАММА

заседания диссертационного совета Д 002.110.02
на базе федерального государственного бюджетного учреждения науки
Объединенного института высоких температур Российской академии наук
(125412, г. Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2), утвержденного
приказом Минобрнауки РФ №105/НК от 11.04.2012 г.

Председатель – Зам. председателя диссертационного совета Д 002.110.02,
д.ф.-м.н., профессор Андреев Н.Е.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 002.110.02 –
д.ф.-м.н., зам. директора по научной работе Васильев М.М.

1	Фортов В.Е.	Академик РАН, д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Отсутствует
2	Канель Г.И.	Чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Присутствует
3	Андреев Н.Е.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
4	Васильев М.М.	Д.ф.-м.н.	01.04.08	Присутствует
5	Агранат М.Б.	Д.ф.-м.н.	01.04.14	Отсутствует
6	Амиров Р.Х.	Д.ф.-м.н.	01.04.08	Присутствует
7	Баженова Т.В.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
8	Вараксин А.Ю.	Чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Присутствует
9	Васильев М.Н.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Присутствует
10	Василяк Л.М.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
11	Воробьев В.С.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
12	Голуб В.В.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Присутствует
13	Гордон Е.Б.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Отсутствует
14	Грязнов В.К.	Д.ф.-м.н.	01.04.14	Присутствует
15	Дьячков Л.Г.	Д.ф.-м.н.	01.04.08	Присутствует
16	Зейгарник Ю.А.	Д.т.н.	01.04.14	Присутствует
17	Еремин А.В.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Присутствует
18	Иванов М.Ф.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Отсутствует
19	Иосилевский И.Л.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
20	Кириллин А.В.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Присутствует
21	Лагарьков А.Н.	Академик РАН, д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Отсутствует
22	Ломоносов И.В.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Присутствует
23	Медин С.А.	Д.т.н., профессор	01.04.14	Присутствует
24	Норман Г.Э.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
25	Петров О.Ф.	Чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
26	Полежаев Ю.В.	Чл.-корр. РАН, д.т.н., профессор	01.04.14	Отсутствует
27	Савватимский А.И.	Д.т.н.	01.04.14	Присутствует
28	Сон Э.Е.	Чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
29	Старостин А.Н.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
30	Храпак А.Г.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Присутствует
31	Якубов И.Т.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Отсутствует

ПОВЕСТКА ДНЯ

На повестке дня защита диссертации Дьячкова Сергея Александровича на тему: «Квазиклассическая модель термодинамических свойств электронов с учетом состояний дискретного спектра и область ее применимости». Диссертация впервые представлена на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 – Физика плазмы. Диссертация выполнена в лаборатории 1.2.2.4 – моделирования свойств материалов, НИЦ-1 ТЭС Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, <http://jiht.ru>).

Научный руководитель:

Левашов Павел Ремирович – к.ф.-м.н., заведующей лабораторией 1.2.2.4 – моделирования свойств материалов НИЦ-1 ТЭС Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук, г. Москва.

Официальные оппоненты:

Шпатаковская Галина Васильевна – гражданка Российской Федерации, доктор физико-математических наук, эксперт-советник отдела №15 Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук (Россия, 119991, г. Москва, Миусская пл., д. 4, ФГБУН ИПМ им. М. В. Келдыша РАН).

Петров Юрий Васильевич – гражданин Российской Федерации, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник сектора плазмы и лазеров Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук (Россия, 142432, Московская обл., г. Черногловка, просп. Академика Семенова, д. 1-А, ФГБУН ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН);

Ведущая организация:

Федеральное государственное унитарное предприятие «Российский Федеральный Ядерный Центр - Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е. И. Забабахина» (Россия, 456770, Челябинская обл., г. Снежинск, ул. Васильева, д. 13, ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ им. Е.И. Забабахина»).

На заседании присутствуют:

официальные оппоненты Дьячкова С.А. – д.ф.-м.н. Шпатаковская Г.В.,
д.ф.-м.н. Петров Ю. В.,
научный руководитель Дьячкова С.А. – к.ф.-м.н. Левашов П.Р.

Председатель

Далее у нас Сергей Александрович Дьячков, если я правильно понимаю, по расписанию. Михаил Михайлович, пожалуйста, ознакомьте нас. А что, у нас даже пока еще ничего не горит.

Ученый секретарь

Уважаемые коллеги, Сергей Александрович сейчас презентацию запустит, а я пока, с вашего позволения, ознакомлю вас с материалами, которые подготовлены и имеются в деле. В наш совет обратился Сергей Александрович с просьбой принять к защите его работу с названием "Квазиклассическая модель термодинамических свойств электронов с учетом состояний дискретного спектра и область ее применимости" на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности физика плазмы. В нашем диссертационном совете была создана комиссия в составе Дьячкова Льва Гавриловича, Игоря Львовича Иосилевского и Алексея Георгиевича Храпака, и комиссия, ознакомившись с материалами, сделала вывод о том, что тема соответствует нашему совету и может рассматриваться в нашем совете. Значит, в деле имеются все документы, оформленные в соответствии с требованиями ВАК, Дьячков Сергей Александрович является выпускником Московского Физтеха, успешно сдал экзамены, прошел государственную итоговую аттестацию, получил диплом об окончании аспирантуры, и сейчас пришел на защиту. С вашего позволения, я зачитывать все документы не буду, при возникновении вопросов готов на них ответить.

Председатель

Какие есть вопросы у членов совета? Закончил аспирантуру – значит он все-таки позже того срока, о котором говорил Олег Федорович?

Ученый секретарь

Значит, до конца года, Олег Федорович говорил, считается в срок.

Председатель

Ага. А аспирантура кончилась, там, осенью.

Ученый секретарь

Да. Так часто бывает.

Председатель

А эта аспирантура была трех- или четырехлетней?

Ученый секретарь

Давайте спросим у Сергея. У вас 4 года аспирантура?

Дьячков С.А.

Да, четыре.

Председатель

Значит, уже перешли все на четыре. Но зато в срок. Девяносто процентов. Хорошо. Сергей Александрович, пожалуйста, в пределах двадцати минут, вам слово.

Дьячков С.А.

(Выступление не стенографируется. Доклад Дьячкова С.А. прилагается.)

Председатель

Спасибо, Сергей Александрович. Павел Ремирович, вам пару слов. А, сначала вопросы.

Левашов П. Р.

Да, сначала вопросы.

Председатель

Павел Ремирович, вы после вопросов. Пожалуйста, вопросы, вы, Владимир Сергеевич.

Воробьев В. С.

Вы ничего не сказали про граничные условия, на границе ячейки какие использовались? И потом, сразу вторая часть, в книжке Уварова, Новикова, значит, большое значение уделяется еще группе состояний, так называемой, квазизонной, которая в рамках такого подхода. Как вы с этими состояниями обошлись? Из доклада это неясно.

Дьячков С. А.

Значит, первый вопрос. На границе ячейки использовалось свободное граничное условие, то есть волновые функции квазиклассические мы нормировали только внутри ячейки, то есть, электронная плотность на границе с помощью непрерывного перехода остается свободной. Теперь второй вопрос, это зоны здесь не учитываются, потому что модель больше ориентирована на состояния вещества ниже нормальных плотностей, где зонная структура не так важна. Тем более, в сферической ячейке учет зон, он, в общем, может быть не совсем корректным.

Председатель

Ну, ответ, тем не менее, отрицательный: никак. Еще, пожалуйста, вопросы. Да, Игорь Львович.

Иосилевский И.Л.

Сергей, вот на фоне тех уточнений вклада электронов, о которых вы рассказали, как вы оцениваете неопределенность и ошибку в финальной термодинамике со стороны приближения средней сферической атомной ячейки, которое у вас основное, как незначительную, как заметную, или вообще, может быть, даже, как определяющую?

Дьячков С. А.

Здесь мнение такое, что в области сильных сжатий, при низкой температуре, скорее всего, именно сферичность ячейки может приводить к неправильным физическим результатам. В области разреженного вещества, мы считаем, что учет дискретного спектра и, вообще, результаты расчета по модели получаются достоверными. То есть сферичность ячейки наибольшим образом...

Иосилевский И.Л.

Я уточню вопрос: я спрашиваю не только про сферичность ячейки, а про то, что вы рассматриваете одну единственную ячейку вместо многоядерной системы.

Дьячков С. А.

Естественно, рассмотрение одной ячейки не дает вам учитывать согласованным образом еще и вклад ядер, и в этом основная проблема.

Иосилевский И.Л.

Как они соотносятся: точность от все более и более точного учета электронов, и та неопределенность, которая остается из-за невозможности оценить, какое искажение приносит это вот приближение средней атомной ячейки. Финальных результатов.

Дьячков С. А.

Для этого, например, можно расширить модель со сферической ячейкой, так называемый псевдоатомный подход, где рассмотреть, как влияют разные ячейки сферические друга на друга. То есть запустить, грубо говоря, квантовую молекулярную динамику, где электронная плотность рассчитывается в ячейке и несколько ячеек между собой перекрываются.

Председатель

Вы сказали можно, а это не совсем ответ на вопрос Игоря Львовича. То есть у вас этого не сделано? Но вы знаете как?

Дьячков С. А.

Да, мы знаем как.

Председатель

Да, спросить.

Сон Э. Е.

Можно я спрошу очень простые вопросы, может быть дилетантские, может быть нет. Смотрите, значит, если вы решаете задачу методом Томаса-Ферми, то вы предполагаете, что есть некоторое распределение заряда по радиусу, и решаете уравнение Пуассона, находите потенциал, и, значит, дальше, если можно, рассчитываете термодинамику. С другой стороны, если рассматривать квантовую механику, ну то есть там, где приближение Томаса-Ферми работает при тяжелых, при больших зэт, а вот для малых зэт там наоборот, нужно считать. Я могу рассуждать так, в квантовой механике, когда вы решаете уравнение Шредингера, вам не нужно знать потенциал, то есть, точнее говоря, он есть изначально, но потом есть оболочки, которые создаются дискретными электронами, вы можете потенциал построить, вот возникает вопрос. А если применить к уравнению, квантовому решению со всеми оболочками, посчитать потенциал, то, наверное, известно, сколько потенциал, да и уравнение Пуассона состоит в том, что, значит, если у вас сферически симметричная задача, то потенциал определяется только тем, что находится внутри - гравитационное поле земли, или кулоновский потенциал, поэтому ваш потенциал будет зависеть и так: он от одной оболочки меняется, спадает, но, когда появляется оболочка, сразу скачком будет меняться, и так дальше. То есть квантовая картина состоит в том, что применяя уравнение Пуассона для квантовой задачи, вы получите потенциал, который скачками будет изменяться, и он, наверное, уже не самосогласован с распределением. Поэтому, дальше, по мере увеличения зэт эта картина будет смазываться и при больших зэт, она будет больше спадать, значительно дальше. Вот кто-нибудь полный анализ вот этого дела делал или нет? То есть, начиная от применения к атому водорода, для которого хорошо известно, решить уравнения Пуассона, посмотреть, реально соответствует или нет, какие разницы возникают в описании термодинамики, например. То есть вы как бы

занимаетесь только определенной частью для больших зэт, там, наверное, это так или иначе сглажено как-то, а вот наиболее резко... Хотя, я приведу очень простой пример, что когда считают волновые функции атома водорода, то использование квазиклассического приближения, которое абсолютно неправильное, тем не менее, дает ответ всего лишь в два раза отличающийся от точного. Поэтому вот, общая теория кем-то изучалась? Потом, куда можно, какие ошибки, то есть вы говорите об ошибках в волновых функциях...

Председатель

Эдуард Евгеньевич, ваш вопрос понятен, давайте попробуем узнать точку зрения соискателя.

Дьячков С. А.

Мне такие работы неизвестны. Исследование потенциала для разных зэт, какие особенности решения Пуассона, мне неизвестно.

Председатель

Еще вопросы пожалуйста, кто-нибудь что-нибудь хочет спросить? Если вопросы исчерпались, тогда, Павел Ремирович, все-таки вам слово. Не о работе.

Левашов П. Р.

Глубокоуважаемые члены диссертационного совета, Сергей пришел к нам в институт в 2010 году, первые несколько месяцев пытался заниматься экспериментом, потом, понял что это не его деятельность, и пришел к нам лабораторию. Ему была поставлена весьма сложная задача, начальная задача - разобраться со сложной моделью оболочечных поправок, которые сформулированы были Давидом Абрамовичем Киржницем и Галиной Васильевной Шпатаковской. У меня были сомнения, что он с ней справится, с этой работой, до этого мало кто на эти вещи покушался. Но Сергей оказался упорным человеком, мы установили личный контакт с Галиной Васильевной и разобрались полностью в том, что она сделала, а далее Сергей работу эту продвинул еще вперед, учтя квазклассические волновые функции и дискретный спектр. По моему мнению, эта работа очень важна для нашего института, я надеюсь, что она будет продолжена. Сергей сейчас много внимания уделяет работе во ВНИИА, где его очень ценят и вряд ли отпустят заниматься этими проблемами, но я надеюсь, все-таки, что он найдет время продолжить эту работу. И я считаю, что эту работу надо поддержать, прошу членов ученого совета проголосовать.

Председатель

Спасибо, спасибо, Павел Ремирович. Михаил Михайлович, тогда мы сейчас ознакомимся с содержательной частью отзывов.

Ученый секретарь

Уважаемые коллеги, на разосланные авторефераты поступили 3 отзыва. Это отзыв из института теоретической физики имени Ландау, отзыв из Института общей физики Прохорова, и отзыв из хорошо вам известного Объединенного института высоких температур. Все отзывы положительные и все без замечаний. Но абсолютно зеркальная ситуация с отзывом, который поступил из ведущей организации. В качестве ведущей организации был Федеральное государственное предприятие Российский федеральный ядерный центр - Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени Забабахина. Отзыв

положительный, имеет структуру диссертация, отмечена актуальность и так далее, с вашего позволения, зачитывать не буду. В отзыве есть, по тексту диссертации высказан ряд замечаний, а именно 20 штук - это рекорд, с большим количеством формул выписанных и так далее, я сейчас постараюсь это озвучить и довести до вас, в сокращенном варианте. На странице 7 сделано утверждение, цитата, кроме того, химическая модель использует экспериментальные или рассчитанные с помощью других методов данные о потенциалах ионизации и в этом смысле является полуэмпирической. конец цитаты. Химическая модель может использовать потенциалы ионизации, рассчитанные последовательными методами современной теории атома, смотри, например, работу Лобода, Contribution to Plasma Physics 2009 года. Такая химическая модель не использует эмпирических данных, и поэтому ее нельзя называть полуэмпирической. Второе, на странице 8 написано, цитата: с другой стороны, метод Хартри-Фока и его обобщения используют для прецизионных расчетов дискретного спектра с помощью решения уравнения Шредингера для электронов, однако при высоких температурах учесть все состояния с ненулевыми числами заполнения становится невозможно, конец цитаты. Если дискретный спектр формально распространяется на положительные энергии при помощи условия квантования Бора-Зоммерфельда, как это сделано в диссертации, то учет большого числа состояний с различными главными квантовыми числами действительно очень трудоемок. Но при численном решении уравнения Шредингера к дискретному спектру относят только состояния с отрицательными энергиями. Число таких состояний в модели среднего атома конечно, из-за короткодействующего характера потенциала, и их вполне можно учесть полностью. Третье, на странице 20, 21 встречаются утверждения, цитата, изучение проводимости металлов с примесями в работе Фриделя показало, что зачастую вокруг положительного заряда возникают связанные состояния электронов, а значит, радиальное распределение электронной плотности осциллирует, образуя оболочечную структуру, схожую с атомной, конец цитаты. Следующая цитата, Хоэнберг и Кон элегантно продемонстрировали, что учет градиентных поправок любого порядка не позволит выявить осцилляции Фриделя и, соответственно, оболочечную структуру атома, конец цитаты. Оболочечная структура электронной плотности, соответствующая связанным состояниям, и фриделевские осцилляции - это разные вещи. Хотя фриделевские осцилляции также появляются в результате решения уравнения Шредингера, они возникают в электронной плотности свободных, а не связанных электронов. Фриделевские осцилляции возникают даже при отсутствии связанных состояний. Плотность связанных электронов имеет конечное число максимумов, а плотность свободных электронов имеет неограниченное число максимумов и минимумов, соответствующих фриделевским осцилляциям (при удалении от центрального ядра уменьшается только амплитуда осцилляций). Четвертое, на странице 22, 23 написано цитата, его, Цинка, модель описывает эффект ионизации давлением оболочек атома, связанный с тем, что по мере уменьшения размера атомной ячейки оболочки связанных электронных состояний последовательно оказываются на ее границе и пропорционально амплитуде осцилляций увеличивают вклад в давление рисунок 4, конец цитаты. Из рисунка 4 как раз видно, что модель Цинка неправильно описывает ионизацию давлением. В этой модели при исчезновении дискретных оболочек возникают нефизические скачки термодинамических величин. Подробно обсуждение ионизации давлением и в том числе невозможности ее корректно описать при помощи модели Цинка смотри в обзоре More, Pressure ionization, resonances, and the continuity of bound and free states восемьдесят пятого года. Пятое. На стр. 30--31 написано, цитата, орбитальный и безорбитальный методы, таким

образом, являются соответственно низкотемпературным и высокотемпературным пределами описания электронной подсистемы, конец цитаты. Безорбитальный метод функционала плотности не позволяет учитывать оболочечные осцилляции термодинамических величин при температурной ионизации внутренних оболочек, которые существенны при высоких температурах. Поэтому не ясно, в каком смысле он назван высокотемпературным пределом описания электронной подсистемы. Шестое. На стр. 32 написано, цитата, согласованный учет дискретного и непрерывного спектра состояний электронов в этом случае позволит существенно расширить возможности псевдоатомного подхода, конец цитаты. Такая задача уже решена, смотри работу Starrett, значит, опубликованную в Phys. Rev. E в 2016 году. Седьмое. На странице 37 написано, цитата, переходя к сферической ячейке радиуса ϵ нулевого и соответствующего объема, в центре которой расположен точечный ион заряда Ze и так далее, конец цитаты. Фактически имеется в виду не ион, а ядро. В модели Томаса-Ферми можно определить ион, ионный остов, как совокупность ядра и электронов с отрицательной энергией. Такой ион не является точечным. Восьмое. На странице 38 в подписи к рисунку 1.1 написано: при высоких температурах основная часть электронов локализована на границе ячейки и так далее, конец цитаты. При высоких температурах электроны не локализованы на границе ячейки, а распределены почти равномерно по объему ячейки. Девятое. На странице 40 в правой части первой формулы системы (1.32) вместо две третьих, а k в степени три вторых должно быть, в общем, степень у k должна быть минус одна вторая, неправильно указана степень. Десятое. На странице 44 в правой части первого уравнения системы (1.53) степень у τ должна быть не три вторых, а одна вторая. Одиннадцатое. На странице 58 неверно записано условие ортонормированности радиальных волновых функций, приведены формулы. Кроме того, волновые функции связанных электронов на внешних оболочках могут быть не локализованы в пределах атомной ячейки. В этом случае приведенное выше правильное условие ортонормированности должно заменяться на ему подобное с интегрированием не до ϵ нулевого, а до бесконечности.

Председатель

Михаил Михайлович, извините, это какая часть замечаний?

Ученый секретарь

Это половину мы прошли.

Председатель

Может быть, мы перейдем к выводу, а попросим диссертанта, который, несомненно, внимательно ознакомился со всем...

Иосилевский И.Л.

Это нарушение процедуры. Мы должны все зачитывать.

Председатель

Тогда зачитываем.

Ученый секретарь

Я постараюсь поскорее это сделать. Далее, в диссертации проводится формальное обобщение дискретного спектра на положительные энергии. Получаемая волновая функция электрона с положительной энергией по существу представляет собой волновую функцию свободного электрона, с точностью до нормировки.

Соответственно, при больших положительных энергиях квазиклассические волновые функции, используемые в диссертации, будут близки к точным решениям уравнения Шредингера, для которых условие ортогональности, как известно, имеет вид интеграла, не буду зачитывать, от нуля до бесконечности. Здесь интегрирование также ведется в пределах от нуля до бесконечности, а не до ϵ нулевого. Двенадцатое. В диссертации используются квазиклассические волновые функции в виде линейной комбинации внутренней и внешней функций. Однако при больших положительных энергиях электрона, где граница атомной ячейки ϵ равно ϵ нулевое находится в области, разрешенной для классического движения, внешняя точка поворота ϵ нулевое, которая в этом случае отсутствует, в диссертации заменяется на ϵ нулевое, примеры таких расчетов приведены в таблице Б1 на странице 102. В этом случае использовать внешнюю волновую функцию было бы некорректно. Дается пояснение почему. Тринадцатое. Оболочечные поправки к потенциалу и хипотенциалу в диссертации находятся при решении краевой задачи 2.9, страница 59. Энергия при этом выбирается из условия 2.25 и утверждается, что это условие должно выполняться. Однако если значение хипотенциала по модели Томаса-Ферми уже найдено из одних условий, то неясно, как можно удовлетворить условию 2.24. Четырнадцатое. Страница 72-73, утверждается, что если в формуле 2.34 пренебречь величиной δu , то получится одно значение, вместо этого, однако, получается совсем другая формула, по мнению рецензента из ведущей организации. В правой части формулы 2.41 на странице 74 пропущено слагаемое одна вторая δu . Шестнадцатое. Страница 74, утверждается, что формула 2.42 следует из 2.41, если в 2.41 пренебречь величиной δu . Однако в таком приближении эта формула не получается, если учесть, что пропущено слагаемое одна вторая δu . Семнадцатое. В формуле 2.45 на странице 75 слагаемое δu , деленное на два τ , должно быть со знаком плюс. В этом случае в формуле 2.47 на странице 76 вместо τ пополам должно быть три вторых τ . Восемнадцатое. На странице 78 написано, химическая модель плазмы достоверно воспроизводит термодинамику разреженной плазмы, поэтому результаты расчета по ней можно использовать в качестве эталонных. На самом деле точность химической модели сильно зависит от полноты учета возбужденных состояний ионов. Недостаточно полный учет возбужденных состояний может приводить к переоценке амплитуды оболочечных осцилляций, в том числе для разреженной плазмы. Девятнадцатое. На рисунке Б1 на странице 97 потенциал имеет неправильный знак. Двадцатое. В диссертации было бы желательно привести больше результатов расчетов термодинамических величин, в том числе вдоль ударных адиабат и холодных кривых. Кроме того, было бы полезно показать, как влияет введенная оболочечная поправка к модели Томаса-Ферми на расчетные значения нормальной плотности, которые не воспроизводятся моделью Томаса-Ферми с квантовыми и обменными поправками. Хотя при низких температурах вблизи нормальной плотности модель формально неприменима, поправки не малы по сравнению с основными слагаемыми, важно знать, насколько при этом велика погрешность, которую дает модель. Высказанные замечания в целом не снижают высокой положительной оценки, соискатель заслуживает присуждения ему искомой степени, все соответствует постановлению 842 от 24 сентября. Отзыв составили начальник отдела Лобода Петр Анатольевич, доктор физ.мат. наук, научный сотрудник Овечкин Антон Александрович кандидат физ.-мат. наук, подписан председателем НТС Гребенкиным константином Фридриховичем, и секретарем НТС Бабань Сергеем Андреевичем.

Председатель

Спасибо, Михаил Михайлович, за нелегкое ваше... Значит, Сергей Александрович, ну, я думаю так, что... Сколько там пунктов-то было? Двадцать. Давайте так поступим, Сергей Александрович. Если серьезно, то на самом деле есть замечания действительно к модели, а есть чисто технические замечания, что из этой формулы не следует эта, потерян такой-то член - это нам неинтересно. Кроме того, что писать надо тщательнее. Так что давайте по существу, коллективизируйте, как-то.

Дьячков С. А.

По-существу, значит, я со всеми замечаниями согласен, и хотел остановиться на нескольких, четырех замечаниях. Самое первое замечание, по поводу полуэмпирической модели. Ну, здесь вопрос терминологии. Я согласен с отзывом, что здесь действительно неправильно использовать название полуэмпирическая модель, так как все данные получены расчетным образом, и, в общем, вопрос терминологии на этом я считаю закрытым. Теперь, следующий вопрос сформулирован так, что неясно в каком смысле орбитальный и безорбитальный методы являются соответственно низкотемпературным и высокотемпературным пределом. Ответ, безорбитальный является высокотемпературным пределом при полной ионизации. В этом смысле. Пункт номер шесть, я чуть подробнее решил разобраться, потому что это действительно важная тема, как раз связанная с той задачей которую решаем мы, то есть согласовать дискретный и непрерывный спектр. Написано, что такая задача уже решена. Оказывается, что да, действительно, она решена следующим образом. Значит, рассмотрим потенциал до значения эр ноль. Здесь дискретный спектр считается, в работе, которая по ссылке. Теперь, непрерывный спектр считается вот в таком виде, и здесь есть суммирование по эль от нуля до бесконечности волновых функций, по орбитальному этому числу. И, действительно, в работе отмечается, что при высоких температурах очень сложно просуммировать вот этот весь ряд до какой-то величины, потому что эль надо выбирать в соответствии с корнем из два е на эр ноль. Оказывается, что такие эль оказываются очень большими. Что предложено делать. Значит, ограничивают эль каким-то расстоянием эр кат, и, соответственно, считают до эль макс, которое первое после этого значения. Обычно это составляет 50 - 100 членов ряда. После этого, к полученной электронной плотности, в этой точке, пришивается вот это решение, которое имеет вид томас-фермиевской части с фриделевскими осцилляциями свободных электронов. Единственный момент, который в этой работе не обоснован, это термодинамическая согласованность такой сшивки. Вот, в нашей работе эта задача решается путем введения граничной энергии: до нее мы считаем дискретный спектр, после нее - непрерывный. В этом случае, условие термодинамической согласованности нам позволяет быть уверенными в том, что термодинамика согласованная получается, и такая реализация, на мой взгляд, значительно проще, чем та, которая предложена. Следующий вопрос тоже сформулирован так, что не ясно как получается вот это условие. Если решена вот эта задача, и получена поправка к химпотенциалу, то вот это условие будет удовлетворяться автоматически. То есть, можно альтернативным способом решить задачу об оболочечных эффектах, даже не рассматривая электронную плотность, а ограничившись только числами состояний. Поэтому, это вот условие может быть использовано, если отказаться от решения вот этой краевой задачи. Теперь...

Председатель

А теперь, действительно, слово Галине Васильевне. И потом будут уже ответы на замечания.

Шпатаковская Г. В.

Дорогие коллеги, не буду подробно зачитывать весь отзыв, все введены уже в суть темы, и хотела бы отметить, что новое, по сравнению с тем, что было сделано предыдущими авторами, сделано в этой работе. Надо отметить, что хотя теория оболочечных эффектов была еще развита в прошлом веке, но реализация этих приложений, она была связана со стремлением к минимизации вычислительных трудностей, затрат, и это привело к тому что, реализация была, что для квантово-обменных поправок: были созданы таблицы для водорода, учитывающие автомоделность модели Томаса-Ферми; и такое же стремление было у меня, когда я теорию оболочечных эффектов развивала. И в результате получилось, что автомоделность была сохранена, но выделились поправка Скотта, осцилляционная поправка, оболочечная поправка - вот их удалось автомоделно представить по атомному номеру зэт, и табличные данные были рассчитаны для водорода, но стыковать вот эти все таблицы и аналитическую асимптотику, в общем, оказалось довольно сложно для практических расчетов. И вот, в чем как бы преимущество подхода Сергея Александровича, что вот использование квазиклассических волновых функций, оно одновременно и правильную дает асимптотику в нуле, поэтому поправка Скотта не нужна, правильные осцилляции внутри, осцилляции плотности, поэтому отдельная осцилляционная поправка не нужна, и вклад в термодинамику, значит, изменение химпотенциала, тоже таким образом, единообразно учитывается. Ну и при том, все-таки не нужно решать уравнение Шредингера, а все получается без этого решения. Таким образом, я вижу, что такой способ, теряется при этом автомоделность, но приобретает такое единство подхода, и поскольку на современных компьютерах рассчитать таблицу для любого элемента не представляет труда, то, в общем, это такой хороший инструмент получен для расчетов, которые необходимы, действительно, потому что вот если мы хотим широкодиапазонное уравнение состояния построить, которое сейчас востребовано для расчетов взаимодействия мощного излучения с веществом, то без модели Томаса-Ферми и ее модификаций мы не обойдемся, обязательно необходима сшивка. Поэтому, мне кажется, что, все-таки, существенный шаг сделан соискателем в этом направлении. Но, могу зачитать замечания, какие я.. У меня замечания, пожелания и вопросы. Ну, значит, видимо, в докладе первое замечание уже учтено, и рассмотрена диссертация Синько докторская. Была у меня претензия, что очень подробный обзор литературы, но вот работа Синько по как раз изучению вклада оболочечных поправок в ней не присутствовала, в этом обзоре. Второе замечание, вопрос у меня такой: с чем автор связывает заметные осцилляции давления на рисунке 3.3, 3.4 при увеличении плотности холодного вещества? Ну, то есть, там действительно холодное сжатое вещество, в принципе никаких осцилляций быть уже не должно, а они действительно на графике видны, и я пишу, что, значит, как было показано позже, это артефакт, связанный с предположением о резкой границе между дискретным и непрерывным спектрами. Так ли это и здесь? Вопрос. Третье замечание. В заключении диссертации автор пишет: разработан и реализован метод расчета с заданной точностью самосогласованный потенциал, электронная плотность, термодинамические функции электронов при нулевой и конечных температурах в рамках приближения Томаса-Ферми для среднего атома. Как это соотносится с результатами диссертации Шемякина, защищенной в 2010 году? Метод решения уравнения Томаса-Ферми и вычисления первых и вторых производных был там так же использован. Что нового здесь внес соискатель? Четвертый у меня скорее вопрос. Какие перспективы усовершенствования предложенной модели? Может быть, все-таки, в термодинамических характеристиках стоит учесть вклад оболочечной поправки к самосогласованному

потенциалу? Здесь учитывается только к химпотенциалу. Пробовал ли автор это делать? И, значит, еще один вопрос: почему автор не включил в результаты создание соответствующего программного комплекса? Ну, замечания по оформлению работы я не буду озвучивать. Ну и завершу свой отзыв необходимой частью: диссертация Дьячкова Сергея Александровича является завершенной научно-исследовательской работой, соответствующей требованиям предъявляемым пунктом 9 положения о порядке присуждения ученых степеней, номер там такой-то, по диссертациям, представляемым на соискание ученой степени кандидата физ.-мат. наук по специальности 01.04.08 - физика плазмы. Ее автор, Дьячков Сергей Александрович, несомненно, заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук.

Председатель

Спасибо большое, Галина Васильевна. Сергей Александрович, ответьте, пожалуйста.

Дьячков С. А.

Ну, поподробнее остановимся на вопросах. Вопрос второй, по поводу осцилляций. Вот, речь идет об этих осцилляциях, которые видны на диаграмме применимости. По всей видимости, здесь ситуация возникает та же самая, что и в работе семидесятого года Воропинова, Гандельмана, Подвального. При расчетах методом Хартри-Фока в сферической ячейке также возникают вот такие нефизичные осцилляции на холодной кривой, которые позже не были подтверждены. Скорее всего, здесь похожая возникает ситуация. Значит, я считаю, что это связано не с тем, что граница дискретного и непрерывного спектра как-то резко себя ведет, а именно с тем, что мы используем приближение сферической атомной ячейки, которое в таких условиях уже не работает. Почему граница не должна влиять? Потому что при низкой температуре все состояния находятся в дискретном спектре, фактически, и, соответственно, учет, ну, то есть, возбужденные состояния здесь не должны оказывать заметного влияния. Вот. Теперь вопрос следующий, как это соотносится с результатами диссертации Шемякина, значит, вопрос о реализации с заданной точностью метода расчета потенциала и так далее. Фактически, в этой работе был независимо от Олега Шемякина реализован расчет с заданной точностью всех вот этих величин, использовалась схема интегрирования уравнений более высокого порядка. Но, я согласен с тем, что сама методика расчета с заданной точностью путем решения задачи Коши, вместо методов численного интегрирования, вот она была предложена не мной, а Олегом Шемякиным, но в этой работе методика была расширена и улучшена. Следующий вопрос. Перспективы усовершенствования предложенной модели. Значит, действительно я рассматривал вопрос учета вклада оболочечной поправки к потенциалу, но пока эта работа не доведена до конца, поэтому о результатах я ничего сказать не могу. Еще, что касается перспектив усовершенствования модели: хочется отказаться от использования именно поправок, а попробовать реализовать самосогласованный цикл с учетом квазиклассического дискретного спектра, вот, и, таким образом, посмотреть, как вот таким образом построенная модель будет себя вести. Ожидается, что при низких температурах она будет значительно лучше. Теперь, почему программный комплекс не включен в результаты. Ну, потому что цель работы состояла именно в разработке модели, а программный комплекс: он возник как следствие работы по созданию модели, поэтому он подходит для практического использования, но главный результат - это модель оболочечных поправок с учетом квазиклассического дискретного спектра.

Председатель

Так, спасибо. Юрий Васильевич Петров, пожалуйста. Юрий Васильевич, сконцентрируйтесь, пожалуйста, на содержательной части. Конечно, замечания все нужно озвучить, если они есть.

Петров Ю. В.

Работа посвящена модели Томаса-Ферми, которая имеет вполне такую разумную область применения, и не требует каких-то больших вычислительных ресурсов. Основное достоинство работы, что в диссертации впервые показано, что оболочечная поправка томас-фермиевскому числу состояний может быть получена как разница между числом состояний дискретного спектра электронных оболочек и числом состояний в приближении Томаса-Ферми ниже некоторой граничной энергии. И впервые получены такие вот оболочечные поправки к потенциалу электростатическому, электронной плотности, числу состояний, химическому потенциалу и другим термодинамическим функциям, используя квазиклассические волновые функции центрально-симметричного поля. Количественно приведены границы применимости приближения Томаса-Ферми по отношению к квантовым, обменным и оболочечным поправкам. Что очень важно, на самом деле, автором представлен комплекс программ для расчета уравнений состояния и других термодинамических функций, а также энергетического спектра электронов в потенциале Томаса-Ферми в рассматриваемой в диссертации области входной плотности. Это имеет вполне разумное практическое применение. Тот комплекс, который предложен в диссертации, вполне может быть использован в ИВТАНе, ФИАНе, в нашем институте, потому что нам требуются расчеты состояний, которые возникают, в частности, в результате воздействия интенсивного лазерного излучения на металлы, и нам это вполне может быть все применимо. Это действительно очень, важно - конкретная программа, если нажать на это и на это, то получите то. Это имеет очень большое значение. Но есть, конечно, замечания. Самое большое замечание касается самого приближения Томаса-Ферми, потому что в нем есть противоречия. Оно, с одной стороны, действительно работает только при больших зет, а с другой стороны при больших зет почти половина электронов - это релятивистские электроны. А вот у автора с самого начала сказано, что это ни в коем случае не учитывается. На самом деле, уже зависимость просто массы от скорости вполне учитывается в приближении Томаса-Ферми просто тем, что кинетическая энергия пишется не просто как p^2 квадрат на два эм, а как корешок с эм це квадрат, и все. Это немножко меняет уравнения, но делает их совсем не такими сложными. Дальше, достоинство приближения Томаса-Ферми, конечно, это его автомодельность по зарядовому числу. Поправки тоже там обладают некой автомодельностью, но это как-то обойдено. Ну, есть чисто технические там всякие замечания, есть такие, да. Допустим, делается такая-то замена для интегрирования, но делается на самом деле совсем другая. Ну и вообще, на заметку, фермиевская энергия здесь вообще просто неправильная была. В общем, ну это такие, чисто технические замечания, мелкие, но они встречаются, действительно. На самом деле, тем не менее, несмотря на все замечания, вывод такой, совершенно положительный. Диссертация Сергея Александровича Дьячкова представляет собой законченную научно квалификационную работу, которая соответствует всем требованиям ВАК о порядке присуждения ученых степеней, и, естественно, диссертант заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по этой специальности.

Председатель

Спасибо, спасибо, Юрий Васильевич. Пожалуйста, Сергей Александрович.

Дьячков С. А.

Прокомментирую вопрос о релятивистских эффектах. Действительно, в этой модели они не учитываются. Это интересная тема исследований: посмотреть, как влияют релятивистские эффекты на модель Томаса-Ферми и, соответственно, построить еще одну границу, было бы интересно, области применимости, но в данной работе этого нет. Теперь скейлинговые характеристики. Значит, все, что касается модели Томаса-Ферми с квантовыми и обменными поправками - все скейлинговые характеристики сохраняются, которые получены в работе Николая Николаевича Калиткина, вот для всех термодинамических функций все это справедливо. Однако, для оболочечной поправки скейлинга уже никакого нет, то есть для каждого из них нужно считать отдельно. Вот, теперь по поводу технических замечаний, ну, здесь вот опечатка, да, в энергии ферми, пропущена степень две третьих. И, значит, по поводу интеграла. Здесь я расписал, действительно, после той замены, которая предложена в тексте, требуется еще одна замена, чтобы преобразовать к финальному виду. Так что, со всеми замечаниями я согласен.

Председатель

Спасибо, Сергей Александрович, я только вот не понял насчет ста МэВ без релятивистских поправок, это опечатка что ли?

Дьячков С. А.

Нет, это указаны технические возможности комплекса, именно касательно самой модели. Здесь, скажем, в указании технических характеристик программного комплекса, значит, в работе не гарантируется, что там модель применима. То есть, можно рассчитать что-то в программном комплексе, но то, что это будет достоверно, утверждений таких нет.

Председатель

То есть, вы хотите сказать, что расчетная модель не сломается при десять в восьмой МэВ?

Дьячков С. А.

Не сломается, да.

Председатель

Но посчитать там можно что-то не то.

Дьячков С. А.

Да.

Председатель

Спасибо. Мы переходим к дискуссии.

Иосилевский И.Л.

Можно мне?

Председатель

Да, да.

Иосилевский И.Л.

Уважаемые коллеги, во-первых, я призываю вас поддержать эту работу, а во-вторых, я хочу сказать, что, как ни парадоксально, но Сергей Дьячков, получил, по-моему, бесценный подарок, о котором может только мечтать каждый диссертант, который представляет кандидатскую диссертацию. Чтобы вот так, под увеличительным стеклом, значит, прочитала оппонировавшая организация, да и оппоненты там все замечания сделали, поэтому мне кажется, что, повезло. Более того, поскольку Павел Ремирович сказал, что Сергей работает во ВНИИА и его оттуда не отпустят, поэтому вот эти двадцать замечаний оппонировавшей организации, пять замечаний Галины Васильевны, и четыре замечания второго оппонента, Юрия, они представляют собой просто готовый план для следующего. Поэтому призыв к Павлу Ремировичу среди студентов найти такого же замечательного студента, и прямо дать вот, на, и давай! Так что, еще раз, я предлагаю поддержать работу.

Председатель

Спасибо. Еще есть желающие? Да.

Левашов П. Р.

Пользуясь случаем, хотел поблагодарить Галину Васильевну Шпатаковскую за то, что она согласилась оппонировать, и поздравить ее с днем рождения.

(аплодисменты)

Председатель

Замечательно. И вы, в такой день, пришли? Спасибо большое, двойное. Хорошо. Еще в дискуссии кто-нибудь хочет высказаться, или уже достаточно все ясно? Мне представляется, что очень подробная у нас была дискуссия, с помощью оппонентов, всех, включая Петю Лобода, который большую работу проделал. Значит, у меня есть предложение остаться в рамках той счетной комиссии, которая была, если никто не возражает. Хорошо, возражений нет, тогда переходим к голосованию.

(Голосование, подсчет голосов.)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.110.02 НА БАЗЕ
ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ
ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК ПО ДИССЕРТАЦИИ
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 26.12.2018 протокол № 22

О присуждении Дьячкову Сергею Александровичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Квазиклассическая модель термодинамических свойств электронов с учетом состояний дискретного спектра и область ее применимости» в виде рукописи по специальности 01.04.08 – Физика плазмы, принята к защите 17.10.2018г., (протокол заседания № 18) диссертационным советом Д 002.110.02, созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр.2, iht.ru, (495) 485-8345), утвержденным Приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 11.04.2012г. № 105/нк.

Соискатель Дьячков Сергей Александрович 1991 года рождения, в 2014 году окончил Московский физико-технический институт (государственный университет).

В 2018 году окончил очную аспирантуру факультета «Проблем физики и энергетики» Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московского физико-технического института (государственного университета)».

Диссертация выполнена в лаборатории № 1.2.2.4 – моделирования свойств материалов НИЦ-1 ТЭС Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

Научный руководитель – к.ф.-м.н. Левашов Павел Ремирович, заведующий лабораторией № 1.2.2.4 НИЦ-1 ТЭС – моделирования свойств материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

Официальные оппоненты:

- д. ф.-м. н., эксперт-советник, отдел №15 Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук (ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, 125047, Москва, Миусская пл., д. 4, тел. (499) 978-1314, keldysh.ru, e-mail: shpagalya@yandex.ru), Шпатаковская Галина Васильевна;

- д. ф.-м. н., старший научный сотрудник сектора плазмы и лазеров Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук (ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, 142432, МО., г. Черноголовка, просп. Академика Семенова, д. 1-А, тел. (495) 702-9317, itp.ac.ru, e-mail: retrov@itp.ac.ru) Петров Юрий Васильевич;
дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация: Федеральное государственное унитарное предприятие «Российский Федеральный Ядерный Центр - Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е. И. Забабахина» (ул. Васильева, 13, г. Снежинск, Челябинская обл., 456770, тел. 8(351-

46)5-51-20, vniitf.ru, e-mail: vniitf@vniitf.ru) в своем положительном заключении, составленном по итогам обсуждения на заседании научно-технического совета Научно-теоретического отделения №1 (протокол № 8 от 29.11.2018) начальником отдела НТО-1, д. ф.-м. н. Лобода Петром Анатольевичем, научным сотрудником НТО-1, к. ф.-м. н. Овечкиным Антоном Александровичем, председателем НТС НТО-1, д. ф.-м. н. Гребёнкиным Константином Фридриховичем (утвержденном директором ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ», кандидатом экономических наук Железновым Михаилом Евгеньевичем), указала, что диссертация Дьячкова С. А. представляет собой законченную научно-квалификационную работу на актуальную тему и содержит новые важные результаты, которые могут применяться для построения широкодиапазонных уравнений состояния при решении задач физики плазмы и экстремальных воздействий в профильных научных организациях, представляются достоверными и научно обоснованными и соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г.

Соискатель имеет 25 опубликованных работ по теме диссертации, из них 4 статьи в рецензируемых журналах из списка ВАК и 21 в сборниках тезисов докладов и трудов конференций.

Основные работы:

1. Dyachkov S. A., Levashov P. R. Region of validity of the finite-temperature Thomas-Fermi model with respect to quantum and exchange corrections // *Physics of Plasmas*. 2014. Vol. 21, no. 5. P. 052702.
2. Dyachkov S. A., Levashov P. R., Minakov D. V. Region of validity of the Thomas-Fermi model with corrections // *Physics of Plasmas*. 2016. Vol. 23, no. 11. P. 112705.
3. Dyachkov S. A., Levashov P. R., Minakov D. V. Region of validity of the Thomas-Fermi model with quantum, exchange and shell corrections // *Journal of Physics: Conference Series*. 2016. Vol. 774. P. 012006.
4. Дьячков С. А., Левашов П. Р. Исследование области применимости модели Томаса-Ферми по отношению к квантовым и обменным поправкам // *Известия Кабардино-Балкарского Государственного Университета*. 2014. Т. 4, No 1. С. 17–21.

На автореферат поступили отзывы:

1. Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау РАН (научный сотрудник сектора плазмы и лазеров, к. ф.-м. н. В. А. Хохлов) – отзыв положительный, без замечаний.
2. Институт общей физики им. А. М. Прохорова РАН (заведующий отделом взаимодействия когерентного излучения с веществом, д. ф.-м. н. И. К. Красюк) – отзыв положительный, без замечаний.
3. Объединенный институт высоких температур РАН (старший научный сотрудник теоретического отдела №1.2.4. им. Л. М. Бибермана, к. ф.-м. н. Шумихин Алексей Сергеевич) – отзыв положительный, без замечаний.

Выбор официальных оппонентов обосновывается тем, что:

- д. ф.-м. н., эксперт-советник, отдел №15 ФГБУН ИПМ им. М. В. Келдыша РАН Шпатаковская Г. В. является ведущим специалистом по квазиклассическому методу расчета электронной структуры и термодинамических свойств веществ в физике высоких плотностей энергии, о чем свидетельствуют публикации:
1. В.Я. Карпов, Г.В. Шпатаковская. “Учет дискретности электронного спектра в статистической модели свободных ионов” // *Письма в ЖЭТФ* —2013. —Т.98 — №5-6, —С. 389–393;

2. В.Я. Карпов, Г.В. Шпатаковская, “О подобии по атомному номеру электронных энергий связи заполненных оболочек элементов периодической системы” // ЖЭТФ —2017. —Т. 151. —№3 —С. 435–445;
3. Г.В. Шпатаковская. “Подобие по атомному номеру К- и L- рентгеновских термов в многоэлектронных атомах” // Письма в ЖЭТФ —2018. —Т.108 —№11, —С. 781–784;
- д. ф.-м. н., старший научный сотрудник сектора плазмы и лазеров ФГБУН ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН Петров Юрий Васильевич является ведущим ученым в области теоретического исследования переносных и термодинамических свойств материалов в экстремальных условиях (высоких температурах и давлениях, а также сильных внешних полях), о чем свидетельствуют публикации:
 1. Ю.В. Петров, К.П. Мигдал, Н.А. Иногамов, С.И. Анисимов. “Процессы переноса в металле с горячими электронами, возбужденными лазерным импульсом” // Письма в ЖЭТФ —2016. —Т.104 —№ 6 —С. 446–454;
 2. Yu.V. Petrov, K.P. Migdal, N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky. “Two-temperature equation of state for aluminum and gold with electrons excited by an ultra-short laser pulse” // Appl. Phys. B —2015. —Т.119 —№ 3. —С. 401–411;
 3. N.A. Inogamov, V.V. Zhakhovsky, V. A. Khokhlov, Yu. V. Petrov, K.P. Migdal. “Solitary Nanostructures Produced by Ultrashort Laser Pulse” // Nanoscale Research Letters —2017. —Т.11 —№ 1 —С. 177.

Выбор Федерального государственного унитарного предприятия «Российского Федерального Ядерного Центра - Всероссийского научно-исследовательского института технической физики имени академика Е. И. Забабахина» в качестве ведущей организации обусловлен тем, что ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ» является многопрофильной авторитетной научной организацией, ведущей исследования по целому ряду направлений, в том числе по разработке широкодиапазонных уравнений состояния и изучению транспортных, оптических свойств, а также электронной структуры материалов в экстремальных условиях, о чем свидетельствуют публикации:

1. N. A. Smirnov. “Effect of spin-orbit interactions on the structural stability, thermodynamic properties, and transport properties of lead under pressure” // Physical Review B. —2018. —Т. 97 —№ 9. —С. 094114;
2. A.A. Ovechkin, P.A. Loboda, A.L. Falkov. Transport and dielectric properties of dense ionized matter from the average-atom RESEOS model // High Energy Density Physics —2016. —Т. 20. —С. 38-54;
3. A.A. Ovechkin, P.A. Loboda, V.G. Novikov, A.S. Grushin, A.D. Solomyannaya. “RESEOS - A model of thermodynamic and optical properties of hot and warm dense matter” // High Energy Density Physics. —2014. —Т. 13. —С. 20-33.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

1. Разработан и реализован метод расчета уровней энергии, волновых функций и электронной плотности дискретных состояний в квазиклассическом приближении в потенциале Томаса-Ферми для сферической атомной ячейки с заданной точностью.
2. Разработан и реализован метод определения граничной энергии между дискретным и непрерывным спектром состояний в квазиклассической модели среднего атома.
3. Разработан и реализован метод расчёта оболочечных поправок к потенциалу, электронной плотности, химическому потенциалу и термодинамическим функциям модели Томаса-Ферми с заданной точностью.

4. Выявлена область применимости термодинамических функций электронов по модели Томаса-Ферми по отношению ко всем типам поправок.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

1. Предложенная соискателем модель позволяет достоверно описывать состояние электронного газа в широкой переходной области между плотной и разреженной плазмой;
2. Продемонстрировано, что область применимости модели по отношению ко всем типам поправок соответствует плазме с параметром неидеальности менее единицы;
3. Показано, что использование только тепловой части термодинамических функций электронов позволяет расширить область применимости модели в сторону низких температур.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики подтверждается тем, что:

1. Разработан программный комплекс для расчета электронной структуры и термодинамических свойств электронов любого элемента периодической таблицы в широком диапазоне температур и плотностей и опубликован в открытом доступе;
2. Показано, что расчеты таблиц термодинамических функций по модели Томаса-Ферми со всеми типами поправок могут проводиться на персональном компьютере как в последовательном, так и в параллельном режиме за приемлемое время;
3. В диссертации приведены примеры программ для расчета потенциала, энергетического спектра и термодинамических функций электронов и результат их работы в виде графиков и таблиц.

Модель термодинамических свойств электронов и её реализация в виде программного комплекса могут применяться в следующих организациях: ОИВТ РАН, ИПХФ РАН, ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, РФЯЦ-ВНИИТФ, РФЯЦ-ВНИИЭФ, ИТФ им. Л. Д. Ландау РАН, ИОФ им. А. М. Прохорова РАН.

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

1. Идея работы состоит в улучшении хорошо изученной модели Томаса-Ферми с квантовыми и обменными поправками для среднего атома, что подтверждается подробным литературным обзором;
2. Используются стандартные схемы численного интегрирования дифференциальных уравнений высокого порядка с заданной точностью;
3. Используется известное квазиклассическое решение уравнения Шрёдингера для сферически симметричного потенциала;
4. Термодинамические функции электронов, рассчитанные по модели Томаса-Ферми с учетом квазиклассического дискретного спектра, хорошо согласуются с достоверными данными как в области низких, так и в области нормальных плотностей вещества;
5. Результаты работы многократно обсуждались на российских и международных конференциях.

Личный вклад соискателя:

Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора. Все представленные результаты расчета и их интерпретация выполнены автором лично. Параллельный программный комплекс для расчетов электронной структуры и термодинамических функций с использованием квазиклассического приближения для учёта состояний дискретного спектра полностью разработан автором. Подготовка публикаций выполнена вместе с соавторами при определяющем вкладе соискателя. Результаты

