

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Князева Дмитрия Владимировича  
«РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ, ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И ОПТИЧЕСКИХ  
СВОЙСТВ ПЛОТНОЙ ПЛАЗМЫ НА ОСНОВЕ МЕТОДА КВАНТОВОЙ  
МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И ФОРМУЛЫ КУБО-ГРИНВУДА»  
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук  
по специальности 01.04.08 – Физика плазмы

Работа Князева Д.В. связана с проблемой описания транспортных и оптических свойств плотной плазмы. Решение данной задачи имеет большое фундаментальное значение для различных разделов науки, включая физику низкотемпературной плазмы, физику взаимодействия лазерного излучения с веществом, физику экстремальных состояний вещества и т.п. Кроме того, существует значительный ряд прикладных применений, в которых используются высокие локальные концентрации энергии в плотных средах. Из-за трудностей теоретического характера задача строгого описания транспортных свойств плотной плазмы далека от завершения, поэтому дальнейшие расчетные, теоретические и экспериментальные исследования продолжаются и являются, безусловно, **актуальными**.

В проведенных диссертантом исследованиях расчет транспортных и оптических свойств плазмы осуществлялся с помощью методики, основанной на итерационном применении квантового молекулярно-динамического моделирования, метода функционала плотности и формулы Кубо-Гринвуда. Начальная часть расчетов осуществлялась с помощью коммерческого программного пакета первопринципного моделирования VASP, финальная часть расчетов проводилась с помощью параллельного кода, написанного лично автором.

**Научная новизна** работы определяется следующим:

1. Предложена оригинальная процедура сокращения числа **k**-точек в зоне Бриллюэна, которая позволяет сократить объем вычислений при практически неизменной точности результатов. Некоторые расчеты были проведены с весьма большим числом атомов алюминия в расчетной ячейке – 1372.
2. Впервые выполнены изохорные расчеты транспортных, оптических и термодинамических свойств плазмы эффективного состава  $\text{CH}_2$  с помощью квантового молекулярно-динамического моделирования, метода функционала плотности и формулы Кубо-Гринвуда при плотности  $0,954 \text{ г/см}^3$  и температурах от 5 кК до 100 кК.

**Достоверность** полученных данных обеспечивалась дополнительными расчетами, в которых была определена погрешность расчетов и показано влияние технических параметров на результаты расчетов. Также было выполнено сравнение полученных результатов с данными, полученными в других работах.



**Научная и практическая ценность** работы определяется полученными расчетными данными по переносным и оптическим свойствам плотной плазмы алюминия и плазмы эффективного состава  $\text{CH}_2$  и построенной аппроксимацией рассчитанных свойств. Подготовлены рекомендации по применимости модели, подобной теории Друде, для описания статической электропроводности неравновесной плазмы алюминия при нормальной плотности. Все эти результаты, без сомнения, будут востребованы в инженерных расчетах.

Диссертация Князева Д.В. представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным пунктом 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. Князев Дмитрий Владимирович заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 – Физика плазмы.

Отзыв составлен старшим научным сотрудником лаборатории Электромагнитных процессов в ударно-сжатых средах Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института проблем химической физики Российской академии наук (ИПХФ РАН), кандидатом физико-математических наук Шилкиным Николаем Сергеевичем.

к.ф.-м.н., старший научный сотрудник  
лаборатории Электромагнитных процессов  
в ударно-сжатых средах ИПХФ РАН  
142432, Московская область, Ногинский район, г. Черноголовка,  
просп. Академика Семенова, д. 1  
8-(49652)-2-26-79, shilkin@icp.ac.ru

 Шилкин Н.С.

Ученый секретарь ИПХФ РАН,  
д. х. н.  
142432, Московская область, Ногинский район, г. Черноголовка,  
просп. Академика Семенова, д. 1  
8-(49652)-2-19-32, psi@icp.ac.ru



Психа Б.Л.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химической физики Российской академии наук (ИПХФ РАН)  
142432, Московская область, Ногинский район, г. Черноголовка, просп. Академика Семенова, д. 1  
8-(495)-993-57-07, director@icp.ac.ru