

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.193.01  
(Д 002.110.02), СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАР-  
СТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ  
НАУК, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОК-  
ТОРА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 02.11.2022 г. № 28

О присуждении Левашову Павлу Ремировичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Квантово–статистический расчет теплофизических свойств веществ для интерпретации ударно-волновых экспериментов и численного моделирования воздействия лазерных импульсов на вещество» по специальности 1.3.14 - теплофизика и теоретическая теплотехника принята к защите 28.06.2022 (протокол заседания № 11) экспертной комиссией Диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02), созданном на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (125412, г. Москва, Ижорская ул., д. 13, стр. 2, (495) 485-8345, jiht.ru), утвержденного Приказом Министерства образования и науки Российской Федерации № 86/нк от 26.01.2022г.

Соискатель Левашов Павел Ремирович, 1973 года рождения, в 1996 году окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)».

Диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук на тему: «Уравнения состояния жидкой фазы металлов при высоких давлениях и температурах», по специальности 01.04.14 – тепло-

физика и теоретическая теплотехника защитил в 2000 году в диссертационном совете Д 002.53.03, созданном на базе Института высоких температур АН СССР.

Работает в должности заведующего лабораторией № 7.1 – моделирования свойств материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

В 1999 году окончил очную аспирантуру Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)».

Диссертация выполнена в лаборатории 7.1 моделирования свойств материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой химической физики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» Губин Сергей Александрович,

доктор физико-математических наук, доцент, главный научный сотрудник Федерального государственного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН» Змитренко Николай Васильевич,

доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры Э6 «Теплофизика» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)» Рыжков Сергей Витальевич

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Рос-

сийской академии наук в своем положительном заключении, составленном заместителем директора по науке ИФВД РАН, д.ф.-м.н. Рыжовым Валентином Николаевичем (утвержденном 7.09.2022 г. директором академиком Бражкиным В.В.) указала, что научная значимость работы определяется, в первую очередь, потребностями разработки широкодиапазонных моделей термодинамических, транспортных и оптических свойств веществ для решения разнообразных практических задач, в том числе связанных с взаимодействием лазерных импульсов с веществом. Отмечается, что работе получен ряд важных результатов, определяющих научную новизну. Так, в диссертации разработан метод расчета тепловой части термодинамических функций конечно-температурной модели Томаса–Ферми для смеси элементов, включая вторые производные термодинамического потенциала, выполнен расчет кривых плавления металлов различной плотности с нагретой электронной подсистемой, продемонстрирована возможность описания всех типов ударно-волновых экспериментов для алюминия с помощью метода квантовой молекулярной динамики, выявлены особенности электронных транспортных свойств для плотной плазмы эффективного состава  $\text{CH}_2$  в диапазоне температур от 5 до 100 кК.

Соискатель имеет 150 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 25 работ, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 25 работ. Список основных публикаций соискателя:

1. Shemyakin O. P., Levashov P. R., Obruchkova L. R., Khishchenko K. V. Thermal contribution to thermodynamic functions in the Thomas–Fermi model // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. — 2010. — Vol. 43, no. 33. — P. 335003.
2. Shemyakin O. P., Levashov P. R., Krasnova P. A. TFMix: A high-precision implementation of the finite-temperature Thomas–Fermi model for a mixture of atoms // Computer Physics Communications. — 2019. — Vol. 235. — P. 378-387.

3. Filinov V. S., Fehske H., Bonitz M., Fortov V. E., Levashov P. R. Correlation effects in partially ionized mass asymmetric electron-hole plasmas // *Phys. Rev. E.* — 2007. — Vol. 75, no. 3. — P. 036401.
4. Levashov P. R., Sin'ko G. V., Smirnov N. A., Minakov D. V., Shemyakin O. P., Khishchenko K. V. Pseudopotential and full-electron DFT calculations of thermodynamic properties of electrons in metals and semiempirical equations of state // *Journal of Physics: Condensed Matter.* — 2010. — Vol. 22, no. 50. — P. 505501.
5. Minakov D. V., Levashov P. R. Melting curves of metals with excited electrons in the quasiharmonic approximation // *Phys. Rev. B.* — 2015. — Vol. 92, no. 22. — P. 224102.
6. Minakov D. V., Levashov P. R., Khishchenko K. V., Fortov V. E. Quantum molecular dynamics simulation of shock-wave experiments in aluminum // *J. Appl. Phys.* — 2014. — Vol. 115, no. 22. — P. 223512.
7. Minakov D., Levashov P. Thermodynamic properties of LiD under compression with different pseudopotentials for lithium // *Computational Materials Science.* — 2016. — Vol. 114. — P. 128–134.
8. Knyazev D. V., Levashov P. R. Transport and optical properties of warm dense aluminum in the two-temperature regime: Ab initio calculation and semiempirical approximation // *Phys. Plasmas.* — 2014. — Vol. 21. — P. 073302.
9. Krasnova P. A., Levashov P. R. Two-phase isochoric Stefan problem for ultrafast processes // *Int. J. Heat Mass Transfer.* — 2015. — Vol. 83. — P. 311–316.
10. Filinov V. S., Larkin A. S., Levashov P. R. Uniform electron gas at finite temperature by fermionic-path-integral Monte Carlo simulations // *Phys. Rev. E.* — 2020. — Vol. 102, no. 3. — P. 033203.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

**1. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук** (г.н.с. лаборатории нелинейной динамики, д.ф.-м.н. Волков Николай Борисович) – отзыв положительный, без замечаний.

**2. Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии** (г.н.с., чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. Минцев Виктор Борисович) – отзыв положительный, без замечаний.

**3. Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт» (национальный исследовательский университет)** (профессор МФТИ, д.ф.-м.н. Ткаченко Светлана Ивановна) – отзыв положительный, с замечанием:

- воздействие лазерного импульса на металлическую мишень с установленной перед ней тонкой пленкой моделируется в одномерной постановке. Эффекты неоднородности, безусловно, оказывающие влияние на результаты моделирования, в автореферате не упоминаются и не обсуждаются.

**4. Акционерное общество «Государственный научный центр Российской Федерации Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований»** (научный руководитель отделения Центр теоретической физики и вычислительной математики, д.ф.-м.н. Филиппов Анатолий Васильевич) - отзыв положительный, с замечанием:

- на рис. 8 (слева) автореферата приведены результаты расчета кривой квази-изоэнтропического сжатия дейтерия в сравнении с экспериментальными данными, полученными в РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров. На рисунке показаны экспериментальные точки до давления около 18 Мбар, хотя за последние 10 лет в эксперименте были получены точки при давлениях свыше 100 Мбар. Было бы крайне желательно провести теоретическую интерпретацию новых экспериментальных данных, если используемый для этого подход позволяет это сделать.

**5. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук** (г.н.с., д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН Иногамов Наиль Алимович) - отзыв положительный, с замечанием:

- на рис. 3 (справа) автореферата приведены результаты сравнения метода Монте-Карло с интегралами по траекториям с химической моделью плазмы для смеси водорода с гелием. Заметно, что изотермы 200 кК, рассчитанные по этим двум моделям, отличаются по наклону, хотя согласие для изотерм при более низких температурах значительно лучше. В автореферате не обсуждаются причины такого поведения.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается:

- д.ф.-м.н., профессор Губин С.А. является ведущим ученым в области разработки моделей уравнения состояния для расчетов ударной сжимаемости инертных и взрывчатых веществ, а также термодинамических свойств продуктов детонации.

1. Кудинов А.В., Богданова Ю.А., Губин С.А., Мамедов З.И. Молекулярно-динамическое моделирование теплофизических свойств метана при статическом и ударно-волновом сжатии // Горение и взрыв. — 2018. — Т. 11, № 1. — С. 118-124.

2. Bogdanova Y.A., Gubin S.A., Maklashova I.V. Radial distribution functions for molecules in the universal equation of state model for gaseous/fluid/condensed systems // Physics of Atomic Nuclei. — 2019. — Т. 82, № 11. — С. 1481-1485.

3. Губин С.А., Сверчков А.М., Сумской С.И. Моделирование генерации и распространения ударных волн и волн сжатия в пузырьковых средах // Горение и взрыв. — 2021. — Т. 14, № 1. — С. 47-58.

- д.ф.-м.н., с.н.с. Змитренко Николай Васильевич является признанным специалистом в области моделирования воздействия лазерного излучения на

различные мишени с учетом переноса излучения, в том числе для задач инерциального термоядерного синтеза.

1. Змитренко Н.В., Кучугов П.А., Розанов В.Б., Степанов Р.В., Яхин Р.А. Исследование возможностей моделирования процессов несимметричного взрыва и разлета сверхновых звезд в условиях лазерного эксперимента // Письма в ЖЭТФ. — 2018. — Т. 107, № 7-8. — С. 411-417.

2. Gus'kov S.Y., Rozanov V.B., Il'in D.V., Sherman V.E., Perlado J.M., Zmitrenko N.V. Spectral composition of thermonuclear particle and recoil nuclear emissions from laser fusion targets intended for modern ignition experiments // Plasma Physics and Controlled Fusion. — 2018. — Т. 60, № 8. — С. 085004.

3. Гуськов С.Ю., Демченко Н.Н., Змитренко Н.В., Кучугов П.А., Яхин Р.А. Сжатие и горение термоядерной мишени при зажигании фокусирующей ударной волной в условиях нарушения симметрии облучения лазерными пучками // ЖЭТФ. — 2020. — Т. 157, № 5. — С. 889-900.

- д.ф.-м.н., профессор Рыжков Сергей Витальевич является известным специалистом в области высокотемпературной теплофизики, а также в области магнито-плазменного и магнитогидродинамического моделирования процессов, возникающих в задачах управляемого и инерциального термоядерного синтеза.

1. Kuzenov V.V., Ryzhkov S.V. Numerical modeling of laser target compression in an external magnetic field // Mathematical Models and Computer Simulations. — 2018. — Т. 10, № 2. — С. 255-264.

2. Kuzenov V.V., Ryzhkov S.V. Simulation of processes on a target induced by a jet system and laser radiation // Physics of Atomic Nuclei. — 2019. — Т. 82, № 10. — С. 1341-1347.

3. Кузенов В.В., Рыжков С.В. Численное моделирование взаимодействия мишени магнитно-инерциального термоядерного синтеза с плазменным и лазерным драйверами // Теплофизика высоких температур. — 2021. — Т. 59, № 4. — С. 492-501.

- Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Инсти-

тут физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук является профильной организацией, специализирующейся на проведении исследований в области физики высоких давлений для экспериментального и теоретического изучения уравнений состояния, механических, структурных и транспортных свойств, а также фазовых переходов. В последние десятилетия в организации активно используются методы численного моделирования, в том числе классический метод молекулярной динамики и метод функционала электронной плотности.

1. Бражкин В.В. Почему статистическая механика "работает" в конденсированных средах? // УФН. — 2021. — Т. 191. — С. 1107–1116.
2. Brazhkin V.V., Fomin Yu.D., Ryzhov V.N., Tsiok E.N., Trachenko K. Liquid-like and gas-like features of a simple fluid: An insight from theory and simulation // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. — 2018. — V. 509. — P. 690-702.
3. Tsiok E.N., Fomin Yu. D., Gaiduk E.A., Tareyeva E.E., Ryzhov V.N., Libet P.A., Dmitryuk N.A., Kryuchkov N.P., Yurchenko S.O. The role of attraction in the phase diagrams and melting scenarios of generalized 2D Lennard-Jones systems // *Journal of Chemical Physics*. — 2022. — V. 256. — P. 114703.

**Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:**

- разработана методика вычисления тепловой части термодинамических функций с заданной точностью по моделям Томаса–Ферми при конечной температуре и Томаса–Ферми для смеси элементов, в том числе для вторых производных термодинамического потенциала;
- разработан программный код для вычисления тепловой части термодинамических функций для моделей Томаса–Ферми при конечной температуре и Томаса–Ферми для смеси элементов, разработан графический интерфейс для вычисления таблиц термодинамических функций;



- разработаны полуэмпирические широкодиапазонные уравнения состояния для ряда металлов, в которых в качестве теплового вклада электронов используется модель Томаса–Ферми при конечной температуре;
- проведены расчёты термодинамических функций смеси водорода с гелием при температурах выше 10 кК с помощью метода Монте-Карло с интегралами по траекториям;
- проведены расчёты кривых плавления алюминия, меди и никеля с помощью метода функционала плотности, квазигармонического приближения и критерия Линдемана;
- с помощью метода функционала плотности, квазигармонического приближения и критерия Линдемана проведены расчеты температуры плавления в зависимости от электронной температуры для металлических кристаллов различной плотности с нагретыми электронами;
- проведено сравнение результатов вычисления холодных кривых, теплового давления и электронной теплоёмкости для металлов с помощью псевдопотенциального и полноэлектронного методов функционала плотности;
- проведено моделирование ударно-волновых экспериментов для алюминия, дейтерия и LiD;
- проведены расчёты транспортных и оптических свойств плотной плазмы алюминия и пластика эффективного состава  $\text{CH}_2$  с помощью метода квантовой молекулярной динамики и формулы Кубо–Гринвуда, в том числе в двухтемпературном приближении;
- проведено одномерное гидродинамическое моделирование воздействия мощного лазерного импульса на тонкую плёнку, установленную перед мишенью, с учётом переноса излучения.

**Теоретическая значимость исследования** обоснована тем, что:

- разработаны новые теоретические подходы для вычисления теплового вклада в термодинамические функции конечно-температурной модели

Томаса–Ферми для смеси веществ, включая вторые производные термодинамического потенциала;

- предложен метод исследования области применимости псевдопотенциалов для метода функционала плотности;
- разработан метод расчёта кривых плавления кристаллов с нагретыми электронами;
- разработаны методы расчёта изоэнтроп сжатия и разгрузки по результатам атомистического моделирования;
- выполнена теоретическая интерпретация всех типов ударно-волновых экспериментов.

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

- разработан компьютерный код с графическим интерфейсом для расчёта теплового вклада электронов для смеси веществ по конечно-температурной модели Томаса–Ферми, а также параллельный код для вычисления транспортных свойств по формуле Кубо–Гринвуда;
- рассчитаны подробные таблицы термодинамических свойств электронов и создан новый класс широкодиапазонных полуэмпирических уравнений состояния металлов без коррекции электронного вклада;
- рассчитаны кривые плавления металлов в широком диапазоне давлений;
- рассчитана температура и другие термодинамические параметры при моделировании ударно-волновых экспериментов для ряда веществ;
- рассчитаны электронные транспортные свойства для плотной плазмы алюминия и пластика эффективного состава  $\text{CH}_2$ ;
- численно изучена проблема подавления лазерного предимпульса с помощью тонкой плёнки, устанавливаемой перед мишенью.

Результаты работы могут быть использованы в научных и научно-образовательных центрах, а также в организациях, в которых создаются и применяются широкодиапазонные модели теплофизических свойств ве-

ществ, в частности, в ОИВТ РАН, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, ФИЦ ПХФ и МХ РАН, ФИЦ ХФ РАН, ИЭФ УрО РАН, ИСЭ СО РАН, ИГиЛ СО РАН, РФЯЦ-ВНИИЭФ, РФЯЦ-ВНИИТФ, АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ», ФГУП «ВНИИА», МФТИ, НИЯУ МИФИ, МГТУ им. Баумана.

**Оценка достоверности результатов** исследования выявила, что достоверность полученных результатов подтверждается использованием теоретических подходов, основанных на квантовой статистической физике и имеющих строгое теоретическое обоснование. Все квантово-статистические модели, рассмотренные в диссертации, были проанализированы на сходимость по параметрам моделирования, а результаты расчетов сравнивались с альтернативными моделями и экспериментальными данными.

**Личный вклад соискателя** является определяющим и состоит в постановке задач, разработке моделей, проведении численного моделирования, анализе и интерпретации полученных результатов, а также в подготовке публикаций.

Апробация результатов исследования проводилась на 88 российских и международных конференциях и симпозиумах. Основные публикации по выполненной работе также подготовлены при определяющем участии автора.

В ходе защиты критических замечаний высказано не было.

Соискатель Левашов Павел Ремирович в ходе заседания ответил на задаваемые ему вопросы, привел собственную аргументацию и согласился с замечаниями.

На заседании от 02.11.2022 г. диссертационный совет принял решение: за решение ряда научных проблем, внедрение которых вносит значительный вклад в развитие страны, присудить Левашову Павлу Ремировичу ученую степень доктора физико-математических наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника.

Всего присутствовало 25 членов совета, из них 12 докторов по профилю, очно – 17, из них докторов по профилю – 6, онлайн – 8, из них докторов по профилю – 6.

При проведении тайного голосования Диссертационный совет в количестве 25 человек, из них очно: 8 докторов наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 6 докторов наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника, дистанционно: 2 доктора наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 6 докторов наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника, участвовавших в заседании, из 31 человека, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за 24, против 0, недействительных бюллетеней – 0.

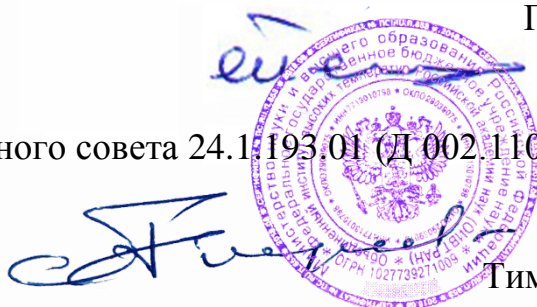
Председатель диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02)

д.ф.-м.н., профессор, академик РАН

Петров О.Ф.

Ученый секретарь диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02)

к.ф.-м.н.



Тимофеев А.В.

02.11.2022 г.