

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

СТЕНОГРАММА

заседания диссертационного совета 24.1.193.01 (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 28 декабря 2022 г. (протокол № 35)

Защита диссертации **Морозова Игоря Владимировича**
на соискание ученой степени доктора физико-математических наук
**«Столкновительные и релаксационные процессы в неидеальной электрон-ионной
плазме»**

Специальность 1.3.9 – физика плазмы

Москва – 2022

СТЕНОГРАММА

заседания диссертационного совета 24.1.193.01 (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)
Протокол № 35 от 28 декабря 2022 г.

Диссертационный совет 24.1.193.01 (Д 002.110.02) утвержден Приказом Министерства образования и науки РФ от 26.01.2022 г. № 86/нк в составе 31 человека. На заседании присутствуют 23 человека, из них 9 докторов наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 11 докторов наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника. Дополнительно введены на разовую защиту 0 человек. Кворум имеется.

Председатель – председатель диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02), д.ф.-м.н., профессор, академик РАН Петров О.Ф.

Ученый секретарь – ученый секретарь диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02), к.ф.-м.н. Тимофеев А.В.

1	Петров О.Ф.	Академик РАН, д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Присутствует
2	Андреев Н.Е.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Присутствует
3	Храпак А.Г.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.14	Присутствует
4	Тимофеев А.В.	К.ф.-м.н.	1.3.9	Присутствует
5	Агранат М.Б.	Д.ф.-м.н., с.н.с.	1.3.14	Подключен
6	Амиров Р.Х.	Д.ф.-м.н., с.н.с.	1.3.9	Отсутствует
7	Баженова Т.В.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Отсутствует
8	Вараксин А.Ю.	Чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор	1.3.14	Присутствует
9	Васильев М.М.	Д.ф.-м.н.	1.3.9	Подключен
10	Васильев М.Н.	Д.т.н., профессор	1.3.14	Подключен
11	Василяк Л.М.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Присутствует
12	Воробьев В.С.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Отсутствует
13	Гавриков А.В.	Д.ф.-м.н., доцент	1.3.9	Подключен
14	Голуб В.В.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.14	Подключен
15	Грязнов В.К.	Д.ф.-м.н.	1.3.14	Подключен
16	Дьячков Л.Г.	Д.ф.-м.н.	1.3.9	Присутствует
17	Еремин А.В.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.14	Присутствует
18	Зейгарник Ю.А.	Д.т.н., с.н.с.	1.3.14	Подключен
19	Зеленер Б.Б.	Д.ф.-м.н.	1.3.9	Отсутствует
20	Иосилевский И.Л.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Присутствует
21	Киверин А.Д.	Д.ф.-м.н.	1.3.14	Присутствует
22	Кириллин А.В.	Д.ф.-м.н.	1.3.14	Отсутствует
23	Лагарьков А.Н.	Академик РАН, д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Отсутствует
24	Левашов П.Р.	К.ф.-м.н.	1.3.14	Присутствует
25	Ломоносов И.В.	Чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор	1.3.14	Отсутствует
26	Медин С.А.	Д.т.н., профессор	1.3.14	Подключен
27	Норман Г.Э.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Присутствует
28	Пикуз С.А.	К.ф.-м.н.	1.3.9	Присутствует
29	Савватимский А.И.	Д.т.н.	1.3.14	Подключен
30	Филиппов А.В.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Подключен
31	Яньков Г.Г.	Д.т.н., с.н.с.	1.3.14	Отсутствует

ПОВЕСТКА ДНЯ

На повестке дня защита диссертации заведующего лабораторией № 1.6 – теплофизических баз данных (Термоцентр им. В.П. Глушко) Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН) **Морозова Игоря Владимирович** на тему «Столкновительные и релаксационные процессы в неидеальной электрон-ионной плазме». Диссертация представлена впервые на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы. Диссертация выполнена в лаборатории № 1.6 – теплофизических баз данных (Термоцентр им. В.П. Глушко) ОИВТ РАН (125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, веб сайт: jiht.ru).

Официальные оппоненты:

Потехин Александр Юрьевич – гражданин РФ, д.ф.-м.н., главный научный сотрудник сектора теоретической астрофизики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук (ФТИ им. А.Ф. Иоффе; Россия, 194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 26, веб сайт: ioffe.ru).

Брантов Андрей Владимирович – гражданин РФ, д.ф.-м.н., ведущий научный сотрудник сектора лазерно-плазменной физики высоких энергий Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук (ФИАН; Россия, 119991 ГСП-1, г. Москва, Ленинский проспект, д. 53, веб сайт: www.lebedev.ru).

Бриллиантов Николай Васильевич – гражданин РФ, д.ф.-м.н., профессор Автономной некоммерческой образовательной организации высшего образования «Сколковский институт науки и технологий» (Сколтех; Россия, 121205, г. Москва, территория инновационного центра «Сколково», Большой бульвар, д. 30 стр.1, веб сайт: www.skoltech.ru).

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук (ИОФ РАН; Россия, 119991, г. Москва, ул. Вавилова, д. 38, веб сайт: www.gpi.ru).

На заседании присутствуют официальные оппоненты д.ф.-м.н., с.н.с. Потехин А.Ю., д.ф.-м.н. Брантов А.В., д.ф.-м.н., профессор Бриллиантов Н.В.

СТЕНОГРАММА

Председатель

Дорогие коллеги! Начнем заседание нашего совета. Прежде всего я хотел бы поздравить всех присутствующих с наступающим Новым годом, пожелать, конечно, здоровья, всяческих успехов и большого душевного оптимизма. Сегодня докторская защита нашего коллеги Игоря Владимировича Морозова. Это событие, когда наши коллеги защищаются, всегда ожидаемое, в том смысле, что ждешь его с нетерпением. И сегодня прямо под новогоднее настроение мы такую защиту будем рассматривать. Начинаем нашу работу, слово предоставляется Алексею Владимировичу.

Ученый секретарь

Информирует членов совета об особенностях работы в смешанном очно-дистанционном формате, зачитывает данные о соискателе по материалам личного дела и сообщает о соответствии представленных документов требованиям ВАК Министерства науки и высшего образования РФ.

Председатель

Вопросов (к ученому секретарю) нет, слово предоставляется Игорю Владимировичу Морозову для изложения основных положений диссертации.

Морозов Игорь Владимирович

Выступает с докладом по диссертационной работе (выступление не стенографируется, доклад Морозова И.В. прилагается).

Председатель

Спасибо, Игорь Владимирович! Переходим теперь к обсуждению. Кто хотел бы задать вопросы? Пожалуйста, Леонид Михайлович.

Василяк Леонид Михайлович

Скажите, пожалуйста, в части, где один многозарядный ион попадает в кристалл и образуется плазма, у меня несколько вопросов. Первое, каким образом задавались те плазменные частицы, которые образуются – это был расчет или изначально они давались? И второе, каким образом различали ионы, которые в решетке находятся и которые можно отнести к плазме?

Морозов Игорь Владимирович

Спасибо, тут ситуация выглядела следующим образом. Действительно, для того чтобы промоделировать этот процесс, сейчас я покажу соответствующий слайд, нам нужна какая-то сначала модель ионизации ионов среды при пролете многозарядного иона. Эта модель ионизации рассчитывалась не нами, она рассчитывалась Игорем Юрьевичем Скобелевым. То есть мы рассматривали различные конфигурации, но в данном случае показано (*показывает на слайде*), что это некая модель профиля (сечения) ионного трека, где показаны оцененные таким образом степени ионизации ионов среды. При этом считается, что остальные ионы находятся вне этой сферы и они, соответственно, не

ионизованы. По идее их влияние тоже можно было бы учитывать и, наверное, нужно было бы учитывать, но мы здесь ограничились рассмотрением такой вот открытой системы, то есть имели только эти заряженные частицы и дальше у нас никаких частиц не было. Это дает оценку снизу для плотности электронов. Понятно, что наличие атомов вне этой сферы могло бы привести только к увеличению плотности электронов внутри этой сферы. Мы пытались оценить зависимость профиля электронной плотности лишь от кулоновского взаимодействия с этими ионизованными атомами. Таким образом, мы не учитывали влияние среды, а модель ионизации была для метода молекулярной динамики внешней.

Василяк Леонид Михайлович

Понятно. Еще будьте добры, все-таки размер маленький, у Вас считается функция распределения для основной части электронов, которая фактически отвечает за объемную плотность энергии, и высокоэнергетичная. Два вопроса, если позволите. Первое, достаточно ли количества электронов на таком маленьком объеме, чтобы статистику навести? Второе, не могли бы вы пояснить, почему все-таки по-разному релаксируют эти две части?

Морозов Игорь Владимирович

По-разному релаксируют две части?

Василяк Леонид Михайлович

Средняя плотность электронов, как я понял, быстро релаксирует, а высокоэнергетичная долго достаточно. Но, может быть, я ошибаюсь?

Морозов Игорь Владимирович

Совершенно верно, да. Даже, может быть, я Вам найду слайд, где показана релаксация высокоэнергетичной части. Что касается количества электронов. С технической точки зрения тут нет особых проблем, потому что мы же рассматриваем весь трек, то есть мы можем усреднять по ансамблю таких двухмерных структур. Поэтому в этом смысле у нас есть еще одна ось, которая направлена на нас (*показывает на слайде*), вдоль нее мы можем проводить усреднение. Таким образом, конечно, это усредненный результат, и такого распределения не получилось бы, если бы мы рассматривали какой-то достаточно маленький объем этой среды. Но, собственно, и излучение рентгеновских спектров, оно тоже в реальности усредняется по некоторому довольно значительному объему. Что касается эффектов релаксации. Действительно, в этой плазме находится две фракции электронов: одна из них имеет ту температуру, которая здесь указана, в пределах 15 эВ, и существует также фракция электронов с гораздо большими энергиями. Наша задача состояла в том, чтобы оценить влияние электрон-ионных столкновений на термализацию горячей части. Эти столкновения имеют некоторое характерное время релаксации. Здесь (*показывает на слайде*) получается, что происходит только релаксация внутри самой электронной подсистемы, то есть мы наблюдаем релаксацию этого распределения к равновесию, но у нас здесь нет электрон-ионной релаксации. У нас получается некоторая температура этих электронов. А второй более медленный процесс – это термализация горячих электронов в среде ионов и более холодных электронов. Это, естественно, более

длительный процесс, связанный с обменом энергией между этими частицами, и он действительно занимает десятки фемтосекунд. Он примерно на порядок больше, чем процесс термализации основных электронов в плазме.

Председатель

Уважаемые коллеги! Продолжаем обсуждение. Я хотел бы задать вопрос. Игорь Владимирович, Вы упомянули, что методы, которые Вы развиваете, они применимы в том числе для неравновесной подсистемы электронов. А какие критерии неравновесности Вы используете?

Морозов Игорь Владимирович

Здесь речь идет о том, что, во-первых, как показано на этом примере (*показывает слайд*), плазма может не иметь максвелловского распределения по скоростям для электронов. Электроны также могут иметь неравновесное пространственное распределение. Здесь это было во многих случаях показано: и в случае с плоской стенкой, и в случае с цилиндрической геометрией, и для сферических ионизованных нанокластеров. И третий вариант неравновесности – когда у нас существует локальное равновесие в электронной подсистеме, и мы рассматриваем, допустим, электрон-ионную релаксацию. То есть мы рассматриваем взаимодействие двух таких квазиравновесных систем, которые обмениваются энергией, или, например, это термализация горячих электронов в более холодной плазме. Вот такие три случая неравновесности, фактически, мы изучали.

Председатель

Понятно. Вопросы, пожалуйста.

Киверин Алексей Дмитриевич

У меня тоже вопрос возник по этой задаче. Все-таки про сам трек Вы можете что-то сказать? По его геометрическим параметрам, по его ширине и по температуре: можно как-то оценить температуру вещества (кристалла), в котором пробегает частица?

Морозов Игорь Владимирович

Да, оценивается начальная энергия этих электронов, она оценивается на основе модели ионизации, она несколько выходила за рамки нашей работы, но, как правило, она оценивается в пределах нескольких электронвольт. В данном случае до 14 – 15 электронвольт, то есть это превышение поглощенной энергии электрона над порогом ионизации для соответствующего иона. Что касается размера, в данном случае, как Вы видите (*показывает на слайде*), он составляет (несколько ангстрем). Здесь этот размер в ангстремах указан, то есть это достаточно маленькая величина – это несколько ангстрем фактически. То есть несколько межатомных расстояний в кристаллической решетке. Здесь рассматривался SiO₂ на самом деле, и соответственно, несколько межатомных расстояний определяют (ширину трека). То есть это очень узкий цилиндрический слой, и мы оценили кулоновский вклад для формирования двойного слоя на границе.

Киверин Алексей Дмитриевич

А то, что Вы говорили, про более дальние связи – они никакого влияния не имеют?

Морозов Игорь Владимирович

Они, конечно, имеют влияние, но в рамках этого метода мы его оценить не можем. То есть мы должны либо существенно усложнять нашу модель, кстати, здесь метод волновых пакетов мог бы помочь, если мы смогли бы его применить – я думаю, что это возможно, либо тут нужны какие-то другие вычислительные методы. Конечно, он имеет влияние. Но в рамках этой задачи мы его оценить не могли, то есть тут рассматривалась только электрон-ионная плазма, как пример системы неравновесной, но с другой геометрией.

Киверин Алексей Дмитриевич

А в плане прикладном в этих задачах какой спектр материалов рассматривался?

Морозов Игорь Владимирович

У нас здесь есть Сергей Алексеевич Пикуз, я думаю, что лучше будет спросить его, потому что я, конечно, не вполне специалист в этой сфере, но там использовались аэрогели, там использовался SiO_2 и другие вещества, в которых при взаимодействии с многозарядным ионом атомы переходят в состояние с вакансией в К-оболочке. За счет этого исследуют рентгеновские спектры, которые могут наблюдаться. Потому что видимый свет мы не можем наблюдать изнутри этого кристалла, а рентгеновской излучение может оттуда выходить и наблюдаться экспериментально. Таким образом, мы можем получать какие-то сведения о состоянии плазмы. И вот здесь температура показана (*показывает на слайде*), эта температура оценивалась, в общем-то, по сопоставлению с экспериментом, в том числе. То есть она может, с одной стороны, оцениваться на основе модели ионизации, а с другой стороны, она может являться таким вот подгоночным параметром для сопоставления с экспериментом. И здесь показано как раз для определенного случая, каким образом мы можем описать экспериментальные данные с этой температурой.

Киверин Алексей Дмитриевич

Хорошо, спасибо.

Председатель

Сергей Алексеевич хотел задать вопрос – да, пожалуйста.

Пикуз Сергей Алексеевич

Игорь Владимирович, у меня скорее вопросы по следующей главе – по четвертой части, связанной с нанокластерами. Правильно ли я понимаю, что излучение не учитывается? Потери на излучение в процессе релаксации?

Морозов Игорь Владимирович

В данной модели мы не учитывали, но поскольку такое замечание было сделано в отзывах, то я на самом деле привел оценки, и я Вам сейчас могу их показать – оценки потери энергии на излучение для тех параметров плазмы, которые мы обсуждали (*показывает слайд*). Тут речь идет вот о чем. Здесь показана зависимость заряда кластера от времени, и мы видим, что этот процесс зарядки кластера, он происходит за несколько

пикосекунд. Если взять время характерное – 4 пикосекунды, концентрацию ионов, которую мы в данном случае рассматривали, то для этого диапазона температур от 1 до 3 электронвольт и того диапазона размеров кластера, который мы рассматривали, здесь показаны в электронвольтах потери, пересчитанные в температуру. То есть это энергия на один электрон в электронвольтах. А изменение температуры за счет термоэмиссии, как мы видим, тут единицы электронвольт, тогда как здесь (в таблице, показывающей потери энергии на излучение) это доли электронвольт. Поэтому мы проводили такие оценки. Получается, что для температуры примерно до 5 электронвольт на этих временах излучение существенно не влияет на динамику электронов. Если температура выше 5 электронвольт, то его нужно учитывать.

Пикуз Сергей Алексеевич

А если рассмотреть вопрос, связанный с затуханием плазмонов, с декрементом затухания, будет такой же ответ?

Морозов Игорь Владимирович

Да, это чисто тепловое излучение. Конечно, излучение, связанное с плазмонами, будет тоже вносить какой-то вклад, он примерно сопоставим с этим тепловым излучением, то есть на самом деле здесь определяющее значение играет температура. До 5 электронвольт на эти временах потери не очень существенны (в пределах единиц пикосекунд).

Пикуз Сергей Алексеевич

Другой вопрос – какое стартовое ионизационное состояние вводилось, какая кратность ионизации рассматривалась?

Морозов Игорь Владимирович

В данном случае мы рассматривали только однократно ионизованные ионы на самом деле, хотя у нас было в планах рассмотреть и ионы с более широким спектром ионизационных состояний. Мы ориентировались на ряд экспериментов, в которых достаточно низкая интенсивность лазерных импульсов, поэтому мы на самом деле рассмотрели только однократно ионизованные ионы. Хотя в общем, конечно, здесь, наверное, правильное было бы рассмотреть некий спектр, и это можно было бы сделать. Но я не думаю, что принципиально там (что-то) изменится. Все-таки основная задача наша была на некоторые принципиальные вопросы ответить. Например, о причине снижения частоты поверхностных плазмонов. С нашей точки зрения этот эффект, конечно, будет иметь место и в плазме с большей высокой степенью ионизации.

Пикуз Сергей Алексеевич

Но как раз на предыдущей картинке, где Вы сравнивали две ситуации, связанные с интенсивностями 10^{15} и 10^{18} (Вт/см²), там даже по той динамике, которую Вы наблюдаете, в общем, хорошо видно, что кратности различны.

Морозов Игорь Владимирович

Различны, конечно, да. Поэтому, смотрите, мы на самом деле не моделируем здесь полностью весь процесс, начиная от ионизации кластера и заканчивая его разлетом. Наша

задача, в общем-то, она имеет отношение к ионизации реальных кластеров, но она тоже, по большому счету, теоретическая и модельная. То есть до этого у нас была плоская геометрия, потом была цилиндрическая, это пример сферической геометрии, где мы можем рассмотреть релаксацию электронной подсистемы для таких вот сферических объектов. И примером такого сферического объекта является нанокластер. Потому что, действительно, для того чтобы полностью рассмотреть весь этот процесс, метода классической молекулярной динамики недостаточно. Здесь применяются другие методы, например, группой Феннеля в Ростове развивается метод «MicPIC» – это аналог «Particle-in-cell» (метод частиц в ячейке), только не для квазичастиц, а для реальных частиц. Он гораздо более точно может моделировать на больших временах. Ионизацию системы можно было бы рассмотреть на основе метода молекулярной динамики с волновыми пакетами. Мы планировали это сделать, единственно, что просто пока не успели, но тем не менее, действительно, это можно сделать. Потому что метод классической молекулярной динамики позволяет рассматривать только сформировавшуюся наноплазму, а процесс ионизации до какой-то степени мы можем моделировать. Мы тут задавали потенциал электрон-ионный равным потенциалу ионизации натрия, потому что мы рассматривали в основном кластеры натрия, а не ксенона, и он какую-то оценку дает, но, тем не менее, эта оценка очень приблизительная. Поэтому в результате для такого рода расчетов мы делали следующую вещь: мы на самом деле использовали термостат для того, чтобы вывести электроны в равновесие, изначально удерживая их в некоторой сферической области вместе с ионами. Потом мы убирали эти внешние граничные условия, выключали термостат и наблюдали релаксацию электронной подсистемы. Потому что так, естественно, гораздо проще строить теоретическую модель, чем когда мы в комплексе рассматриваем очень большое количество процессов – и разлет ионов, и ионизацию, и внутренние процессы ионизации в кластере. Поэтому мы здесь попытались сконцентрироваться именно на задаче кулоновской: классическое взаимодействие электронов с ионами – к каким приводит эффектам? Именно эти эффекты здесь оценивались. И здесь поэтому ионизация ионов для нас фактически – это внешний параметр, так же, как и в случае с треком тяжелого иона, когда мы берем откуда-то, из какой-то другой модели кратности ионизации ионов и потом уже рассматриваем релаксацию.

Пикуз Сергей Алексеевич

Последний вопрос, связанный с теми оценками, которые Вы показываете для температур электронов на уровне единиц электронвольт (этого диапазона), и при этом рассматривается, как я понял, интенсивность на уровне 10^{18} Вт/см².

Морозов Игорь Владимирович

Нет, конечно, при 10^{18} Вт/см² таких температур не может быть, я, возможно, не очень четко это сказал, интенсивности (в нашем случае) максимум до 10^{14} Вт/см², при 10^{18} Вт/см² таких температур, конечно, не будет. Иначе плазма уже будет в достаточной степени идеальная, еще и релятивистская, это, конечно, задача уже не для нашего исследования, но нам это и не было особенно интересно. Нам были интересны именно случаи низкой интенсивности, хотя для практических приложений, конечно, нужны интенсивности и 10^{18} , и даже 10^{23} уже получено. Но в нашем случае, нас интересовала

неидеальная плазма. Для того, чтобы там образовалась неидеальная плазма нужны температуры порядка единиц электронвольт $10^{12} - 10^{14}$, иногда до 10^{15} Вт/см².

Председатель

Уважаемые коллеги, у нас могут быть вопросы еще от тех, кто участвует дистанционно, Виктор Константинович Грязнов поднимал руку. Виктор Константинович, Вы хотите задать вопрос? Виктор Константинович, Вы нас слышите? Пока в процессе (подключения), Владимир Сергеевич, Ваш вопрос.

Филинов Владимир Сергеевич

У меня вопрос по поводу функции распределения по импульсам. Квантовые эффекты: известно, что за счет принципа неопределенности импульс-координата доля быстрых электронов возрастает, из-за этого функция распределения по импульсам имеет немаквелловский хвост. Проверяли ли Вы форму асимптотики Вашей функции распределения – какую она имеет форму? В частности, там $1/p^8$ она должна убывать, то есть гораздо медленнее, чем Максвелл. Это первый вопрос. А второй вопрос – коррелируют ли размеры волнового пакета с тепловой длиной волны электрона в Ваших расчетах.

Морозов Игорь Владимирович

Спасибо. Что касается первого вопроса. Дело в том, что задачи на релаксацию функции распределения для электронов на данный момент мы рассматривали только для метода классической молекулярной динамики, не для метода волновых пакетов. И, естественно, там эти квантовые эффекты не учитываются, поэтому получается, что, наверное, это сравнение и не имело бы смысла.

Филинов Владимир Сергеевич

А почему там завал в области малых скоростей?

Морозов Игорь Владимирович

С моей точки зрения здесь скорее статистическая погрешность, чем какой-то статистически значимый эффект. Любопытно, что Вы обратили на это внимание, я, наверное, не готов ответить, почему здесь он таким образом выглядит. Мы все-таки рассматривали в среднем в пределах этой погрешности (*показывает на слайде*), которая существует статистическая при вычислении этой величины. В пределах этой погрешности результаты сходятся с распределением Максвелла. Отвечая на второй вопрос, я хотел бы сказать, что средняя ширина волновых пакетов действительно оказывается близка к тепловой длине волны электронов. Более того, во многих моделях, там где речь шла об искусственном ограничении ширины волновых пакетов для прекращения их расплывания, авторы этих работ, это Гюнтер Цвикнагель, Топфер, Кнауф, они рекомендовали использовать в качестве этой константы (*показывает на слайде*) тепловую длину волны электронов, то есть изначально предполагается, что, конечно, эти вещи связаны. Единственно, мы показали, что это ограничение вносит слишком существенное влияние этого дополнительного параметра. Так (без ограничения ширины) распределение достаточно сильно варьируется в зависимости от плотности плазмы, но вот здесь

(показывает на слайде) без ограничения ширины волновых пакетов мы видим, что, действительно, здесь ширина нормирована на тепловую длину, и мы видим максимум как раз в районе тепловой длины электронов. То есть, действительно, это вещи естественным образом связанные.

Председатель

Еще раз, кто дистанционно участвует, Виктор Константинович, Вы хотели бы задать вопрос?

Грязнов Виктор Константинович

Я хочу задать вопрос, меня слышно?

Председатель

Да, сейчас слышно.

Грязнов Виктор Константинович

Игорь Владимирович, когда Вы рассматривали обменно-корреляционный член в Вашем варианте метода молекулярной динамики, Вы упомянули два приближения – это приближение Хартри и неограниченный метод Хартри-Фока, но неограниченный метод Хартри-Фока он действительно сильно трудоемкий, но существует промежуточный вариант – это ограниченный метод Хартри-Фока. Имеет ли смысл его применять здесь или это совершенно не стоит внимания?

Морозов Игорь Владимирович

(Повторяет вопрос для аудитории). Я должен пояснить, что мы тут в достаточной степени ограничены в выборе методов теми возможностями по разработке алгоритма, которые у нас есть. То есть разработка алгоритма для нового приближения – это достаточно трудоемкая задача. То, что мы называем «unrestricted Hartree-Fock» (неограниченный Хартри-Фок), выглядит следующим образом. Все электроны делятся на две части изначально. Формально у одной части проекция спина вверх, у другой формально проекция спина вниз. И это распределение не меняется в процессе расчета. Дальше для каждой из этих частей мы отдельно строим такую вот антисимметризованную волновую функцию (показывает на слайде) и решаем задачу уже много частичную с учетом этой антисимметризованной волновой функции. Вычислительная сложность заключается в том, что здесь возникает норм-матрица, то есть, как только мы отказываемся от приближения Хартри, у нас возникает норм-матрица, которую мы должны на каждом шаге рассчитывать и инвертировать, для того чтобы сохранялась норма волновой функции многочастичной. Я не могу в точности ответить, что мы могли бы сделать с методом «restricted Hartree-Fock» (ограниченный Хартри-Фок), но я так понимаю, что эта проблема с расчетом норм-матрицы, она сохранится в любом случае, и именно она вызывает наибольшие проблемы. То есть проблема именно с расчетом норм-матрицы, тем более что там возникают численные неустойчивости очень часто при решении этих уравнений, она (норм-матрица) вырождается, поэтому этот алгоритм действительно достаточно сложный, нужно переменный шаг применять по времени, схему Рунге-Кутты высокого порядка использовать, по крайней мере в тех расчетах, которые мы

проводили. То есть, я так понимаю, что эта проблема с норм-матрицей, она сохранится в любом варианте метода Хартри-Фока. В нашем же варианте основное преимущество было получено за счет того, что мы сохранили исходную функцию Хартри и сохранили эти уравнения движения, как мы их называем, то есть уравнения для зависимости параметров волнового пакета от времени, в неизменном гамильтоновом виде, а отдельно уже каким-то другим методом рассчитывали поправку обменно-корреляционную. Поэтому точно я не могу сказать, но с моей точки зрения, любой метод Хартри-Фока приведет к тем же вычислительным проблемам.

Грязнов Виктор Константинович

Ответ понятен, спасибо!

Председатель

Виктор Константинович, у Вас рука поднята, есть ли еще у Вас вопросы?

Грязнов Виктор Константинович

Нет, все, я руку опустил, спасибо.

Председатель

Анатолий Васильевич Филлипов руку поднял, Анатолий Васильевич Вы готовы задать вопрос?

Филлипов Анатолий Васильевич

Олег Федорович, это случайно.

Председатель

Хорошо, спасибо, кто еще хотел бы задать вопрос? Пожалуйста.

Бриллиантов Николай Васильевич

У меня достаточно потребительский вопрос. Я так понял, что Вы вот эти размазанные волновые пакеты вставляете в молекулярную динамику. Насколько можно этот пакет прикрепить к каким-то стандартным солверам: LAMMPS или еще что-то? Куда это может продвинуться? Собственно, вопрос заключается в том, можно ли на все эти трюки навесить эффективные методы ближайших соседей, все, что используется в современных методах молекулярной динамики?

Морозов Игорь Владимирович

Мы именно по этому пути и пошли. И последняя реализация метода молекулярной динамики с волновыми пакетами сделана на основе пакета LAMMPS. У нас присутствует Ярослав Лавриненко, который в основном занимался этой задачей. Мы действительно полностью интегрировали наш пакет в LAMMPS. Причем это уже не первый раз, когда мы этим занимаемся, метод Хартри-Фока мы тоже интегрировали в LAMMPS, это было лет 10 назад совместно с коллегами из Сандийской национальной лаборатории. Стив Плимптон и другие коллеги, которые являются разработчиками LAMMPS, совместно с ними мы занимались тем, что адаптировали наши методы. Вот этот последний вариант, он

уже очень близок к тому, чтобы быть опубликованным в очередном релизе LAMMPS, хотя этого пока не произошло, там некоторые технические вопросы нужно решить, но действительно, этот метод интегрируется в LAMMPS. Другое дело, что когда мы дальше начинаем использовать алгоритмы LAMMPS для расчета средних и так далее, то некоторые из них нуждаются в модификации, потому что они изначально не учитывают ширины волновых пакетов. Поэтому нам нужен не только солвер, но нам нужно и некоторый набор дополнительной диагностики тоже поменять, то есть это достаточно большая работа. Вот здесь показана (*показывает слайд*) часть тех модулей, которые мы поменяли в LAMMPS. Эта работа продолжается, мы на это и нацелены, потому что метод «Electron Force Field» (силового поля для электронов) уже есть в LAMMPS, мы хотим, чтобы там оказался и наш метод тоже.

Председатель

Хорошо, кто еще хотел бы еще задать вопросы дистанционно или среди здесь присутствующих? Желающих нет, по-видимому, пока вопросы исчерпаны. Тогда мы можем двигаться дальше, и сейчас слово предоставляется Алексею Владимировичу снова. Пожалуйста.

Ученый секретарь

Дорогие коллеги! Диссертация была выполнена в **Объединенном институте высоких температур** (ОИВТ РАН), в списке документов у нас есть заключение Объединенного института высоких температур. Зачитывать подробно описание диссертации, если позволите, я не буду, перейду к заключению: диссертация «Столкновительные и релаксационные процессы в неидеальной электрон-ионной плазме» Морозова Игоря Владимировича рекомендуется к защите на соискание ученой степени доктора физ.-мат. наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы. Подписано заключение секретарем семинара ОИВТ РАН, проводимым под руководством академика РАН Олега Федоровича Петрова, кандидатом физ.-мат. наук, заведующим лабораторией 17.2 Евгением Александровичем Лисиным, утверждено доктором физ.-мат. наук, заместителем директора ОИВТ РАН Андреем Владимировичем Гавриковым.

Кроме того, в деле имеется отзыв **ведущей организации Института общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук (ИОФ РАН)**. Отзыв подписан главным научным сотрудником теоретического отдела ИОФ РАН доктором физ.-мат. наук, профессором Александром Михайловичем Игнатовым, а кроме того, исполняющим обязанности заведующего теоретическим отделом, доктором физ.-мат. наук, профессором Намиком Гусейн-заде Гусейнага оглы, заверен ученым секретарем Ученого совета Стрелковым В.В. и утвержден директором Института общей физики, доктором физ.-мат. наук, членом-корреспондентом РАН Сергеем Владимировичем Гарновым. Отзыв положительный, есть замечания. Кроме замечаний здесь указано достаточно подробно про объем, структуру, актуальность, новизну, практическую значимость. Если позволите, я эти моменты пропущу, мы уже достаточно подробно слушали про диссертацию. Недостатки работы сводятся к следующему:

1. На рисунке 1.1 рядом с кривой ионизации указано «ионизация H_2 », хотя, по-видимому, речь идет об ионизации атома водорода.

2. В разделе 2.4.3 описывается метод расчета автокорреляционной функции тока для внутренней области расчетной ячейки при использовании отражающих граничных условий (жестких стенок). Однако, представленные результаты не дают ответа на вопрос о том, совпадают ли полученные таким способом результаты для статической и динамической проводимости с указанными ранее в разделах 2.1.2 и 2.3.4 результатами для периодических граничных условий.
3. В разделе 3.2, посвященном моделированию плазмы в условиях униполярной дуги, часть рисунков, таблиц и формул содержит концентрацию электронов, измеряемую в обратных кубических сантиметрах, а другая часть – в обратных кубических метрах, что затрудняет сопоставление результатов.
4. В главе 5 среди преимуществ предложенной автором модификации метода молекулярной динамики с волновыми пакетами отмечается возможность исследования неравновесных состояний и релаксационных процессов, при том, что этот метод более точно по сравнению с классической молекулярной динамикой описывает квантово-механические эффекты столкновений частиц и вырождения электронного газа. Однако, в работе отсутствуют примеры, иллюстрирующие применение данного метода к моделированию неравновесной плазмы в той области параметров, где указанные квантовые эффекты являются существенными.

Перечисленные замечания не снижают общей высокой оценки работы. Диссертация представляет собой законченную научную квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным пунктом 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней. Автор заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физ.-мат. наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

Кроме того, в деле присутствует девять отзывов на автореферат, все отзывы положительные, в некоторых есть замечания. Сразу скажу, что все отзывы указывают, что работа соответствует критериям, установленным пунктом 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней и (ее автор) заслуживает присуждения степени. Перейдем к отзывам. Первый отзыв получен из **Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук**. Отзыв составил главный научный сотрудник, доктор физ.-мат. наук, член-корреспондент РАН Виктор Борисович Минцев. Отзыв заверил ученый секретарь Борис Львович Психа. Отзыв положительный, есть замечания:

1. На рисунке 1 приведена зависимость безразмерной электропроводности от параметра неидеальности. При этом экспериментальные данные взяты из теоретической работы 1979 года. Хотя эксперименты по измерению электропроводности неидеальной плазмы проводились и гораздо позже, а их обсуждение приведено, например, в работах Минцев, Фортов 2015 года, Адамс и другие 2007 года.
2. Мне кажется, что полнота работы несколько теряется отсутствием расчетов отражательной способности неидеальной плазмы, хотя разработанный автором подход позволяет это сделать.

Если позволите, весь отзыв, описывающий диссертацию, зачитывать не буду и пропущу это в следующих отзывах, остановлюсь только на замечаниях.

Следующий отзыв получен из **Института электрофизики Уральского отделения**

Российской академии наук от доктора физ.-мат. наук, старшего научного сотрудника, главного научного сотрудника лаборатории нелинейной динамики Института электрофизики Николая Борисовича Волкова. Подпись заверена ученым секретарем института Еленой Евгеньевной Кокориной. Отзыв положительный замечаний нет.

Следующий отзыв на автореферат получен из **Московского физико-технического института** от профессора кафедры теоретической физики, доктора физ.-мат. наук Владимира Павловича Крайнова. Подпись заверена ученым секретарем Ученого совета МФТИ Евгением Григорьевичем Евсеевым. Отзыв положительный, есть замечание:

1. В четвертой главе описаны исследования динамики электронов в кластерной наноплазме, образующейся в результате облучения наноразмерных кластеров фемтосекундным лазерным импульсом. На странице 19 автореферата приведена формула 6 для внешней ионизации кластера фемтосекундным лазерным импульсом. Согласно этой формуле, заряд кластерного иона пропорционален радиусу кластера. Однако согласно нашей работе: Крайнов, Смирнов, Physics Reports, 2002 года, зависимость заряда кластера от его радиуса при внешней ионизации лазерным импульсом носит более сложный характер.

Отзыв положительный.

Следующий отзыв получен из **Института прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук** от доктора физ.-мат. наук, главного научного сотрудника Николая Васильевича Змитренко. Подпись заверена ученым секретарем Института прикладной математики Александром Александровичем Давыдовым. Отзыв положительный, замечаний нет.

Следующий отзыв получен из **Московского государственного университета им. М.В. Ломоносова», физический факультет** от профессора кафедры общей физики и волновых процессов физического факультета МГУ Андрея Борисовича Савельева-Трофимова. Подпись автора отзыва заверена деканом физического факультета (МГУ) профессором Владимиром Викторовичем Белокуровым. Отзыв положительный, замечаний нет.

Следующий отзыв получен из **Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»** от доктора физ.-мат. наук, начальник отдела моделирования физических процессов и прикладных технологий Юрия Юрьевича Клосса. Отзыв положительный, без замечаний.

Следующий отзыв получен из **Института нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук** от главного научного сотрудника, доктора физ.-мат. наук Юрия Анатольевича Лебедева. Подпись заверена ученым секретарем Института. Отзыв положительный, без замечаний.

Следующий отзыв получен из **Казахского Национального университета им. Аль-Фараби** от профессора кафедры физики плазмы, нанотехнологии и компьютерной физики физико-технического факультета Национального университета им. Аль-Фараби Тлеккабула Сабитовича Рамазанова. Отзыв заверен ученым секретарем. Отзыв положительный, имеются замечания:

1. Используемый в работе псевдопотенциал имеет кулоновскую асимптотику на

больших расстояниях, вследствие чего для расчета энергии системы желательно применять процедуру Эвальда, а метод ближайшего образа требует дополнительного обоснования.

2. Во второй главе в уравнение движения добавлена сила со стороны некоторого среднего поля для компенсации зарядов, хотя данную функцию успешно могут решать периодические граничные условия, которые также присутствуют в схеме моделирования.
3. Интересные результаты по динамике наноплазмы (глава 4) получены в рамках классической механики, которая, по-видимому, не является достаточной для описания такой системы, в частности, для учета связанных электронов.

Отзыв положительный.

Следующий отзыв получен из **Российского федерального ядерного центра Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики** от главного научного сотрудника доктора физ.-мат. наук Бориса Андреевича Надыкто. Подпись Бориса Андреевича заверена ученым секретарем. Есть замечание:

1. Известно, что на поведение ударных адиабат существенное влияние оказывает диссоциация и ионизация материалов. Классическим примером этого является ударная адиабата водорода. Из текста реферата не ясно, каким образом учитывается это влияние.

Отзыв положительный. На этом отзывы на автореферат, (отзыв) ведущей организации и организации, где выполнялась работа, закончены.

Председатель

Спасибо, Алексей Владимирович! Теперь слово Игорю Владимировичу для ответа на замечания. Пожалуйста.

Морозов Игорь Владимирович

Я начну с замечаний ведущей организации и проиллюстрирую свои ответы некоторыми слайдами. Первое замечание оно касается действительно опечатки: речь идет про ионизацию H, а не про ионизацию H₂ (*показывает на слайде*).

Следующее замечание касается расчета автокорреляционной функции тока, когда мы использовали внутреннюю область ячейки для расчета этих автокорреляторов. Я не останавливался на этом в своем докладе, но действительно такая работа была проведена. Как правило автокорреляционная функция (рассчитывалась), и так было для всех предыдущих расчетов, для полного тока системы. Здесь мы рассматривали автокоррелятор тока внутри некоторой выделенной подъячейки (*показывает на слайде*) и показали, что в этом случае результат не зависит от того, какие мы выбираем граничные условия: периодические или отражающие стенки. Однако для того, чтобы сопоставить этот результат с автокоррелятором полного тока, допустим, в том случае, когда мы рассматриваем систему с дополнительным полем, то есть чтобы получить вот такой спектр автокоррелятора (*показывает на слайде*), для этого нам недостаточно было того размера системы, который мы использовали, и мы рассчитываем, что в пределе больших систем – и внешней системы, и внутренней области – согласие можно получить, но на тот

момент вычислительные возможности просто не позволили нам этот предел выполнить и подтвердить эту гипотезу. Поэтому, скорее всего да, но это требует дополнительного обоснования.

Вопрос про сантиметры и кубические метры – я с ним (с замечанием) согласен, действительно это не очень удобно для сравнения.

Дальше вопрос о том, что мы действительно много говорим о преимуществах метода молекулярной динамики и классической, и волновых пакетов для исследования неравновесных систем, но не приводим там результаты. Дело в том, что на момент написания диссертации эти результаты были, но они были в достаточной степени предварительные, однако эту работу мы продолжаем, и я могу показать некоторые новые результаты, которые были представлены на сессии по неидеальной плазме, где мы действительно рассчитали эффективное время релаксации электронов и ионов в зависимости от (параметра неидеальности) Γ уже с помощью волновых пакетов (*показывает на слайде*). Любопытно, что на данный момент мы не обнаружили сильного отклонения от случая классической плазмы, хотя здесь мы выходим опять же несколько за границу вырождения электронов, то есть эти результаты имеют несколько иной характер, чем результаты для проводимости. Поэтому такая работа ведется, но на момент написания диссертации опубликованных результатов на эту тему не было, поэтому я их в работу не включил.

Перехожу к замечаниям на автореферат. Замечание Виктора Борисовича Минцева действительно совершенно справедливо. Здесь (*показывает на слайде*) показаны далеко не все экспериментальные данные и далеко не все теоретические модели. Мы попробовали включить эти данные, на которые Виктор Борисович ссылается. Это и эксперименты Николая Сергеевича Шилкина, где у них с помощью эффекта Холла оценивалась концентрация электронов, и эксперименты Виктора Борисовича. Они, к сожалению, имеют достаточно большой разброс. Их можно нанести на этот график, но мы видим, что принципиально на выводы из сравнения с экспериментом, наверное, эта картина не повлияла. Хотя я согласен, действительно, эти результаты здесь были бы уместны, и их обсуждение должно продолжаться.

По поводу отсутствия выводов по отражательной способности неидеальной плазмы. Действительно, рассчитывая динамическую проводимость, мы можем получить диэлектрическую проницаемость, зависящую от частоты, соответственно, коэффициент преломления, и использовать эти данные для оценки отражательной способности плазмы, которая очень важна, например, для интерпретации экспериментальных данных по ударным волнам в газах – она используется для диагностики. Эти работы мы проводили еще на этапе написания моей кандидатской диссертации совместно с группой Виктора Борисовича и группой Ростокского университета. Мы показали, что очень большое значение для описания экспериментов имеет профиль электронной плотности на фронте ударной волны. Дальше эти работы были продолжены уже в работах Юрия Борисовича Запорожца и коллег как из Алма-Аты, так и из Ростка, где это сравнение, оно действительно развивалось. Дело все в том, что для того, чтобы эту модель, которую мы построили для диэлектрической проницаемости, применить для оценки отражательной способности, нам недостаточно отдельных точек, нам нужна зависимость

диэлектрической проницаемости от плотности, то есть концентрации электронов, и температуры в достаточно широких пределах. Поскольку на момент написания этой работы такой зависимости не было, а ее дальше мы должны вставить в решение уравнения Гельмгольца, чтобы определить отражение с учетом нерезкого фронта. Эта работа действительно пока не была сделана, хотя я считаю, что это замечание справедливо и в этом направлении действительно нужно двигаться. То есть эти (наши) расчеты они могут позволить получить результат для отражательной способности.

Дальше замечание Виктора (эта оговорка, правильно – Владимира) Павловича Крайнова относительно зависимости заряда кластера от радиуса. Дело в том, что следует различать два режима внешней ионизации электронов. Первый из них, о чем, собственно, говорит Владимир Павлович, связан с ионизацией лазерным импульсом, то есть, когда за счет поля лазерной волны происходит раскачка электронов в кластере и часть из них удаляется из кластера. Это, в частности, на одном из первых слайдов, вводных по этой теме, было показано. В этом случае, действительно, гораздо более сложный вид имеет зависимость заряда конечного кластера от амплитуды поля, его частоты и свойств самого кластера. Мы же рассматриваем другой процесс, мы рассматриваем термоэмиссию электронов в отсутствии поля лазерной волны. Это больше применимо, естественно, для лазеров меньшей интенсивности, которая нас и интересовала. Этот случай, надо сказать, тоже рассмотрен в работах Владимира Павловича и Михаила Борисовича Смирнова, и у них предлагалась такая зависимость (*показывает на слайде*), но у них не учитывались те эффекты, о которых я говорил – это снижение температуры за счет эмиссии электронов. Действительно, этот эффект является достаточно важным, и в рассмотренном нами диапазоне параметров эта зависимость (полученная в работах В.П. Крайнова и М.Б. Смирнова), по-видимому, должна быть модифицирована. В диссертации Романа Быстрого достаточно подробно описывается теоретическая модель, которая позволяет описать термоэмиссию кластеров с учетом размерных эффектов.

Перехожу к замечаниям Тлеккабула Сабитовича Рамазанова. Первый из них касается применения схемы Эвальда и граничных условий. Поскольку этот вопрос затрагивается в некоторых других отзывах, то я чуть подробнее на нем остановлюсь. У нас возможны несколько вариантов граничных условий в молекулярной динамике (*показывает на слайде*). В некоторых случаях граничные условия вообще не требуются, как, допустим, для кластерной наноплазмы. Однако, для рассмотрения пространственно однородной плазмы они действительно нужны, и в данном случае у нас в общем есть два варианта: это отражающие стенки и периодические граничные условия. При этом здесь есть некоторые подварианты. Стенки могут быть более жесткими или относительно мягкими, с применением, допустим, параболического потенциала, и для периодической системы может использовать метод ближайшего образа и схема Эвальда, которая также, на самом деле, имеет несколько вариантов. Я должен сказать, что, вообще говоря, ни один из этих способов решения проблемы с границами не является универсальным, каждому из них присущи определенные недостатки. Вопрос применения отражающих стенок достаточно подробно исследовался в нашей совместной работе с Ярославом Сергеевичем Лавриненко. И мы показали, что сходимость внутренней энергии плазмы с ростом числа частиц происходит гораздо быстрее для метода периодических граничных условий (*показывает на слайде*). Хотя и в случае стенок также мы можем получить сходимость примерно к той

же самой величине. Кроме того, стенки они нехороши тем, что они вызывают возбуждение дополнительных мод электронных колебаний, и это также отмечается в работах других авторов. Что касается схемы Эвальда, то она действительно применяется многими авторами, но с нашей точки зрения для тех систем, которые мы рассматриваем, ее применение избыточно. Она очень оказывается полезной для задач однокомпонентной плазмы, где рассматривается, например, кристаллизация ионной подсистемы. Там действительно схема Эвальда необходима, так как там возникает дальний порядок ионов, и она позволяет значительно уточнить результат, не увеличивая сильно расчетную ячейку. В данном случае, с нашей точки зрения, поскольку система является неупорядоченной, в общем-то схема Эвальда является избыточной. И мы проводили сравнение с расчетами группы Гюнтера Цвикнагеля для одной и той же системы: мы рассчитывали систему с применением и без применения схемы Эвальда, и мы показали, что сходимость результатов наступает гораздо быстрее, чем сходимость, если мы рассматриваем (сравниваем) отражающие стенки и периодические условия (*показывает на слайде*). Для тех стандартных значений количества частиц, а это несколько сотен, которые обычно применяются при (параметре неидеальности) Γ порядка единицы, у нас получается очень хорошее в пределах ошибок совпадение (результатов) с применением и без применения схемы Эвальда. Поэтому она может здесь применяться, но с нашей точки зрения это большого смысла здесь не имеет. Кроме того, некоторые авторы отмечают, что это может вносить и дополнительную погрешность из-за искусственного введения периодичности.

По поводу добавления среднего – о том, что оно соответствует расчетам в периодических граничных условиях. Здесь я позволю себе не согласиться с этим замечанием. Потому что как раз основной наш результат заключается в том, что введение среднего поля принципиально меняет характер автокорреляционной функции тока, то есть мы переходим от поперечной к продольной проводимости и, соответственно, диэлектрической проницаемости. Этот эффект есть, он наглядно показан, и он связан с тем, что в периодической системе, как я уже говорил, сдвиг всех электронов относительно ионов не приводит к появлению возвращающей силы, то есть колебания на уровне всей ячейки отсутствуют при $k = 0$ (*показывает на слайде*). Мы их здесь искусственно добавили, мы их можем наблюдать, и соответствующим образом нам приходится модифицировать это выражение.

Третье замечание про то, что квантовые эффекты необходимы для описания кластерной наноплазмы. На это вопрос я уже отвечал. Действительно, они там могут иметь значение. Они очень важны для процесса начальной ионизации, но мы этот процесс не рассматриваем. И они могут быть важны при низких температурах или при больших временах, когда происходит разлет кластера и рекомбинация электронов. Действительно, мы эти эффекты здесь учитываем приближенно. Здесь было бы полезно применить метод молекулярной динамики с волновыми пакетами, но, как нам кажется, при рассмотренных параметрах в целом молекулярной динамики классической оказалось достаточно. При низких температурах этого было бы недостаточно.

Замечание Бориса Андреевича Надыкто касается диссоциации: учитываем ли мы эффекты диссоциации? Как я уже говорил, мы остаемся в рамках физической модели плазмы – мы не рассматриваем молекулы как какой-то отдельный сорт частиц, и поэтому процессы ионизации и диссоциации у нас автоматическим образом учитываются. Если вернуться к

этой ударной адиабате (*показывает на слайде*), про которую говорит Борис Андреевич, то действительно, посмотрев на структуру (распределение частиц в ячейке) или на парную корреляционную функцию ионную, можно видеть, что она претерпевает значительные изменения в процессе сжатия и нагрева дейтерия. Из этого можно сделать, естественно, вывод о наличии здесь диссоциации, но она не вводится каким-то отдельным образом, она естественным образом получается из численной модели, то есть этот эффект безусловно учитывается.

Все, вроде бы я ответил на все замечания.

Председатель

Спасибо, Игорь Владимирович! Теперь мы переходим к выступлениям оппонентов. Первым у нас слово предоставляется Потехину Александру Юрьевичу. Пожалуйста.

Потехин Александр Юрьевич

Диссертация Игоря Владимировича Морозова посвящена теоретическому исследованию неидеальной умеренно вырожденной неидеальной плазмы. Об актуальности в этой аудитории, я думаю, не надо распространяться. Содержание диссертации было тоже достаточно широко, подробно и хорошо освещено в докладе Игорем Владимировичем в своем выступлении и ответах на вопросы, и на замечания к автореферату, поэтому я не буду зачитывать ту часть отзыва, которая посвящена описанию собственно диссертации. Скажу лишь о своих впечатлениях очень положительных от этой работы. Во-первых, она сделана очень последовательно и скомпонована очень грамотно. Здесь последовательно рассматриваются равновесная плазма, неравновесная (плазма), неоднородная (плазма), нанокластеры, то есть широта охвата достаточно впечатляющая. Достаточно хорошо можно судить о достоверности полученных результатов, потому что правильно и корректно использована методология, новые методы. Новые методы здесь тоже описывались, в частности, мне очень понравилось введение ряда волновых пакетов для описания электронов с целью уточнения метода описания плазмы, то есть некоторого учета квантовых эффектов при моделировании методами классической молекулярной динамики. И достоверность проверяется как хорошо известными теоретическими методами путем изменения параметров, сравнения различных пределов, так и сравнением результатов, которые получаются методами, предложенными в данной работе с результатами, известными из литературы для ряда модельных задач. Как я уже сказал, я описание диссертации пропускаю, которое в моем отзыве присутствует достаточно развернуто. Перейду для экономии времени сразу к замечаниям. Хочу сказать, что эти замечания относятся скорее к представлению результатов, чем к содержанию.

1. Первое замечание, это то, что при обсуждении результатов расчета статической проводимости в диссертации приведены лишь результаты экспериментов 1970-х - 1980-х годов, но не более поздние. Насколько я понял сейчас, это замечание по сути совпадает с замечанием Виктора Борисовича Минцева, на которое Игорь Владимирович уже дал очень развернутый и убедительный ответ.
2. Второе (замечание), которое возникло в ходе обсуждения диссертации на нашем семинаре в секторе теоретической астрофизике Физико-технического института им. Иоффе, состоит в том, что в разделе 4.1 недостает оценки влияния магнитного поля на

движение электронов плазмы при воздействии коротких лазерных импульсов на кластерные мишени. Магнитное поле там, по-видимому, присутствует.

3. Третье замечание тоже к изложению относится скорее и к рисунку. Здесь в тексте отзыва я сам ошибся: написано во введении, а надо было написать в обзоре литературы. Но тоже это перекликается с первым замечанием. Когда речь идет о теоретических исследованиях однокомпонентной плазмы, то приводятся результаты работ достаточно старых и аппроксимации соответствующие. Замечание состоит в том, что имеются некоторые уточнения, которые уже после 1990 года были сделаны. И в частности, например, для модели однокомпонентной плазмы классической без учета экранирования параметр неидеальности, при котором происходит плавление, равен оказывается 175, а не 178, как в этих более старых работах. Но из сопоставления этих двух чисел Вы видите, что здесь ни о каком качественном прорыве речи не идет, это замечание касается мелких уточнений, которые не отражены в обзоре литературы.
4. Дальше тоже в описательной части, когда речь идет о квантово-механических исследованиях, речь идет только об электронах, хотя в качестве возможного применения результатов диссертации справедливо Игорь Владимирович указывает, что они могут применяться и для астрофизических задач, для астрофизических объектов. А в астрофизике, в частности, в оболочках компактных звезд квантово-механические эффекты возможны и для ионов также, не только для электронов, и они там могут играть некоторую заметную, не скажу, что очень существенную, но заметную роль, если состав этих оболочек, скажем нейтронных звезд, или недр белых карликов состоят из сравнительно легких элементов, таких как гелий. А работы на этот счет имеются, поэтому в обзоре можно было бы тоже их упомянуть.

Хочу подчеркнуть, что очень приятно было читать эту диссертацию, она очень хорошо написана, грамотно. Я на самом деле попытался найти языковые погрешности, их упомянул в качестве пятого замечания, но это скорее придирки, которые на суть диссертации никоим образом не влияют. И должен подчеркнуть, что их удивительно мало.

Таким образом, все эти замечания являются незначительными и не снижают общей высокой оценки диссертации, которая полностью соответствует всем требованиям, и ее автор Игорь Владимирович Морозов несомненно заслуживает, на мой взгляд, присуждения искомого звания (ученой степени) доктора физико-математических наук. Хочу добавить, что 15 ноября Игорь Владимирович у нас выступал на семинаре, как я уже упомянул, и в результате этого выступления было абсолютно единодушное мнение, совпадающее с только что сформулированным, что вполне это очень хорошая докторская диссертация, и автор заслуживает этого звания (ученой степени). И более того, когда я за неделю до того делал объявление о предстоящем выступлении Игоря Владимировича, то некоторые участники семинара, уточнив, тот ли это Морозов, и получив утвердительный ответ, были удивлены, что он еще не доктор физико-математических наук. Спасибо за внимание.

Председатель

Спасибо! Особенно завершающие слова для Игоря Владимировича, я думаю, особый эффект (имеют). Игорь Владимирович, Вам слово для ответа на замечания.

Морозов Игорь Владимирович

Я, конечно, хотел бы поблагодарить Александра Юрьевича за внимательное ознакомление с работой и, действительно, я по большому счету вынужден с этими замечаниями согласиться.

По поводу сравнения с результатами по проводимости, действительно, я уже отвечал.

По поводу влияния магнитного поля на кластерную наноплазму. Действительно, если рассматривать взаимодействие непосредственное лазерного импульса с кластерной наноплазмой, я тут сейчас покажу картинку, на которую мы, в частности, ориентировались как на мотивацию (*показывает слайд*), когда у нас один импульс ионизует систему, а другой может резонансно поглощаться на электронах, то в этом случае, конечно, взаимодействие лазерного поля с плазмой нужно учитывать и с учетом магнитного поля. Но я бы даже сказал, что здесь и не очень подходит метод классической молекулярной динамики, здесь подошел бы больше метод Particle-in-cell для описания этих процессов, уже комплексных. Мы старались в данном случае рассмотреть, не то, что происходит во время этих вот импульсов (*показывает на слайде*), а то, что происходит между ними, то есть как эволюционирует плазма, будучи уже ионизованной и каким-то образом нагретой. То есть в данном случае мы подробно не рассматривали ни процесс ионизации, ни процесс, допустим, резонансного поглощения второго лазерного импульса, где магнитное поле было бы важно. Поэтому да, действительно, в этой модели его нет, но нам кажется, что тем не менее этот результат имеет значение и без учета магнитного поля.

Я действительно прошу прощения, что я не учел некоторые работы довольно многих авторов, связанные с развитием теории для неидеальной ионной подсистемы, и вот здесь, как вы видите на этом слайде (*показывает слайд*), указано уже правильное значение параметра неидеальности, при котором происходит кристаллизация (ионов). У меня было в диссертации 178.

И, конечно, я согласен с тем, что при более высоких плотностях происходит уже вырождение ионной подсистемы, и эти процессы достаточно схожи, поэтому мне в обзоре литературы стоило бы учитывать применение, в частности метода Монте-Карло с интегралом по траекториям, и для ионной подсистемы, о чем нам, кстати, две недели назад очень интересный доклад представил Андрей Игоревич Чугунов на семинаре теоретического отдела. Да, эта часть оказалась у меня в обзоре литературы не освещена.

И я, естественно, благодарен Александру Юрьевичу за найденные погрешности в тексте. Соглашусь с этими замечаниями.

Председатель

Игорь Владимирович, спасибо! Мы переходим к заслушиванию следующего оппонента. Брантов Андрей Владимирович, пожалуйста, Вам слово.

Брантов Андрей Владимирович

Хотелось бы отметить, что диссертация очень хорошая. Мне очень понравилась диссертация. В основном описывается неидеальная плазма, вычислена проводимость неидеальной плазмы. Я когда-то сам занимался диэлектрической проницаемостью,

посчитал диэлектрическую проницаемость для классической идеальной плазмы от столкновительного для бесстолкновительного предела, и хотели такую же сделать интерполяцию для неидеальной плазмы от столкновительного параметра (ν) провести. Но оказалось, что там надо бесконечную систему уравнений Боголюбова решать, это было просто нереально. А здесь вот это сделано в диссертационной работе с помощью молекулярной динамики. Поэтому очень хорошая работа. Но сразу перейду к замечаниям:

1. С помощью молекулярной динамики вычисляется как раз диэлектрическая проницаемость и проводимость. Постулируется, что она вычисляется через корреляционную функцию тока. В то же время я не занимаюсь молекулярной динамикой, поэтому мне казалось более естественным приложить малое возмущение электрического поля, посчитать токи и вычислить соответствующую статическую проводимость. Почему выбран именно такой метод, это никак в диссертационной работе не аргументировано и не описано.
2. Второе замечание касается описания релаксационных процессов и влияния ионов на релаксационные процессы. Во всех расчетах либо ионы считались неподвижными, либо (использовались) ионы с модельной массой почти в 20 раз меньше реальной, хотя известно, что релаксационные процессы, если мы учитываем электрон-ионные столкновения, они зависят от массы ионов. Поэтому там перенормировка используется, но было бы полезно хотя бы с другой массой ионов провести несколько расчетов, чтобы показать, что эта перенормировка действительно работает.
3. Третье замечание здесь уже озвучивалось. Оно касается учета характерных энергий (потерь энергии), связанных с излучением плазмы.
4. Четвертое замечание касается задачи о формировании двойного слоя, где рассматривается квазинейтральная плазма, граничащая с металлом. Но реально эта плазма создается в результате эмиссии электронов из металла, поэтому и металл получается заряженный, и, соответственно, плазма, которая образуется, она тоже заряженная. Никаких комментариев по этому поводу в диссертации тоже нет.
5. Пятое замечание касается оформления диссертационной работы, где встречается очень много опечаток. Также есть несколько неудачных предложений и очень неудачно расположены рисунки: они обычно расположены очень далеко от места, где они описываются, и поэтому очень тяжело читать сам текст.

Отмеченные недостатки не умаляют достоинств диссертационной работы, оценивая которую в целом, следует отметить, что она выполнена на высоком научном уровне и демонстрирует определяющий личный вклад соискателя в разработку обсуждаемых проблем. Полученные результаты, относящиеся к теме диссертации, опубликованы в 27 статьях в ведущих мировых рецензируемых журналах, докладывались автором лично на многих российских и международных конференциях. Работа соответствует всем требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, а ее автор заслуживает присуждения ему искомой ученой степени по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

Председатель

Андрей Владимирович, спасибо! Теперь слово Игорю Владимировичу для ответа на замечания.

Морозов Игорь Владимирович

Андрей Владимирович, спасибо за внимательное чтение работы. Первое замечание касается расчета проводимости. Действительно, метод расчета автокорреляционной функции тока и проводимости на основе формулы Кубо, фактически, на основе теории линейной реакции широко используется в молекулярно-динамических расчетах, в том числе и в работах других авторов, поэтому я подробно на нем не останавливался. Теоретически мы могли бы напрямую рассчитывать проводимость, вводя возмущающее поле и смотря, какой оно вызывает ток. Такие работы на самом деле тоже есть, примером является работа Пфальцнер, Гиббон 1998 года. Но там возникает проблема, что плазма начинает греться. Когда вы вводите внешнее возмущающее поле, у вас растет температура плазмы, и вам достаточно сложно рассматривать в этом смысле такую систему при определенной температуре. При этом, если это возмущающее поле маленькое, то и эффект очень маленький, и его очень сложно заметить, то есть отклик тока получается очень маленький. Если у вас очень большое поле, то у вас возникает и очень большой нагрев плазмы. С этим надо как-то бороться – вводить термостаты, которые портят равновесное распределение частиц по скоростям. Поэтому, действительно, общепринятым является метод расчета на основе теории линейного отклика, который, кроме того, позволяет проводить усреднение по времени, предполагая, что система является эргодической. И он здесь действительно наиболее удобен, хотя другие методы тоже существуют.

Второе замечание касается массы ионов. Дело в том, что в общем-то использование ионов с модельной массой встречается в работах не только наших, но и других авторов, например группы Майкла Мурилло. И вопрос зависимости от массы ионов достаточно подробно обсуждался еще в моей кандидатской диссертации для неидеальной плазмы и в наших последующих работах, в частности и для потенциала Леннарда-Джонса. Мы показали, что зависимость от массы ионов в общем случае степенная (*показывает слайд*). Она достаточно хорошо выполняется в широком пределе. Есть некоторые отклонения показателя степени от единицы, но они на самом деле невелики и находятся близко к величине погрешности. То есть с достаточно хорошей точностью можно сказать, что скорость релаксационных процессов действительно линейно зависит от отношения ионной массы (к массе электронов). Хотя в некоторых случаях мы использовали реальные массы. Например, когда мы изучали разлет ионов, я не останавливался подробно на этих результатах, так как они не являлись основной задачей этой работы, но там действительно разлет ионов и вот эта анимация, которую Вы видите (*показывает слайд*), она сделана с реальным соотношением масс для натрия, так как в основном мы рассматривали здесь кластеры натрия.

Теперь по поводу потерь на излучение я уже ответил, это было в вопросе Сергея Алексеевича.

Дальше речь идет об эмиссии электронов из металла. Да, действительно, мы здесь не рассматривали эмиссию электронов из металла. В общем-то мы достаточно много процессов не рассматривали: мы не рассматривали и эрозию металлической поверхности, то есть, это такая очень ограниченная модельная задача, которая имела вспомогательный характер. У наших американских коллег, с которыми мы вместе эту работу делали, был код Particle-in-cell, который моделировал уже на больших временах процессы,

происходящие в этой плазме, и нам нужно было для этого кода определить ряд параметров, таких как, например, ширина двойного электронного слоя без учета изначального заряда металла. Вот такая модельная задача решалась. Действительно это по многим критериям не очень точно соответствует реальной модели, то есть тут действительно нужно добавлять дополнительные процессы, чтобы сравнить ее непосредственно с экспериментом.

И последнее, что касается опечаток, то действительно Андрей Владимирович их нашел немало, я с этими замечаниями согласен. Некоторые опечатки довольно забавные (*показывает слайд*).

Председатель

Спасибо! Мы переходим к следующему выступлению оппонента. Николай Васильевич Бриллиантов, пожалуйста.

Бриллиантов Николай Васильевич

Уважаемые коллеги, я слежу за работой группы Генри Эдгаровича Нормана последние 25 лет. 25 лет назад мы встретились с Генри Норманом в группе профессора Эбелинга, и с тех пор более-менее я отслеживаю, что происходит в этом русле. В общем, должен сказать, что все время я отмечал хороший международный уровень. То есть, во-первых, международный уровень техники: работы всегда очень техничны, используют самые последние численные продукты, последние теоретические продукты, это все удачно комбинируется, и, что очень важно, исследуются интересные эффекты, то есть это хороший международный уровень. В общем очень приятно было читать диссертацию. Я отмечаю, что как 25 лет назад мы с Генри встретились у Эбелинга, и все это время был хороший такой поддержан, хороший – наверное, неправильное слово, передовой (уровень). То есть, действительно, люди идут на фронте вот этих всех исследований. Поэтому я с удовольствием согласился реферировать диссертацию, поскольку я уже практически предвкушал, что будет что-то интересное, хорошее и полезное для меня. Так и оказалось. В общем, я изучил диссертацию с большой для себя пользой. Ни в чем не разочаровался. Диссертация действительно выполнена на хорошем международном уровне, подчеркиваю. Задачи поставлены интересные, то есть нанокластеры или двойной электрический слой, кулоновский взрыв, все такое очень задевающее за живое, что называется. Очень хорошая техника, передовая техника, я кое-чему новому там научился. Сама по себе техника волновых пакетов, мне кажется, это будущий день в ближайшее время, поскольку в LAMMPS работают тысячи, а может быть, даже десятки тысяч человек, и это такой продукт, который в принципе может дать (возможность), скажем так, не очень квалифицированному человеку на нем считать. У него огромная производительность. И вот внесение в LAMMPS каких-то новых пакетов, что сделано в том числе Игорем, мне кажется это вообще очень большой, скажем так, научный вклад в мировую науку без всяких преувеличений. То есть я, например, сфотографировал и потом, конечно, у Игоря отдельно возьму, я думаю, что я этим буду пользоваться в будущем, поскольку это такая очень удобная вещь. Это первое. Второе, что я должен сказать, что сама по себе, наверное, я тривиальные вещи скажу, неидеальная плазма – это дело очень неблагодарное. Там трудно получить что-то яркое, несмотря на то, что кулоновский взрыв

я нахожу как яркий эффект. Но в принципе, если человек думает о наукометрии, а нас сейчас всех заставляют думать о наукометрии, то исследования в этой области очень трудно опубликовать в (журнале) «Nature», скажем. Просто потому, что домохозяйка не поймет, что сделано. Скажем, если вы будете изучать какое-то расположение гусей в пространстве, то, пожалуйста, вы пойдете легко и в «Nature», и в «Nature group». У вас будет больше шансов, чем (если) делать что-то солидное, классическое в плазме. То есть человек действительно серьезно не занимался тем, что бегал за какими-то наукометрическими индексами, а делал серьезную фундаментальную науку. Это вызывает большое уважение. Ну и как положено, я должен, конечно, в эту бочку меда кинуть ложку дегтя. То есть у меня в принципе есть, как я уже сказал, общее впечатление от диссертации очень положительное. Мои замечаний никоим образом не подрывают это общее впечатление. Да, я сделал 10 замечаний, я не собираюсь их зачитывать Вам, потому что, во-первых, Игорь мне ответил в предварительных беседах, он мне объяснил. Какие-то замечания следовали просто из непонимания текста. Тем не менее, я некоторые замечания прочитаю, потому что, мне кажется, что, отвечая на эти замечания Игорь еще раз раскроет некоторые особенности своей работы. То есть это будет полезно для присутствующих коллег. Автор покажет еще какие-то особенности своей работы.

1. Рисунок 2.9 убедительно показывает равенство продольной и поперечной частоты столкновений, что отвечает длинноволновому режиму. Автору следовало бы оценить границу размеров вычислительной ячейки, которая дает длинноволновой предел. Будут ли частоты отличаться для меньших размеров? Не является ли полученный результат следствием компенсации ошибок или других эффектов? Вопрос, действительно, что такое длинноволновой предел? Это что-то должно быть очень большое, да? Ясно, что это начнет работать с некоторого размера вычислительной ячейки. Это не обсуждается, это было бы интересно узнать.
2. Несколько неясен вывод о совпадении динамической проводимости для случая ПГУ и ОГУ. Следует ли из этого заключение, что данные методы хорошо аппроксимируют проводимость бесконечной термодинамически большой системы? Дело в том, что существующие длинные гидродинамические хвосты автокорреляционных функции требуют достаточно продолжительного интегрирования для получения низкочастотных значений проводимости. Для этого необходима достаточно большая вычислительная ячейка и использование ПГУ не решает проблему. Исследовал ли автор зависимость динамической проводимости от размера вычислительной ячейки? Опять в принципе тот же самый вопрос. Мы знаем, что есть гидродинамические хвосты, которые головная боль для всех вычислителей, поскольку гидродинамический хвост от затухает как время в степени $3/2$, и значит, чтобы получить аккуратный интеграл надо долго интегрировать. А долго интегрировать – значит вы должны иметь с учетом каких-то граничных условий, еще каких-то, периодических или непериодических, большую ячейку. Как эти хвосты убить, чтобы они не мешали и давали достаточно точный результат. Вот это тоже интересный вопрос, хотелось бы на него услышать ответ.
3. Дальше, вопрос, который меня весьма беспокоит. Из описания модели приповерхностной электрон-ионной плазмы не понятно, использовались ли заряды изображения, наведенные заряды, по-моему, похожий вопрос был у предыдущего

оппонента, отвечающие металлическому полупространству? И если нет, то почему? Необходимо привести соответствующее объяснение. Игорь мне дал какие пояснения, но я думаю, что это важный, как мне кажется, вопрос – как учитывать заряды-изображения? Поскольку при учете зарядов-изображений часто все симуляционные преимущества ломаются. Как человек это обошел? Интересно узнать, как.

4. Следовало бы более подробно описать процесс разрушения ионной решетки, в том числе сам механизм разрушения? Происходит ли равномерное по объему набухание вещества или послойное испарение? Тоже я не понял это из диссертации. Было бы интересно, чтобы Игорь ответил на это детально. Собственно, остальные вопросы не являются интересными для широкого круга исследователей, поэтому я их опускаю, они просто есть в моем отзыве и не являются ключевыми.

Подводя итог, скажу, что это хорошая добротная работа. И такую хорошую добротную работу можно было бы (ее защиту) в хорошем европейском университете услышать, скажем, в Германии или во Франции, поскольку в других странах докторские диссертации не защищают. Так что я считаю, что доктор Морозов вполне заслуживает того, чтобы стать доктором наук, и жду от него ответов на мои вопросы. Спасибо за внимание.

Председатель

Спасибо, Николай Васильевич! Слово Игорю Владимировичу, пожалуйста.

Морозов Игорь Владимирович

Николай Васильевич, большое спасибо за подробные комментарии. Я тогда отвечу в основном на те вопросы, которые прозвучали. Я начну по порядку. Речь шла сначала про линейные размеры системы, при которых мы можем считать, что длинноволновый предел является применимым. Я вернусь, пожалуй, к слайду, который я показывал, когда я сравнивал различные типы граничных условий. Этот слайд немножко о другом, но он показывает на самом деле размеры системы (*показывает слайд*). По большому счету наша ячейка должна быть не меньше, чем удвоенный эффективный радиус экранирования в плазме. Другое дело, что радиус экранирования в неидеальной плазме не описывается классическим выражением для дебаевского радиуса, поэтому его приходится находить фактически экспериментально. Мы эту работу проводили и в рамках моей кандидатской диссертации, там были опубликованы результаты о том, каков радиус экранирования в плазме – в общем-то он сопоставим со средним межчастичным расстоянием. Но вот что касается линейных размеров, мы тут видим (*показывает на слайде*), хотя это косвенно совершенно и не и том речь идет, но на самом деле здесь тот же эффект, потому что это зависимость потенциальной энергии от количества ионов. И мы видим, что несколько сотен частиц для (параметра неидеальности) $\Gamma = 1$ уже вызывают насыщение, и дальше энергия, которая естественно зависит от того, насколько точно мы учли граничные эффекты, она перестает изменяться. То есть на самом деле эта оценка и дает примерно ту величину размера системы, если пересчитать количество ионов в размер системы, при котором мы можем пользоваться длинноволновым приближением.

Теперь следующий вопрос про сравнение результатов для периодических граничных условий и отражающих стенок в том случае, когда мы рассматривали внутреннюю

область плазмы (*показывает слайд*). На самом деле, как вы, наверное, помните, я уже рассказывал про эти расчеты. Здесь действительно это результат немного не доведен до конца, потому что нам просто не хватило вычислительной мощности. И проверить общность этого результата представляется задачей на будущее. Потому что, это пока некий предварительный результат, который показал, что если мы рассматриваем внутреннюю ячейку, то в принципе можем рассматривать любые граничные условия. Действительно, выяснить здесь влияние хвостов корреляционных функций на тех примерах, которые мы рассмотрели, было невозможно, и эти расчеты надо продолжить, используя современные вычислительные мощности, и тогда на этот вопрос можно будет подробно ответить. Сейчас, к сожалению, этого, видимо, сделать нельзя.

Дальше речь шла опять же про модель приповерхностной плазмы. Нужно ли использовать заряды-изображения? На самом деле я могу сказать, что этот вопрос у нас довольно долго дискутировался с соавторами этой работы, когда мы ее делали. Вопрос этот очень неоднозначный. Дело в том, как возникают заряды изображения. Они возникают за счет того, что электроны металла экранируют поле тех электронов плазмы, которые находятся вблизи металлической поверхности, и, таким образом, они соответственно перераспределяются, так чтобы электрон, можно сказать, видел внутри металла заряд противоположного знака. Проблема в том, что этот процесс перераспределения электронов в металле тоже имеет некое конечное время, которое, надо сказать, довольно сложно оценить, но с нашей точки зрения, это время сопоставимо с характерным временем измерения положения электронов в плазме. Поэтому, это достаточно неоднозначный вопрос, успевают ли электроны металла «зеркалировать» распределение электронов в плазме. Динамика ионов здесь не очень важна – мы в основном рассматривали динамику электронов, и для них этот вопрос достаточно сложный. Мы в результате приняли решение не рассматривать заряды-изображения, хотя мы на самом деле проводили расчеты обоих типов.

Дальше был вопрос про послойное испарение. Речь шла о том, каким образом разрушается здесь эта ионная решетка (*показывает слайд*). Действительно, мы привели результат для суммарного изменения бинарной функции распределения ионов и для изменения параметра Линдемана, перегиб на зависимости которого от времени указывал нам на плавление ионной решетки. Мы, надо сказать, не исследовали подробно сам характер этого плавления, но, по всей видимости, он достаточно близок к тому, как происходит разрушение нанокластеров в случае наноплазмы, то есть он достаточно близок к этому процессу (*показывает слайд*), где в начальный момент действительно происходит расширение ионов с сохранением слоистой структуры и только через некоторое время за счет стохастических процессов происходит перемешивание, и уже мы видим разрушение кристаллической решетки. То есть на самом деле и то, и другое здесь происходит, но определить в какой момент у нас окончательно происходит потеря пространственной структуры не так просто. Хотя косвенно это видно из корреляционной функции тоже: сохранение решетки с разлетом оно бы проявлялось в виде смещения этих линий. Однако, мы тут смещения практически не наблюдаем, оно очень малое, а видим их исчезновение, что говорит о том, что «разбухание» не успевает произойти. Тем более, что здесь, по-моему, моделировалась модельная система с однородным распределением ионов. Поэтому тут этот вопрос недостаточно подробно был исследован, но он

представляется довольно интересным. Спасибо.

Председатель

Спасибо, Игорь Владимирович! Теперь мы переходим к дискуссии. Могут участвовать, естественно, и кто в зале, и кто дистанционно. Кто хотел бы выступить? Пожалуйста, Генри Эдгарович.

Норман Генри Эдгарович

Дорогой Олег Федорович! Дорогие коллеги! Я начну с некоторых воспоминаний. Мы с Игорем познакомились весной 1995 года. Игорь в тот момент учился в выпускном классе школы «лицей Вторая школа» очень высокого уровня. Он там был на отличном счету. На тот момент он уже подал заявления на прием в МГУ, Физтех и МИФИ, везде был принят, ему оставалось только решить, куда именно он пойдет, а своему учителю соросовскому он сказал, что хочет заниматься наукой. И соросовский учитель привел его ко мне. Но я советовал Игорю все-таки сдать экзамены на аттестат зрелости на всякий случай, а уж о науке (поговорить) в первых числа сентября. И в первых числах сентября мы встретились. Я спросил на каких языках Игорь программирует, Игорь сказал, что на всех, а если что не знаю, так Вы скажите, я через неделю буду знать. Дело в том, что Игорь вырос в семье физиков: Владимир Георгиевич – профессор МИРЭА, Галина Константиновна – доцент, и он увидел и дотянулся до компьютера, когда голова его превысила стол и он смог дотянуться до клавиатуры. Поэтому, ну считайте, лет с шести Игорь начал общаться с компьютерами, и поэтому никаких проблем у него с этим никогда не было. Что касается тематики, то тут тоже вопрос был более-менее очевиден, потому что Владимир Георгиевич, он ученик Зубарева, второй ученик – это Герд Рёпке. Они писали в то время книжку после трагической гибели Зубарева и, соответственно, Владимир Георгиевич регулярно бывал в Ростове и брал с собой школьника Игоря. Поэтому он познакомился уже в школьные годы с неидеальной плазмой. Поэтому выбор тематики, как Вы понимаете, тоже определился. Таким образом, та тема, по которой сегодня защищается диссертация, с ней Игорь познакомился еще в школьные годы. Мы видим эти результаты. Первое выступление у Игоря уже с оригинальными результатами было в 1998 году на NPP (научно-координационная сессия «Исследования неидеальной плазмы»). Тогда NPP проводилось в Госкомитете по науке и технике в зале заседаний, поскольку Владимир Евгеньевич был министром и вице-премьером. Выступление Игоря произвело на него очень хорошее впечатление, и с тех пор он его уже стал выделять, то есть еще на 3-м курсе. Могу сказать, что наши занятия, тем не менее, были своего рода хобби, потому что на физфаке (МГУ) не любят внешних научных руководителей, поэтому когда возник вопрос о научном руководителе, то руководителем стал профессор Платоненко, который дал ему тему по Particle-in-cell – PIC методу, и диплом защищал Игорь по Particle-in-cell под руководством Платоненко, а статьи писал со мной. Поэтому в аспирантуру он поступал тоже, между прочим, не вполне ко мне, там был еще руководитель из физфака, но дружественный руководитель. Теперь, если уже переходить к современной ситуации, то я хотел бы добавить, что высокий уровень компьютерной грамотности, а скажем так, не высокий, а высочайший уровень, это мне говорили специалисты, с которыми я общался на международных конференциях, он поддерживается Игорем по сей день. Отмечу, скажем, его работы по GPU (программированию на графических ускорителях), они не вошли в

диссертацию, поэтому он держит руку на пульсе в вычислительной области и сейчас. Что касается физики, то тут я хотел бы добавить, что есть работы у Игоря, которые не вошли в диссертацию, они выходят за пределы плазмы, в частности по нуклеации, поэтому в диссертацию включены отнюдь не все работы, которые он опубликовал после защиты кандидатской диссертации, и работы которые публиковались до защиты (кандидатской диссертации) не вошли в (докторскую) диссертацию, в том числе и достаточно, по моим представлениям, высоко цитируемые. У Игоря достаточно, таким образом, работ, в том числе и по тематике, не входящей в неидеальную плазму. Естественно, я голосую «за», и уверен, что все присутствующие тоже проголосуют «за».

Председатель

Генри Эдгарович, спасибо! Кто хотел бы еще высказаться? Павел Ремирович, пожалуйста.

Левашов Павел Ремирович

Дорогие коллеги! Я Игоря Владимировича знаю как раз с того выступления в 1998 году на сессии по неидеальной плазме и всегда с тех пор с интересом следил за его работами. Я хотел бы Ваше внимание на два аспекта обратить. Первое, это то, что Игорь Владимирович не боится ввязываться в довольно серьезные проблемы, применяя, скажем, метод молекулярной динамики для задач нанокластерной плазмы или для трека ионов в кристаллах, осознавая, что будут вопросы, будут замечания, и мы их сегодня слышали, полемизируя и отстаивая свою точку зрения. Для этого нужна определенная научная смелость. И второй аспект, это то, что все коды, которые в работе использованы, написаны лично им или в соавторстве с его учениками. Сегодня это достаточно редкий случай, часто люди используют готовые коды. Здесь все коды написаны самостоятельно на высоком уровне – параллельные коды, высокоэффективные, и это, я считаю, большая заслуга Игоря Владимировича. Так что я призываю Вас голосовать «за» и сам, естественно, буду голосовать «за».

Председатель

Спасибо, Павел Ремирович! Кто-нибудь еще хотел бы высказаться?

Уважаемые коллеги, я хотел бы тоже сказать здесь несколько слов. Во-первых, диссертация соответствует всем критериям, предъявляемым к диссертациям такого типа. И как мы уже все слышали, здесь присутствующие и в дистанционном режиме тоже, те замечания, что были высказаны, они ни в коем случае не умаляют научного достижения, а скорее являются некоторыми своеобразными штрихами к портрету. Во-вторых, я сегодня заседание начал со словами, что сегодня заседание знаковое. Оно действительно знаковое – у нас этой осенью и в начале зимы две диссертации: Павла Ремировича Левашова, только что выступившего, и Игоря Владимировича Морозова, которые были представлены к защите, но Павел Ремирович успешно защитился, а Игорь Владимирович сейчас пока еще в процессе находится. Но это действительно события знаковые, когда защищаются не только кандидатские диссертации, но и докторские, причем на защиту выносятся те работы, которые в институте очень хорошо известны, известны на протяжении нескольких десятилетий. Поэтому, конечно, всегда вопрос возникал, как справедливо отметил один из оппонентов: «А почему до сих пор не доктор?». И сегодня

мы как раз к такому моменту подошли. Конечно, я только призываю поддержать эту работу, голосовать «за». А так я хотел бы сказать, что для Игоря Владимировича это важный, но все-таки этап. Потенциал возможностей у него просто фантастический. И организационный, и научный. Все-таки заведование лабораторией дает в этом смысле определенные возможности. Поэтому я хотел и призвать всех, и пожелать Игорю Владимировичу двигаться дальше. Все, спасибо.

Если желающих выступить нет, тогда мы переходим к следующему пункту. У нас слово предоставляется Игорю Владимировичу и (затем) голосование.

Морозов Игорь Владимирович

Глубокоуважаемые коллеги, большое спасибо за внимание к моей работе! Конечно, эта работа не могла состояться без помощи коллег, которые либо работали вместе со мной над этими задачами, либо обсуждали со мной эти задачи. К сожалению, некоторых из них уже нет в живых. И конечно, я хотел бы отдельно поблагодарить Генри Эдгаровича Нормана, который был моим руководителем и на этапе моего обучения в ВУЗе, и на этапе подготовки кандидатской диссертации, и очень много полезных навыков позволил мне развить. Многие его идеи вошли, естественно, и в те работы, которые я Вам сегодня рассказывал. (Эти работы) являлись продолжением тех идей, которые мы с ним когда-то обсуждали. Я хотел бы поблагодарить отдельно руководство Института высоких температур, которое всегда оказывало мне очень большую помощь во всех начинаниях. Хотел бы, конечно, поблагодарить членов диссертационного совета, оппонентов, которые ознакомились с моей работой, отдельно Ольгу Александровну, которая очень много помогала на этапе оформления документов. И конечно, я хотел бы поблагодарить моих близких, в частности, супругу Оксану, которая оказала мне огромную моральную поддержку, и без ее участия я бы даже не решился, может быть, на такое дело. Большое спасибо!

Председатель

Спасибо, Игорь Владимирович! Переходим к голосованию. Пожалуйста.

Ученый секретарь

Дорогие коллеги! Так как заседание у нас проводится в комбинированном очно-дистанционном режиме, голосование производится с использованием телекоммуникационных систем, то есть на сайте ОИВТ (РАН). Просьба ко всем присутствующим членам диссертационного совета – войти под своим логином и паролем на сайт ОИВТ РАН и проголосовать либо со своего устройства, либо с компьютера, стоящего в центре зала.

Проводится процедура тайного голосования.

Председатель

Уважаемые коллеги! Я прошу проголосовать, кто еще это не сделал. Выясняется, что еще не все это сделали.

Продолжается процедура тайного голосования.

Председатель

Уважаемые коллеги! Мы можем теперь перейти к результатам голосования. Пожалуйста, Алексей Владимирович, Вам слово.

Ученый секретарь

Дорогие коллеги! Всего присутствовало на заседании 23 члена совета, в том числе докторов наук по профилю рассматриваемой диссертации 9, очно присутствовало 13, в том числе докторов наук по профилю рассматриваемой диссертации 6; онлайн 10 в том числе докторов наук по профилю рассматриваемой диссертации 3.

Результаты голосования: за – 22, против – 0, недействительный – 1.

Председатель

Теперь нам нужно утвердить результаты голосования. Кто «за» прошу поднять руки в любом режиме. Есть ли против? Воздержался? Нет. Есть ли против онлайн? Воздержался? Нет. Очень хорошо. И у нас остался завершающий пункт – это обсуждение проекта заключения и голосование по проекту заключения. Кто хотел бы здесь высказаться? И давайте поздравим, Игорь Владимирович, с большим чувством поздравляю Вас! По проекту заключения кто хотел бы высказаться? (*Члены диссертационного совета обсуждают проект заключения*). Уважаемые коллеги, прошу голосовать в целом за проект заключения с учетом тех замечаний, которые были сделаны, кто за? Есть ли против? Воздержался? В дистанционном режиме есть ли против или воздержавшиеся? Нет. (*Проект заключения принят единогласно*). Спасибо, на этом у нас защита завершена.

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

аттестационное дело № _____
решение диссертационного совета от 28.12.2022 г. № 35

О присуждении Морозову Игорю Владимировичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Столкновительные и релаксационные процессы в неидеальной электрон-ионной плазме» по специальности 1.3.9 – физика плазмы принята к защите 28.09.2022 г., (протокол заседания № 19) экспертной комиссией Диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02), созданного на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук (125412, г. Москва, Ижорская ул., д. 13, стр. 2, (495) 485-8345, jiht.ru), утвержденного Приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 86/нк от 26.01.2022 г.

Соискатель Морозов Игорь Владимирович, 1978 года рождения, в 2001 году окончил Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, физический факультет. В 2004 году досрочно окончил очную аспирантуру физического факультета Московского государственного университета имени М.В. Ломоносова.

Диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук на тему: «Столкновения и плазменные волны в неидеальной плазме» по специальности

01.04.08 – «физика плазмы» защитил 25 февраля 2004 г. в диссертационном совете Д 002.110.02, созданном на базе Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

Работает в должности заведующего лабораторией № 1.6 – теплофизических баз данных (Термоцентр им. В.П. Глушко) Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук.

Диссертация выполнена в лаборатории № 1.6 – теплофизических баз данных (Термоцентр им. В.П. Глушко) Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник сектора теоретической астрофизики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук Потехин Александр Юрьевич,

доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник сектора лазерно-плазменной физики высоких энергий Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук Брантов Андрей Владимирович,

доктор физико-математических наук, профессор Автономной некоммерческой образовательной организации высшего образования «Сколковский институт науки и технологий» Бриллиантов Николай Васильевич
дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр «Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук» в своем положительном заключении, составленном главным научным сотрудником теоретического отдела, д.ф.-м.н. А.М. Игнатовым и и.о. заведующего теоретическим отделом, председателем Ученого совета теоретического отдела, д.ф.-м.н. Н.Г. Гусейн-Заде (утвержденном 08.12.2022 г. директором чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. С.В. Гарновым) указала, что научная значимость работы определяется необходимостью тем, что неидеальная электрон-ионная плазма интенсивно исследуется во всем мире как экспериментально, так и теоретически, такое состояние вещества встречается в астрофизических объектах, а также в лабораторных условиях, например, при воздействии на твердотельные мишени коротких лазерных импульсов или потоков заряженных частиц, в прикатодной области электрических разрядов в вакууме и в плотном газе, на фронте мощных ударных волн в газовых и конденсированных средах, при электровзрыве проводников.

Отмечается, что в диссертационной работе предложен ряд новых методов для исследования неидеальной электрон-ионной плазмы, а также получены оригинальные результаты, среди которых можно отметить следующие: разработана методика расчета продольной и поперечной проводимости неидеальной плазмы с помощью классической молекулярной динамики при использовании специального типа граничных условий; систематически исследовано влияние периодических и отражающих граничных условий на расчет уравнения состояний неидеальной плазмы и эффективной частоты столкновений; получены новые данные по статической и динамической проводимости равновесной плазмы при различных температурах и плотностях, показана область применимости различных вариантов молекулярно-динамического (МД) моделирования; исследованы релаксационные процессы в неравновесной плазме вблизи поверхности металла в условиях формирования униполярной вакуумной дуги, в треке одиночного многозарядного иона, в кластерной наноплазме; предложена оригинальная методика исследования колебаний электронов в кластерной наноплазме, получены новые данные о

сдвиге частоты поверхностных плазмонов в красную область спектра для кластеров малого размера, для которых предложена оригинальная теоретическая модель; предложено несколько модификаций метода молекулярной динамики с волновыми пакетами (МДВП), позволяющих решить проблему неограниченного распыливания волнового пакета для свободного электрона, повышения точности описания связанных состояний электронов и ионов, учета обменно-корреляционных эффектов; получены новые результаты для уравнения состояния водородной плазмы, ударной адиабаты дейтерия, изоэнтропы дейтерия и гелия, показавшие применимость предложенного метода молекулярной динамики волновых пакетов с использованием функционала плотности (МДВП-ФП) для моделирования плазмы с концентрацией электронов до 10^{25} см^{-3} .

Соискатель имеет 63 опубликованные работы, в том числе по теме диссертации опубликовано 27 работ, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 27 работ. Список основных публикаций соискателя:

1. Reinholz H., Morozov I., Roepke G., Millat Th. Internal versus external conductivity of a dense plasma: Many-particle theory and simulations // *Phys. Rev. E*. 2004. V. 69. P. 066412.
2. Morozov I., Reinholz H., Roepke G., Wierling A., Zwicknagel G. Molecular dynamics simulations of optical conductivity of dense plasmas // *Phys. Rev. E*. 2005. V. 71. P. 066408.
3. Morozov I.V., Valuev I.A. Localization constraints in Gaussian wave packet molecular dynamics of nonideal plasmas // *J. Phys. A*. 2009. V. 42. P. 214044.
4. Raitza T., Reinholz H., Roepke G., Morozov I.V. Collision frequency of electrons in laser excited small clusters // *J. Phys. A*. 2009. V. 42. P. 214048.
5. Faenov A.Ya., Lankin A.V., Morozov I.V., Norman G.E., Pikuz S.A. Jr, Skobelev I.Yu. Nonequilibrium nonideal nanoplasma generated by a fast single ion in condensed matter // *Plasma Phys. Control. Fusion*. 2009. V. 51. P. 124025.
6. Морозов И.В. Моделирование кластерной наноплазмы методом молекулярной динамики // *Наноструктуры. Математическая физика и моделирование*. 2011. Т. 5, № 1/2. С. 39-56.
7. Raitza T., Röpke G., Reinholz H., Morozov I. Spatially resolved dynamic structure factor of finite systems from molecular dynamics simulations // *Phys. Rev. E*. 2011. V. 84. P. 036406.
8. Morozov I.V., Norman G.E., Insepov Z., Norem J. Sheath parameters for non-Debye plasmas: Simulations and arc damage // *Phys. Rev. ST Accel. Beams*. 2012. V. 15. P. 053501.
9. Morozov I.V., Valuev I.A. Improvement of Wave Packet Molecular Dynamics using Packet Splitting // *Contrib. Plasma. Phys.* 2012. V. 52. P. 140-144.
10. Lavrinenko Ya.S., Levashov P.R., Minakov D.V., Morozov I.V., Valuev I.A. Equilibrium properties of warm dense deuterium calculated by the wave packet molecular dynamics and density functional theory method // *Phys. Rev. E*. 2021. V. 104. P. 045304.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы от следующих организаций:

1. **Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук** (гл.н.с., д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН В.Б. Минцев) – отзыв положительный, с замечаниями:

– На рисунке 1 приведена зависимость безразмерной электропроводности от параметра неидеальности. При этом экспериментальные данные взяты из теоретической работы [7] 1979 года. Хотя эксперименты по измерению электропроводности неидеальной плазмы проводились и гораздо позже, а их обсуждение приведено, например, в работах Mintsev V.B., Fortov V.E. *Laser and Particle Beams*, 33, № 1, p. 41-50 (2015) и Adams J.R., et al. *Physics of Plasmas*, 14, 062303 (2007).

– Мне кажется, что полнота работы несколько теряется отсутствием расчетов отражательной способности неидеальной плазмы, хотя разработанный автором подход позволяет это сделать.

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

3. **Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»** (профессор кафедры теоретической физики, д.ф.-м.н. В.П. Крайнов) – отзыв положительный, с замечанием:

– В четвертой главе описаны исследования динамики электронов в кластерной наноплазме, образующейся в результате облучения наноразмерных кластеров фемтосекундным лазерным импульсом. На стр. 19 автореферата приведена формула (6) для внешней ионизации кластера фемтосекундным лазерным импульсом. Согласно этой формуле заряд кластерного иона пропорционален радиусу кластера. Однако согласно нашей работе: V.P. Krainov, M.B. Smirnov, «Cluster beams in the super-intense femtosecond laser pulse», Physics Reports, 370 (2002), pp. 237 - 331, зависимость заряда кластера от его радиуса при внешней ионизации лазерным импульсом носит более сложный характер.

4. **Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук»** (гл.н.с., д.ф.-м.н. Н.В. Змитренко) – отзыв положительный, без замечаний.

5. **Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова», физический факультет** (Профессор кафедры общей физики и волновых процессов, д.ф.-м.н. А.Б. Савельев-Трофимов) – отзыв положительный, без замечаний.

6. **Федеральное государственное бюджетное учреждение «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»** (Начальник отдела моделирования физических процессов и прикладных технологий, д.ф.-м.н. Ю.Ю. Клосс) – отзыв положительный, без замечаний.

7. **Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук** (гл.н.с. и.о. зав. лабораторией «Плазмохимии и физикохимии импульсных процессов», д.ф.-м.н. Ю.А. Лебедев) – отзыв положительный, без замечаний.

8. **Казахский Национальный университет им. Аль-Фараби, физико-технический факультет** (Профессор кафедры физики плазмы, нанотехнологии и компьютерной физики, д.ф.-м.н. Т.С. Рамазанов) – отзыв положительный, с замечаниями:

– Использованный в работе псевдопотенциал имеет кулоновскую асимптотику на больших расстояниях, вследствие чего для расчета энергии системы желательно применять процедуру Эвальда, а метод ближайшего образа требует дополнительного обоснования.

– Во второй главе в уравнение движения добавлена сила со стороны некоторого среднего поля для компенсации зарядов, хотя данную функцию успешно могут решать периодические граничные условия, которые также присутствуют в схеме моделирования.

– Интересные результаты по динамике наноплазмы (глава 4) получены в рамках классической механики, которая, по-видимому, не является достаточной для описания такой системы, в частности, для учета связанных электронов.

9. **Федеральное государственное унитарное предприятие «Российский федеральный ядерный центр Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики»** (гл.н.с., д.ф.-м.н. Б.А. Надыкто) – отзыв положительный, с замечанием:

– Известно, что на поведение ударных адиабат существенное влияние оказывает диссоциация и ионизация материалов. Классическим примером этого является ударная адиабата водорода. Из текста реферата не ясно, каким образом учитывается это влияние.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается:

– д.ф.-м.н., с.н.с. Потехин Александр Юрьевич является ведущим ученым в области термодинамических и кинетических свойств неидеальной плазмы и разогретого плотного вещества в применении к задачам исследования астрофизических объектов. С применением химической модели им получено уравнение состояния неидеальной плазмы, определен параметр неидеальности, при котором происходит кристаллизация ионов в однокомпонентной плазме, исследованы оптические свойства неидеальной плазмы в сильном магнитном поле. Основные публикации Потехина А.Ю.:

1. Kozhberov A.A., Potekhin A.Y. Electrostatic energy of Coulomb crystals with polarized electron background // Phys. Rev. E. – 2021. – V. 103, No. 4. – P. 043205.
2. Potekhin A.Y., Chabrier, G., Lai, D. et al. Nonideal strongly magnetized plasmas of neutron stars and their electromagnetic radiation // J. Phys. A. – 2006. – V. 39, No. 17. – P. 4453.
3. Chabrier G., Potekhin A.Y. Equation of state of fully ionized electron-ion plasmas // Phys. Rev. E. – 1998. – V. 58, No. 4. – P. 4941.

– д.ф.-м.н. Брантов Андрей Владимирович является признанным специалистом в области взаимодействия мощных лазерных импульсов с веществом, включая лазерную абляцию, генерацию потоков заряженных частиц с помощью лазерной плазмы, воздействие лазерных импульсов наноструктурированные и кластерные мишени, исследование колебаний и неустойчивостей в плазме. Основные публикации Брантова А.В.:

1. Ракитина М.А., Брантов А.В. О раскACHE ионно-звуковой неустойчивости в плазме с двумя сортами ионов // Физика плазмы. – 2021. – Т. 47, № 10. – С. 921.
2. Lobok M.G., Brantov A.V., Gozhev D.A., Bychenkov V.Y. Optimization of electron acceleration by short laser pulses from low-density targets // Plasma Physics and Controlled Fusion. – 2018. – V. 60, No. 8. – P. 084010.
3. Новиков В.Н., Брантов А.В., Быченков В.Ю., Ковалев В.Ф. Кулоновский взрыв нагретого кластера // Физика плазмы. – 2008. – Т. 34. – № 11. – С. 997-1000.

– д.ф.-м.н., профессор Бриллиантов Николай Васильевич специализируется в области теоретической физики и компьютерного моделирования систем заряженных частиц (неидеальной плазмы, ионных жидкостей, заряженных растворов коллоидных частиц и др.). Им были исследованы уравнения состояния, фазовые переходы и другие явления в указанных средах, с том числе с применением методов Монте-Карло и молекулярной динамики. Основные публикации Бриллиантова Н.В.:

1. Feng G., Chen M., Bi S., Goodwin Z.A., Postnikov E.B., Brilliantov N. et al. Free and bound states of ions in ionic liquids, conductivity, and underscreening paradox // Physical Review X. – 2019. – V. 9, No. 2. – P. 021024.
2. Budkov Y.A., Frolov A.I., Kiselev M.G., Brilliantov N.V. Surface-induced liquid-gas transition in salt-free solutions of model charged colloids // The Journal of Chemical Physics. – 2013. – V. 139, No. 19. – P. 194901.
3. Brilliantov N.V. Accurate «First Principle» Equation of State for the One Component Plasma // Contributions to Plasma Physics. – 1998. – V. 38, No. 4. – P. 489.

– Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр «Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук» (ИОФ РАН) является профильной организацией, специализирующейся на экспериментальных и теоретических исследованиях лазерной плазмы, плазмы разрядов высокого давления, униполярных вакуумных дуг, прикатодных областей и других видов плазменных сред. В теоретической отделе ИОФ РАН ведутся работы по исследованию неидеальной пылевой, электронно-позитронной и электрон-ионной

плазмы, в том числе с применением молекулярно-динамического моделирования. Основные публикации:

1. Barenholtz S.A., Frolova V.P., Nikolaev A.G. Cathode and plasma phenomena in vacuum-arc sources of hydrogen isotope ions. II. Ionization processes in the arc plasma // Plasma Sources Science and Technology. – 2020. – V. 29, No. 3. – P. 035004.
2. Kodanova S.K., Issanova M.K., Ramazanov T.S., Khikmetov A.K., Maiorov S.A. Simulation of positronium plasma by the molecular dynamics method // Contributions to Plasma Physics. – 2019. – V. 59, No. 6. – P. e201800178.
3. Tsytoich V.N., Gusein-Zade N.G., Ignatov A.M. Nonlinear screening of dust grains and structurization of dusty plasma: II. formation and stability of dust structures // Plasma Physics Reports. – 2017. – V. 43, No. 10. – P. 981.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- рассчитана статическая и динамическая проводимость неидеальной плазмы со значением параметра неидеальности 0.1 – 5;
- определена высокочастотная асимптотика эффективной частоты столкновений для модельного псевдопотенциала Кельбга, а также зависимость частоты столкновений от температуры, являющейся параметром данного потенциала;
- определены характерная ширина двойного слоя в неидеальной плазме и потенциал поверхности металла в условиях формирования униполярной вакуумной дуги в зависимости от температуры и плотности плазмы, для указанных зависимостей предложены полуэмпирические формулы;
- для неидеальной плазмы, образованной воздействием одиночного многозарядного иона на конденсированную мишень, показано, что к моменту высвечивания наблюдаемых рентгеновских спектральных линий 10 – 100 фс успевает установиться максвелловское распределение по скоростям для основной части электронов плазмы, термализация «горячей» части электронов происходит на временах порядка десятков фемтосекунд, концентрация электронов в области ионного трека составляет не менее 85 % от начальной, а плавление ионной решетки и рекомбинация электронов происходят на временах, превышающих 100 фс, что позволило построить корректную модель излучения возбужденных ионов мишени, хорошо согласующуюся с экспериментальными данными;
- получены данные о величине установившегося заряда наноразмерного кластера, состоящего из $55\text{--}10^5$ атомов и ионизованного фемтосекундным лазерным импульсом, в зависимости от размера кластера, концентрации ионов и температуры электронов; показано, что в рассмотренной области параметров заряд кластера можно считать пропорциональным произведению конечной температуры электронов на радиус кластера с коэффициентом пропорциональности $0.55 \pm 0.06 (a_0 \text{ эВ})^{-1}$;
- разработана теоретическая модель коллективных колебаний электронов (поверхностных плазмонов), описывающая полученную в молекулярно-динамическом моделировании зависимость частоты этих колебаний от размера кластера, определены декременты затухания для колебаний Ми и ленгмюровских плазменных колебаний в зависимости от параметра неидеальности;
- на примере расчета ударной адиабаты дейтерия, а также изоэнтропы ударно-сжатых дейтерия и гелия показано, что модифицированный метод МДВП-ФП обеспечивает точность расчета термодинамических свойств плазмы, сравнимую с методами квантовых Монте-Карло и молекулярной динамики, сохраняя при этом способность описывать неравновесную динамику электронов, в частности, подтверждено значение максимальной сжимаемости плазмы дейтерия на ударной адиабате 4.4 ± 0.1 .

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

- обоснован переход к длинноволновому пределу при расчете динамической проводимости неидеальной электрон-ионной плазмы методом классической МД в случае применения периодических граничных условий;
- проведен анализ спектра автокоррелятора тока для системы с отражающими граничными условиями и показано, что эти результаты могут использоваться для расчета продольной проводимости при использовании внутренней области расчетной ячейки;
- разработан метод исследования колебаний электронов в кластерной наноплазме в рамках классической МД, использующий анализ пространственно-разрешенной автокорреляционной функции тока;
- предложен способ ограничения ширины волновых пакетов в методе МДВП, основанный на вычислении энергии взаимодействия электрона с ближайшим ионом;
- показана возможность модификации метода МДВП с использованием нескольких волновых пакетов на электрон для повышения точности описания связанных состояний электронов и ионов;
- показана возможность модификация метода МДВП для учета обменно-корреляционных эффектов взаимодействия электронов на основе формализма электронной плотности, где суммарная электронная плотность определяется по параметрам волновых пакетов с учетом спина.

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

- исследованная в работе неидеальная плазма встречается в астрофизических объектах (внутренняя часть планет-гигантов, оболочка белых и коричневых карликов и др.), при воздействии на твердотельные мишени коротких лазерных импульсов или потоков заряженных частиц, в прикатодной области электрических разрядов в вакууме и в плотном газе, на фронте мощных ударных волн в газовых средах и конденсированных средах, при разогреве вещества, предварительно сжатого в алмазных наковальнях, при испарении тонких проволок под воздействием мощного импульса тока;
- плазма с эффектами неидеальности, полученная в результате воздействия коротких лазерных импульсов на конденсированные мишени, и рассмотренная в диссертационной работе может использоваться как источник рентгеновских и гамма импульсов, терагерцового излучения, потоков электронов, ионов и нейтронов с высокими энергиями;
- модификация поверхности фемтосекундными лазерными импульсами является эффективным инструментом создания нанообъектов и поверхностных наноструктур, при этом роль неидеальности плазмы на начальном этапе взаимодействия лазера с поверхностью может быть достаточно важна;
- неидеальная плазма вблизи поверхности металла существенным образом влияет на характер формирования разрядов и повреждения поверхностей, а исследования плазмы, образующейся в вакуумных униполярных дугах, необходимы для защиты микроволновых устройств ввода энергии в ускорительной технике;
- полученные результаты атомистического моделирования могут быть использованы в качестве входных параметров для практически важных задач моделирования плазменных сред на больших пространственных масштабах методами вычислительной гидродинамики, частиц в ячейке и др.

Результаты диссертационной работы могут быть использованы в научных и научно-образовательных центрах, а также в организациях, проводящих экспериментальные и теоретические исследования в области неидеальной плазмы, в частности, в Объединенном институте высоких температур РАН, в Федеральном исследовательском центре проблем химической физики и медицинской химии РАН, в Московском физико-техническом институте (государственном университете), Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, в Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе РАН, в Физическом институте им. П.Н. Лебедева

РАН, в Сколковском институте науки и технологий, в Федеральном исследовательском центре «Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН», в Институте электрофизики УрО РАН, в «Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», в Институте нефтехимического синтеза им. А. В. Топчиева РАН, в «Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики», в «Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина», в ГНЦ РФ «Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований».

Оценка достоверности результатов показала, что использованные в диссертационной работе теоретические подходы и методы компьютерного моделирования неидеальной плазмы являются внутренне непротиворечивыми и базируются на принятых научным сообществом теоретических моделях и принципах компьютерного моделирования систем многих частиц, а достоверность полученных результатов подтверждается согласием результатов с имеющимся набором экспериментальных данных и результатов компьютерного моделирования, полученных другими авторами с применением различных подходов.

Личный вклад соискателя является определяющим и состоит в постановке задач, разработке теоретических моделей и представленных в работе новых методов компьютерного моделирования, формулировке условий проведения численного эксперимента, разработке алгоритмов и программных кодов, проведении расчетов, интерпретации результатов, подготовки публикаций и докладов по теме работы.

Апробация результатов исследования проводилась на 34-х российских и международных конференциях и симпозиумах. Основные публикации по выполненной работе подготовлены при определяющем участии соискателя.

В ходе защиты диссертации критических замечаний высказано не было.

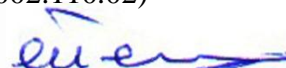
Соискатель Морозов Игорь Владимирович ответил на задаваемые ему в ходе заседания вопросы, привел собственную аргументацию и согласился со сделанными замечаниями.

На заседании от 28.12.2022 г. диссертационный совет принял решение: за разработку теоретических положений, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение, присудить Морозову Игорю Владимировичу ученую степень доктора физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

При проведении тайного голосования Диссертационный совет в количестве 23 человек, из них очно: 6 докторов наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 4 доктора наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника, дистанционно: 3 доктора наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 7 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 – 22, против – 0, недействительных бюллетеней – 1.

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.

28.12.2022 г.