

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 КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 28.12.2022г. № 36

О присуждении Сартану Роману Александровичу, гражданину Российской Федерации ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Метастабильные состояния разогретого плотного водорода» по специальности 1.3.9 – физика плазмы принята к защите 26.10.2022г., (протокол заседания № 27) диссертационным советом 24.1.193.01 (Д 002.110.02), созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (125412, г. Москва, Ижорская ул., д. 13, стр. 2, (495) 485-8345, jiht.ru), утвержденного Приказом Министерства науки и высшего образования Российской Федерации № 86/нк от 26.01.2022г.

Соискатель Сартан Роман Александрович 1994 года рождения, в 2018 году окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»

Работает в должности научного сотрудника лаборатории № 14.1 – теории неидеальной плазмы Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

В 2022 году окончил очную аспирантуру Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)».

Диссертация выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования “Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)” на кафедре физики высокотемпературных процессов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник международной лаборатории суперкомпьютерного атомистического моделирования и многомасштабного анализа Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»" Норман Генри Эдгарович.

Официальные оппоненты:

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

- кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник отдела теоретической физики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук Магницкая Мария Викторовна  
дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук в своем

положительном заключении, составленном главным научным сотрудником д.ф.-м.н. член-корр. РАН Минцевым В.Б. (утвержденном 13.12.2022г. ученым секретарем д.х.н. Психа Б.Л.) указала, что научная значимость работы состоит следующем:

- предложен метод моделирования метастабильных состояний в рамках метода квантовой молекулярной динамики;

- получено уравнение состояния разогретого плотного водорода с метастабильной областью, существование которой ранее было предсказано лишь в рамках квазихимического представления;

- предложен и применен новый метод оценки концентрации молекул  $H_2$  и их времени жизни в рамках метода квантовой молекулярной динамики;

- в рамках прямого численного моделирования получено качественное описание процессов, сопровождающих фазовый переход, и получено представление о компонентном составе плотного водорода в области фазового перехода.

Степень достоверности полученных результатов является высокой, что подтверждается, с одной стороны, изложением материалов диссертационной работы в рецензируемых изданиях, индексируемых в отечественных и международных базах данных, а с другой стороны, непротиворечивостью полученных закономерностей и данных, известных из научной литературы. В работе использованы самые современные математические методы и методы математического моделирования. Обсуждение опирается на надежно установленные факты и закономерности. Выводы соответствуют содержанию разделов диссертации.

Соискатель имеет 17 опубликованных работ по теме диссертации, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 7 работ, 10 тезисов в сборниках трудов конференций:

1. *Sartan R.* Changes in properties of  $H_2$  molecules at the fluid–fluid phase transition in warm dense hydrogen // *Contribution to Plasma Physics.* — 2022. — Vol. 62, no. 8. — e202100227.

2. *Sartan R.* Structure properties of warm dense hydrogen // *Journal of Physics: Conference Series.* — 2020. — Vol. 1556. — P. 012047.

3. *Norman G., Saitov I., Sartan R.* Metastable states of fluid-fluid phase transition in warm dense hydrogen // *Journal of Physics: Conference Series.* — 2019. — Vol. 1147. — P. 012003.

4. *Norman G., Saitov I., Sartan R.* Metastable molecular fluid hydrogen at high pressure // *Contribution to Plasma Physics.* — 2019. — Vol. 59. — P. 173.

5. *Норман Г. Э., Саитов И. М., Сартан Р. А.* Метастабильные состояния разогретого плотного водорода // *Доклады Академии Наук.* — 2018. — Т. 481, № 4.

6. *Norman G., Saitov I., Sartan R.* Structures of liquid selenium at phase transition // *Journal of Physics: Conference Series,* — 2018. — Vol. 946. — P. 012101.

7. *Norman G., Saitov I., Sartan R.* Metastable states of warm dense hydrogen // *Interfacial phenomena and heat transfer.* — 2017. — Vol. 5. — P. 165.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. **Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук** (старший научный сотрудник сектора теоретической астрофизики к.ф.-м.н. Чугунов А.И.) – отзыв положительный, с замечаниями:

- есть опечатки. Например, в подписи к рис. 2 пропущено слово «проводимость».

- не указано, какой термостат был использован, хотя важность отключения термостата для моделирования метастабильных состояний подчеркнута на стр. 8 автореферата.

- на стр. 10 указано, что «Критическую температуру можно оценить в 1500 К с точностью порядка тысяч кельвин». Если это так, то как диапазон включает 0 К. Можно ли поставить более содержательный нижний предел?

- как указано на стр. 12, время жизни молекул в проводящей фазе составляет 10-100 фс., т.е. всего несколько периодов колебаний атомов (см. также на стр. 14). Не очень понятно, насколько корректно называть такие короткоживущие конфигурации молекулами.

- при чтении автореферата возникает вопрос, как при переходе в проводящую фазу изменяется распределение молекул по времени жизни (остаётся ли распределение монотонным или появляется существенная доля короткоживущих молекул). Впрочем, ответ на этот вопрос во много дан в тексте диссертации.

- не очень ясно, почему «Резкое падение времени жизни можно интерпретировать как появление короткоживущих молекул  $H_2^+$ » (стр. 13 автореферата).

**2. Федеральное государственное унитарное предприятие «Российский Федеральный Ядерный Центр - Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина»** (зам. начальника отделения д.ф.-м.н. Дремов В.В.) - отзыв положительный, без замечаний.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается:

- д.ф.-м.н., профессор Губин С.А. является ведущим ученым в областях термодинамического моделирования сложных химических систем и газодинамических расчётов ударных и детонационных волн.

1. Губин С.А., Козлова С.А., Маклашова И.В. Получение изотермических характеристик, параметров уравнения состояния для  $petn$  методами реакционной молекулярной динамики и термодинамики // Горение и взрыв. 2022. Т. 15. № 2. С. 117-124.

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

3. Gubin S.A., Victorov S.B. The accuracy of the theories based on statistical physics for the thermodynamic modeling of state parameters of dense pure gases (fluids) // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. V. 1205. P. 012020.

- к.ф.-м.н., Магницкая Мария Викторовна является высококвалифицированным специалистом в области теоретических исследований фундаментальных свойств вещества: структуры, электронных свойств, устойчивости и фазовых превращений при высоких давлениях

1. Kamaeva, L., V. Magnitskaya, M., V. Suslov, A. A. Tsvyashchenko, A. V. Chtchelkatchev, N. M. Structural transformations and thermal stability of RhGe synthesized under high temperature and pressure // Journal of Physics: Condensed Matter. 2022. V. 34 (42) P. 424001.

2. Kamaeva, L. V. Chtchelkatchev, N. M. Suslov, A. A. Magnitskaya, M., V. Tsvyashchenko, A., V. Structural and thermal stability of B20-type high-pressure phases FeGe and MnGe // Journal of Alloys and Compounds. 2021 V. 888 P. 161565.

3. Chtchelkatchev, N. M. Magnitskaya, M. V. Tsvyashchenko, A. V. Ab initio study of non-centrosymmetric transition-metal monogermanide B20-RhGe synthesized at high temperature and pressure // The European Physical Journal Special Topics. 2020 V. 229 (2-3) P. 167-178

- Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук является профильной организацией, где проводятся исследования физико-химических процессов, протекающих при экстремально высоких значениях давления, температуры и плотности энергии. В лаборатории уравнения состояния вещества ведутся работы по сильно неидеальной плазме, в частности, изучается фазовый переход в разогретом плотном водороде и дейтерии.

1. Zaporozhets, Yu. B. Mintsev, V. B. Gryaznov, V. K. Rosmej, S. Reinholz, H. Röpke, G. The investigation of the optics of shock-compressed strongly correlated plasma // Contr. to Pl. Phys. 2021. V. 61 (10) P. e202100110

2. Мочалов, М. А. Илькаев, Р. И. Фортов, В. Е. Ерунов, С. В. Аринин, В. А. Бликов, А. О. Огородников, В. А. Рыжков, А. В. Комраков, В. А. Куделькин, В. Г. Максимкин, И. П. Грязнов, В. К. Иосилевский, И. Л. Левашов, П. Р. Минаков, Д. В. Парамонов, М. А. Квазиизэнтропическое сжатие неидеальной плазмы дейтерия и его смеси с гелием в области давлений до 250 ГПа // ЖЭТФ. 2021. Т. 159 (6) С. 1118-1133
3. Filippov, A. V. Starostin, A. N. Gryaznov, V. K. Electron transport in nonideal and degenerate plasmas // Jour. of Phys.: Conf. Series. 2019. V. 1147. P. 012101

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

– разработан способ моделирования метастабильных состояний в рамках молекулярной динамики. Для достижения метастабильности, необходимо подобрать нужную начальную конфигурацию и провести систему в термодинамическое равновесие, по возможности снизив возмущения;

– построено уравнение состояния разогретого плотного водорода вдоль изотерм 700, 1000, 1500 и 2000 К. Получены метастабильные состояния молекулярной фазы для изотерм 700 и 1000 К. Их наличие указывает на то, что фазовый переход является фазовым переходом первого рода. Изотермы имеют скошенный вид с сильным перекрытием равновесных и метастабильных ветвей и сравнительно небольшой разницей удельных объемов между ними. Вид изотерм соответствует предсказанию плазменного фазового перехода;

– предложен метод оценки концентрации и времени жизни двухатомных молекул водорода. Для анализа этих свойств молекул водорода по МД-траекториям дано формальное определение “молекулы”: атомы считаются связанными, если расстояние между ними меньше некоторой наперед заданной величины  $r_{cut}$ . При этом, за время существования этой связи атомы должны хотя бы раз сблизиться на второе пороговое расстояние  $r_{threshold}$ ;

– рассчитаны изменения концентрации, времени жизни и среднего межатомного расстояния молекул водорода при фазовом переходе. Концентрация молекул составляет 100% в непроводящей фазе и плавно уменьшается после фазового перехода с увеличением плотности. Время жизни молекул резко падает на несколько порядков во время фазового перехода. Среднее межатомное расстояние имеет небольшой, но резкий скачок на 5-8% при фазовом переходе. Эти особенности указывают на процесс резкой ионизации молекул  $H_2$  в разогретом плотном водороде при фазовом переходе, и последующую постепенную диссоциацию.

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

Исследования свойств водорода в экстремальных условиях имеют фундаментальное значение. Результаты исследования находят свое применение в астрофизике. В атмосферах Сатурна и Юпитера, состоящих из водородно-гелиевой смеси, реализуются условия для фазового перехода в проводящее состояние, что связано со специфическим магнитным полем планет. Описание метастабильных состояний также поможет пониманию быстротекущих процессов с фазовым превращением.

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

Процесс металлизации водорода при больших температурах связан с родственной проблемой металлического водорода, получение которого до сих пор остается сложнейшей задачей. Потенциально, твердый метастабильный металлический водород может стать высокотемпературным сверхпроводником или быть использован как эффективное топливо.

С полученными результатами целесообразно ознакомить следующие организации: Московский государственный университет, Санкт-Петербургский государственный университет, ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН, НИЦ Курчатовский Институт, Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Всероссийский научно-исследовательский институт технической

физики и др.

**Оценка достоверности результатов** исследования выявила, что достоверность полученных результатов подтверждается использованием метода квантовой молекулярной динамики в рамках теории функционала плотности, который позволяет, как минимум, на качественном уровне воспроизвести ключевые физические процессы. Результаты имеют внутреннюю согласованность, а выводы позволяют объяснить наблюдаемые в ряде экспериментов явления. Рассчитанные изотермы совпадают с изотермами, рассчитанными в других молекулярно-динамических работах, а качественный вывод о характере диссоциации согласуется с выводами экспериментальных работ.

**Личный вклад соискателя** состоит в самостоятельной разработке и применении предлагаемых в положениях диссертации методов, а также в личном принятии участия в обработке, анализе и обсуждении результатов, полученных с помощью них.

Апробация результатов исследования проводилась на 14 российских и международных конференциях и симпозиумах. Основные публикации по выполненной работе также подготовлены при определяющем участии автора.

В ходе защиты диссертации критических замечаний высказано не было.

Соискатель Сартан Роман Александрович ответил на задаваемые ему в ходе заседания вопросы, привел собственную аргументацию и согласился с высказанными замечаниями.

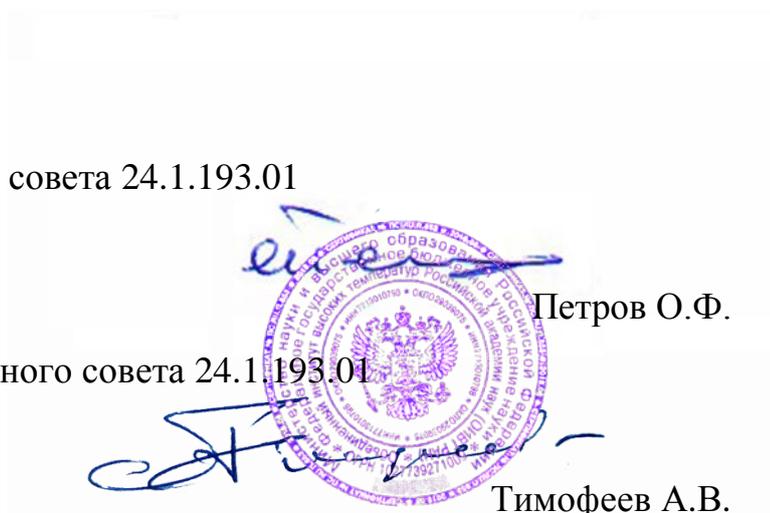
На заседании от 28.12.2022г. диссертационный совет принял решение за исследование научной задачи, имеющей значение для развития физики плазмы, присудить Сартану Роману Александровичу ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

При проведении тайного голосования Диссертационный совет в количестве 23 человек, из них очно: 5 докторов наук по специальности 1.3.9

– физика плазмы и 5 докторов наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника, дистанционно: 4 доктора наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 6 докторов наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника, участвовавших в заседании, из 31 человека, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за 23, против 0, недействительных бюллетеней - 0

Председатель диссертационного совета 24.1.193.01  
академик

Ученый секретарь диссертационного совета 24.1.193.01  
к.ф.-м.н.



Петров О.Ф.

Тимофеев А.В.

28.12.2022г.