

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

СТЕНОГРАММА

заседания 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
(125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2)
от 27 мая 2026 г. (протокол № 3)

Защита диссертации Демьянова Георгия Сергеевича
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
«Эффективный учет дальнего действия в моделировании классических и квантовых кулоновских
систем с помощью усредненного по углам потенциала Эвальда»
Специальность 1.3.9 – физика плазмы

СТЕНОГРАММА

заседания диссертационного совета 24.1.193.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2).
Протокол № 3 от 27 мая 2026 г.

Диссертационный совет 24.1.193.01 (Д 002.110.02) утвержден Приказом Министерства образования и науки РФ от 11.04.2012 г. № 105/нк в составе 31 человека. На заседании присутствуют 28 человек, из них 12 докторов наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 13 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., академик Петров Олег Федорович

Ученый секретарь – ученый секретарь диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02) к.ф.-м.н. Тимофеев Алексей Владимирович

1. Петров О.Ф.	д.ф.-м.н. профессор, академик РАН	1.3.9, техн. науки	Присутствует
2. Андреев Н.Е.	д.ф.-м.н., профессор	1.3.9, физ.-мат. науки	Присутствует
3. Храпак А.Г.	д.ф.-м.н. профессор	1.3.14, физ.-мат. науки	Присутствует
4. Тимофеев А.В.	к.ф.-м.н.	1.3.9, физ.-мат. науки	Присутствует
5. Агранат М.Б.	д.ф.-м.н.	1.3.14, техн. науки	Подключен
6. Амиров Р.Х.	д.ф.-м.н., с.н.с.	1.3.9, физ.-мат. науки	Подключен
7. Апфельбаум Е.М.	д.ф.-м.н.	1.3.14, техн. науки	Присутствует
8. Беляев И.А.	к.т.н.	1.3.14, физ.-мат. науки	Присутствует
9. Вараксин А.Ю.	д.ф.-м.н. профессор, академик РАН	1.3.14, физ.-мат. науки	Присутствует
10. Васильев М.М.	д.ф.-м.н.	1.3.9, техн. науки	Присутствует
11. Васильев М.Н.	д.т.н., профессор	1.3.14, техн. науки	Присутствует
12. Василяк Л.М.	д.ф.-м.н., профессор	1.3.9, техн. науки	Присутствует

13.	Гавриков А.В.	д.ф.-м.н., доцент	1.3.9, техн. науки	Присутствует
14.	Голуб В.В.	д.ф.-м.н., профессор	1.3.14, техн. науки	Подключен
15.	Грязнов В.К.	д.ф.-м.н., с.н.с.	1.3.14, физ.-мат. науки	Подключен
16.	Дьячков Л.Г.	д.ф.-м.н.	1.3.9, техн. науки	Присутствует
17.	Еремин А.В.	д.ф.-м.н., профессор	1.3.14, физ.-мат. науки	Присутствует
18.	Зеленер Б.Б.	д.ф.-м.н.	1.3.9, техн. науки	Присутствует
19.	Зобнин А.В.	д.ф.-м.н.	1.3.9, техн. науки	Присутствует
20.	Иосилевский И.Л.	д.ф.-м.н., профессор	1.3.9, физ.-мат. науки	Присутствует
21.	Киверин А.Д.	д.ф.-м.н.	1.3.14, физ.-мат. науки	Присутствует
22.	Лагарьков А.Н.	д.ф.-м.н., профессор, академик РАН	1.3.9, физ.-мат. науки	Отсутствует
23.	Левашов П.Р.	д.ф.-м.н., доцент	1.3.14, физ.-мат. науки	Присутствует
24.	Ломоносов И.В.	чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. профессор	1.3.14, техн. науки	Отсутствует
25.	Норман Г.Э.	д.ф.-м.н. профессор	1.3.9, физ.-мат. науки	Присутствует
26.	Пикуз С.А.	к.ф.-м.н.	1.3.9, физ.-мат. науки	Подключен
27.	Савватимский А.И.	д.т.наук	1.3.14, техн. науки	Подключен
28.	Стегайлов В.В.	д.ф.-м.н., доцент	1.3.9, техн. науки	Отсутствует
29.	Трухачёв Ф.М.	д.ф.-м.н.	1.3.14, техн. науки	Присутствует
30.	Филиппов А.В.	д.ф.-м.н., профессор	1.3.9, физ.-мат. науки	Присутствует
31.	Яньков Г.Г.	д.т.н., с.н.с.	1.3.14, физ.-мат. науки	Подключен

ПОВЕСТКА ДНЯ

На повестке дня защита диссертации младшего научного сотрудника лаборатории № 7.1 – моделирования свойств материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН) Демьянова Георгия Сергеевича на тему «Эффективный учет дальнего действия в моделировании классических и квантовых кулоновских систем с помощью усредненного по углам потенциала Эвальда». Диссертация впервые представлена на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы. Диссертация выполнена в лаборатории № 7.1 – моделирования свойств материалов Теоретического отдела № 7 им. Л.М. Бибермана ОИВТ РАН (125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, jih.t.ru).

Научный руководитель:

Левашов Павел Ремирович – д.ф.-м.н., заведующий лабораторией № 7.1 – моделирования свойств материалов Теоретического отдела № 7 им. Л.М. Бибермана Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук, г. Москва.

Официальные оппоненты:

Потехин Александр Юрьевич – гражданин РФ, д.ф.-м.н., главный научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук (ФТИ им. А.Ф. Иоффе; Россия, 194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 26).

Петров Юрий Васильевич – гражданин РФ, д.ф.-м.н., старший научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук (ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН; Россия, 142432, Московская область, г. Черноголовка, просп. Академика Семенова, д. 1А).

Ведущая организация:

Федеральное государственное учреждение Федеральный исследовательский центр «Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук» (ИПМ им. М.В. Келдыша РАН; Россия, 125047, г. Москва, площадь Миусская, д. 4).

На заседании присутствуют официальные оппоненты д.ф.-м.н. Потехин А.Ю. и д.ф.-м.н. Петров Ю.В., научный руководитель Демьянова Г.С. д.ф.-м.н. Левашов П.Р.

СТЕНОГРАММА

Председатель

Добрый день, уважаемые члены совета и все присутствующие. Мы начинаем заседание нашего диссертационного совета. Мы сегодня заслушаем две защиты. Давайте перейдем к первой. Свою работу представит Демьянов Георгий Сергеевич. Алексей Владимирович сейчас ознакомит нас с документами дела.

Ученый секретарь

(Зачитывает данные о соискателе по материалам личного дела и сообщает о соответствии представленных документов требованиям ВАК Министерства образования и науки РФ).

Председатель

Есть ли вопросы к ученому секретарю по представленным документам? Если вопросов нет, перейдем к докладу. Георгий Сергеевич, пожалуйста, в пределах 20 минут.

Демьянов Г.С.

Выступает с докладом по диссертационной работе (выступление не стенографируется, доклад Демьянова Г.С. имеется в деле).

Председатель

Спасибо, Георгий Сергеевич. Мы переходим к вопросам. Кто хотел бы задать вопрос? Пожалуйста.

Филиппов А.В.

Георгий Сергеевич, вот вы сравнивали с химической моделью образование кластеров. Вы почему-то считаете, что у вас это не физический результат? Известных химических моделей больше 20 существует, и там может быть намного более грубые приближения использовались. На чем Ваш вывод, что получен нефизичный результат, основан?

Демьянов Г.С.

Смотрите, здесь сравнивается не только с химической моделью плазмы, а и с расчетами Монте-Карло с интегралами по траекториям. И эти расчеты действительно прецизионные, они очень сложные, включают в себя учет многочастичных обменных эффектов. И здесь хорошо видно, что их результаты, не закрашенные символы, с химической моделью здесь тоже согласуются. Поэтому я считаю, что эти результаты здесь намного точнее, чем в общем любые другие модели. Поэтому я делаю вывод, что все-таки данный метод с улучшенным псевдопотенциалом Кельбга приводит к неправильному поведению.

Филиппов А.В.

Монте-Карло по траекториям, он же при этих температурах намного хуже работает, чем может быть даже химические модели?

Демьянов Г.С.

При температуре 31 кК... В общем, он, наверное, совсем тяжело работает при еще более низких температурах. А при таких температурах, по крайней мере, скажем так, те результаты, которые были в этой работе, они звучат достаточно убедительно. Поэтому я им доверяю. Как я, в принципе, понимаю, что, конечно, многочастичные обменные эффекты, их учесть достаточно сложно, и в данной работе, в общем, по этой причине они здесь не учитываются, но, тем не менее, там все реализовано достаточно неплохо.

Председатель

Еще вопросы? Пожалуйста, Алексей Владимирович.

Тимофеев А.В.

Георгий Сергеевич, у меня небольшой вопрос. Вы сравниваете Эвальд с обрезкой потенциала кулона. Еще же используются другие методы PPPM, быстрый мультипольный метод. Можете, пожалуйста, прокомментировать, как они соотносятся с вашим методом, пригодны ли они для этих задач, в общем, почему вы концентрируетесь на вашем методе, а не используете эти методы?

Демьянов Г.С.

Смотрите, эти методы в основном представляют собой реализацию так или иначе формул Эвальда, и далее находятся различные способы, как суммировать слагаемые, которые относятся к суммированию по обратной решетке. И, насколько я понимаю, эти методы эффективны при очень-очень большом числе частиц. При малом числе частиц они могут быть не так эффективны. Я в данной работе именно эти методы не проверял. То есть я брал напрямую сам реализовывал расчет потенциала Эвальда и использовал его. Тем не менее, здесь вот этот потенциал, усредненный по углам, в общем, действительно имеет очень простую формулу, и я думаю, что все-таки это намного быстрее, чем любые другие реализации. Что может быть проще, чем полином? И, в принципе, в других работах, которые также уже и в квантовом случае используют результаты данной работы, используют эту формулу, у них также аналогичный прирост по производительности появляется. Поэтому здесь я сравниваю потенциал Эвальда и усредненный потенциал Эвальда.

Председатель

Так, еще вопросы пожалуйста. У меня есть вопрос. Вы сравнивали различные подходы. А что касается экспериментальных результатов? И всегда возникает вопрос, а в чем преимущество, в чем вы продвинулись дальше от тех работ, которые уже опубликованы, или от потенциалов, которые активно используются?

Демьянов Г.С.

Здесь фактически у вас два вопроса. Первый, что касается экспериментов. Экспериментальные работы в основном касаются вырожденной плазмы, то есть там необходимо учитывать многочастичный обмен. Здесь в этой работе многочастичный обмен учесть не удалось, поэтому, к сожалению, это недостаток работы, что сравнение с экспериментом здесь, в общем, отсутствует. И для того, чтобы, например, произвести сравнение водородной плазмы, например, посмотреть на проводимость плазмы, необходимо добиться, в общем, намного лучшего согласия, чем то, что здесь представлено с улучшенным псевдопотенциалом Кельбга, хотя бы по термодинамическим свойствам. Тогда есть надежда на то, что согласие с экспериментом будет намного лучше. Тем не менее, в работе присутствует верификация на основании сравнения с другими теориями.

Что касается того, что было достигнуто, самое главное, с моей точки зрения, это, во-первых, повышение эффективности расчета, что очень важно в квантовых, вырожденных системах, потому что зачастую, например, при расчете взаимодействующего электронного газа, зачастую в системе рассматриваются несколько сотен частиц, есть работы, где даже несколько частиц рассматриваются, и там, конечно же, прирост производительности имеет огромное преимущество. И, как я уже упоминал, после опубликованной формулы эти результаты уже используются другими группами, как раз в квантовом моделировании. Там тоже преимущество наблюдается. И также второе, это полученная кулоновская матрица плотности с дальнодействием, которое позволяет моделировать и двухкомпонентную систему. Раньше строго математического учета дальнодействия не предполагалось возможным получить.

Председатель

Спасибо. Есть ли еще вопросы? Если нет, тогда мы переходим к следующему. Слово предоставляется научному руководителю, Левашову Павлу Ремировичу.

Левашов П.Р.

(Выступление научного руководителя не стенографируется. Положительный отзыв Левашова П.Р. имеется в деле).

Председатель

Спасибо, Павел Ремирович. Переходим к следующему.

Ученый секретарь

Дорогие коллеги, в деле имеются заключение организации, в которой выполнялась работа, это ОИВТ РАН, отзыв ведущей организации и 4 отзыва на автореферат. Если позволите, я не буду подробно зачитывать все отзывы, в них традиционно содержится классический разбор диссертации по главам, отмечена актуальность, новизна, научная и практическая значимость и так далее. Но мы только что заслушали соискателя, поэтому, если позволите, пропущу. В заключении организации делается вывод о том, что диссертация Георгия Сергеевича Демьянова рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

Также в деле имеется отзыв ведущей организации, который составлен ведущим научным сотрудником доктором физико-математических наук Виктором Валентиновичем Веденяпиным, ведущим научным сотрудником доктора физико-математических наук Всеволодом Жановичем Сакбаевым и научным сотрудником кандидатом физико-математических наук Ильей Юрьевичем Вичевым, заверенным ученым секретарем и утверждено директором ИПМ. Отзыв достаточно объемный, в нем содержится разбор диссертации по главам, все отмечено. Кроме того, замечу, что тут приведен список организаций, в которых могут применяться результаты диссертации для решения различных теоретических и прикладных задач физики плазмы.

Имеется несколько замечаний.

Первое замечание. При очень сильной теоретической части первой и второй главы их связь с расчетами третьей и пятой глав и четвертой не ясна. Второе замечание. В разделе 1.2 рассматривается усреднённый по углам потенциал Эвальда, страница 47. Добавив усреднение по радиусу, можно прийти к методу Чезаре. Потенциал станет вести себя лучше, а от громоздкого суммирования по Эвальду можно будет вовсе отказаться. Судя по всему, задача решается значительно проще. Третье замечание. В разделе 2.1.1 рассматривается псевдопотенциал Кельбга в общем виде, страницы 82-83. Судя по выкладкам в приложении, ссылка 162, для первого порядка обнуление возникнет еще раньше. Уравнение 2.15 точное, но дальше оно используется только в первом порядке, как бы обнуляя метод Кельбга. Важно объяснить, почему нельзя в исходном уравнении использовать то же приближение и почему метод Кельбга эффективен. Четвертое замечание. В разделе 2.2 страницы 93 указывается, что в случае водородной плазмы в работе 2004 года, ссылка 166, был предложен улучшенный псевдопотенциал Кельбга. Интересно, существует ли альтернатива потенциалу Кельбга? По крайней мере, этот вопрос стоило бы обсудить. Пятое замечание. В разделе 3.1 высказывается следующее на странице 104: «Вообще говоря, средние в уравнениях 3.1 и 3.2 не обязаны быть равны. Однако в данной работе будет предполагаться их равенство. Это предположение есть эргодическая гипотеза. Таким образом, выбор способа усреднения определяется лишь удобством выбора метода моделирования и поведением каждой системы в конкретном случае.» Насколько эргодическая гипотеза неверна, зависит от свойств системы. Имеется теорема Больцмана-Риса. Временные и средние совпадают с экстремалами Больцмана. Из нее следует, что временные и средние определяются линейными законами сохранения для соответствующего уравнения Лиувилля. Приведена ссылка на монографию «Энтропия по

Больцману и Пуанкаре». То есть в формуле 3.2 временные и средние определяются по Больцману и Пуанкаре для функции распределения. Тогда появляется шанс совпадения 3.1 и 3.2, если нет законов сохранения. Замечание номер шесть. В разделе 4.1 страницы 126-128 приводится расчет постоянных Маделунга. Следовало бы уделить внимание раскрытию физического смысла постоянной Маделунга. Что это за величина? Какую характеристику системы она описывает? В таблицах 4.1 и 4.2 приводится точное значение. Что это значит? Замечание номер семь. В разделе 5.2.2, а на странице 161, вводится обозначение «точный псевдопотенциал, полученный из матрицы плотности». Однако встает вопрос, существует ли в принципе точный псевдопотенциал? В реальности число степеней свободы в системе настолько велико, что описать его одним лишь псевдопотенциалом сложно. Важным здесь может оказаться расширение числа учитываемых степеней свободы, хотя бы за счет введения функции распределения. Стационарное решение уравнений Власова для кулоновского потенциала образует весьма богатое множество. Именно в этом направлении видится возможность обобщения методов Дебая-Хюккеля. Замечание номер восемь. В работе не рассматривается возможность использования аппарата кинетической теории и, в частности, уравнений типа Власова-Пуассона применительно к кулоновской системе, хотя такой подход видится достаточно перспективным.

Замечания отзыва ведущей организации закончены. В конце приводится следующая информация. Результаты представляются достоверными, научно обоснованными, обладают научной новизной, теоретической и практической значимостью. Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным в пункте 9 положения порядка присуждения ученых степеней, а ее автор Демьянов Георгий Сергеевич заслуживает присвоение ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9-физика плазмы. Последний участок текста будет повторяться в следующих отзывах. Если позволите, я зачитывать повторно не буду.

Также поступило 4 отзыва на автореферат.

(Первый отзыв). Первый отзыв поступил от старшего научного сотрудника отдела космогеофизики ИКИ РАН, кандидата физико-математических наук Юрия Викторовича Думина. Отзыв положительный, есть замечания. Замечание номер один. В автореферате широко используются различные аббревиатуры. При этом некоторые из них расшифровываются при первом употреблении. Например, МК, метод Монте-Карло, а другие нет. Например, МД, молекулярная динамика. В то же время, далеко не очевидно, что термин молекулярная динамика хорошо известен каждому специалисту по физике плазмы. То же самое относится и к употреблению диссертантом своеобразного научного жаргона. Например, на протяжении всего автореферата многократно используется фраза «учет дальнего действия», но при этом ее точный смысл не всегда достаточно понятен, так как в принципе все рассматриваемые в работе системы являются дальнедействующими. Замечание второе. Включенные в автореферат рисунки в принципе очень хорошо иллюстрируют основные положения работы, однако оформление рисунков не всегда является достаточно аккуратным. В ряде случаев отсутствует необходимое пояснение к обозначению. Например, на рисунке 10 и 11 не мешало бы пояснить, что такое r_s и что такое r_a . По-видимому, это связано с тем, что при переносе из диссертации в автореферат были потеряны некоторые необходимые комментарии.

(Второй отзыв). Второй отзыв на автореферат был получен от старшего научного сотрудника сектора теоретической астрофизики Андрея Игоревича Чугунова из ФТИ имени Иоффе: в качестве замечания, носящего скорее характер пожелания на будущее, могу отметить, что сходимость расчета с использованием усреднённого по углам потенциала Эвальда к термодинамическому пределу можно было бы исследовать более детально, уделив еще больше внимания сравнению со сходимостью при расчете методом Эвальда. В частности, было бы интересно понять, насколько меньшее отклонение рассчитанного значения энергии от термодинамического предела будет достигаться при использовании усреднённого потенциала Эвальда по сравнению с расчетом по методу Эвальда при том же расчетном времени и разным,

но большим N , число частиц. Отмечу, что для оценки зависимости энергии ОКП от числа частиц я бы использовал скорее разложение в ряд по $1/N$, чем примененную в диссертации аппроксимацию $(1/N)^{\gamma}$. Но это замечание носит дискуссионный характер и требует проверки. Отзыв положительный.

(Третий отзыв). Следующий отзыв был получен от доцента кафедры вычислительной физики и моделирования физических процессов Института физики, кандидата технических наук Ильназа Изаиловича Файрушина из Казанского Приволжского федерального университета. Вопрос следующий. Может ли УУПЭ быть использован для получения траекторий частиц ионов жидкой ОКП методом МД с последующим корректным расчетом динамического структурного фактора? Отзыв положительный.

(Четвертый отзыв). Следующий отзыв на автореферат получен от старшего преподавателя, заместителя заведующего кафедрой теоретической физики имени Ландау, кандидата физико-математических наук Игоря Владимировича Черноусова из МФТИ. Замечание следующее. В работе используется метод квазиклассической молекулярной динамики для описания водородной плазмы. При этом в моделировании явно участвуют электроны, квантовая природа которых проявляется несмотря на малое вырождение. Стоит заметить, что даже в этом случае динамика системы не соответствует реальной динамике квантовой системы, описываемой оператором эволюции. Таким образом, этот метод не позволит получить истинные квантовые динамические свойства системы, например, динамический структурный фактор. Второе замечание. В работе представлен улучшенный псевдопотенциал Кельбга с учетом дальнего действия. Однако в его выводе присутствует некоторое приближение, поскольку улучшенный псевдопотенциал Кельбга был получен из расчета матрицы плотности при конечной температуре, тогда как дополнительный вклад, отвечающий за дальнее действие, берется из высокотемпературного решения. Отзыв также положительный.

На этом полученные нами отзывы закончены.

Председатель

Спасибо, Алексей Владимирович. Георгий Сергеевич, Вам предоставляется слово для ответа на замечания.

Демьянов Г.С.

Я начну с замечаний в отзыве ведущей организации.

Первое замечание касается связи теоретической части с расчетами. Здесь, конечно же, в первой и второй главах я очень подробно рассмотрел вывод потенциала Эвальда, вывод усредненного по углам потенциала Эвальда, а во второй части вывод кулоновской матрицы плотности с учетом дальнего действия. И уже на основании всех этих выкладок и полученных формул были произведены расчеты. Поэтому, конечно же, связь между теоретической частью и практической частью прямая.

Следующий комментарий касается метода Чезаро. Действительно, можно попробовать использовать этот метод, с этим комментарием я согласен.

Следующее замечание касается вывода псевдопотенциала Кельбга. Речь идет об уравнении 2.15, следующем уравнении на функцию G . Определяется она следующим образом. Матрица плотности приравняется к следующему виду. Таким образом вводится оператор G . И дальше можно получить с помощью уравнения Блоха следующее уравнение на G , для которого используется следующее разложение. Оказывается, что в разложении слагаемые кубического порядка и больше точно равны нулю. Это точно. Однако дальше изначальное уравнение решается в первом порядке теории возмущений. Именно в этом и состоит метод Кельбга, то есть необходимо отбросить также и слагаемые второго порядка и дальше получить псевдопотенциал. Ну и также для того, чтобы дойти непосредственно до выражения для псевдопотенциала Кельбга, необходимо проделать еще достаточно большое число

преобразований, и в итоге можно получить следующую матрицу плотности. А решить уравнение 2.15 в том виде, в котором оно написано, аналитически, скорее всего, не представляется возможным или, по крайней мере, достаточно сложно.

Здесь замечание касается альтернатив псевдопотенциала Кельбга. Эти альтернативы обсуждались в начале второй главы. Напомню, что псевдопотенциала Кельбга имеет следующий вид и справедлив тогда, когда плазма полностью ионизована. Улучшенный псевдопотенциала Кельбга формально в работе 2004 года использовался при температурах больше десяти кельвин. Это формально, фактически при низких температурах может быть неправильное поведение.

Часто, как я говорил в начале, когда рассматриваются различные псевдопотенциалы, полученные из матриц плотности, в них не учитывается образование молекул, то есть рассматривается температура больше, чем температура диссоциации. В качестве примера можно привести псевдопотенциал Дойча и его различные модификации, например, в работе Хансена, Макдональда и в работе Мину, Гомберта и Дойча. Однако они справедливы только при достаточно высоких температурах. В принципе, в качестве альтернативы можно было бы использовать и потенциалы, основанные на методе функционала плотности, то есть либо машинно-обучаемые потенциалы, либо потенциалы, основанные на нейросетях. Однако это сильно выходит за рамки данной работы, и я в работе рассматриваю именно те псевдопотенциалы, которые получаются из матрицы плотности.

Здесь достаточно длинный комментарий, касающийся эргодической гипотезы. Здесь единственное, что я прокомментирую: в целом я соглашусь и отмечу лишь то, что в методе Монте-Карло каноническое распределение задается явно при сэмплеировании конфигураций, а в молекулярной динамике используется термостат Нозе–Гувера, который в теории дает именно каноническое распределение. То есть в методах Монте-Карло и молекулярной динамики используется каноническое распределение.

Следующее замечание касается постоянной Маделунга. Я действительно в диссертации не обратил внимания на ее физический смысл, использовал эту величину для верификации. Можно сказать, что постоянная Маделунга – это безразмерная энергия кристалла на одну частицу в кулоновских единицах. Для однокомпонентной плазмы, например, если рассчитать энергию кристалла, то ее можно представить в следующем виде, и здесь M – это постоянная Маделунга. Ну а что касается точного значения, то под точным здесь понимается, конечно, постоянная с некоторыми корректно подсчитанными несколькими значащими цифрами.

Следующее замечание касается вопроса о том, возможен ли точный псевдопотенциал. В принципе, в теории он возможен. Если предположить, что мы могли бы решить многочастичное уравнение Шредингера, можно по определению записать следующее выражение для матрицы плотности и дальше просто приравнять ее к матрице плотности следующего вида: к матрице плотности невзаимодействующих частиц с некоторым эффективным многочастичным псевдопотенциалом. С помощью этого потенциала можно получать различные термодинамические свойства, включая все необходимые эффекты.

Последнее – это комментарий. Я соглашусь, что, да, действительно, кинетический подход также можно было бы рассматривать для расчета свойств плазмы.

Дальше перейду к комментариям и замечаниям в отзывах на автореферат. Первое замечание: может ли полученный потенциал использоваться для расчета динамического структурного фактора для однокомпонентной плазмы? В принципе, да. В работе 2022 года было выписано следующее выражение для межчастичных сил, которое можно использовать уже для молекулярной динамики. И, соответственно, отсюда можно получать динамический структурный фактор.

Следующее замечание касается расшифровывания сокращений. Здесь я соглашусь с этим замечанием. Следующее касается фразы об учете дальнего действия. Здесь я, конечно же, всегда подразумевал сравнение, например, методов, которые учитывают дальнее действие с помощью

Эвальда, в сравнении с усеченным кулоновским потенциалом. Фактически, если моделирование производится в конечной ячейке с кулоновским потенциалом, то кулоновский потенциал на некотором расстоянии усекается, просто поскольку в моделировании бесконечное число частиц рассмотреть невозможно. А метод Эвальда эту проблему решает и позволяет моделировать как бы бесконечную систему.

Второе замечание касается величин g_a и g_s . Я также с замечанием соглашусь. Здесь я привел на всякий случай расшифровку этих величин.

Перейдем к следующим замечаниям. Первое касается эволюции квантовой системы. Действительно, этот метод псевдопотенциала, даже если в теории его можно получить точно, именно эволюцию настоящей квантовой системы, которая подчиняется уравнению Шредингера, таким методом получить не представляется возможным по фундаментальным причинам.

Второе замечание касается вклада дальнего действия в улучшенный псевдопотенциал Кельбга. Действительно, я просто добавил этот вклад таким образом. Однако в основном этот вклад влияет на больших расстояниях, где квантовые эффекты уже достаточно мало. Поэтому это приближение является достаточно обоснованным.

Здесь в основном выражены некоторые пожелания к работе. Я кратко еще раз напомним насчет сходимости по числу частиц: здесь было показано сравнение с учетом дальнего действия и с усеченным кулоновским потенциалом, и эффективность метода в общем случае возрастает на два порядка. Ну и также, что касается зависимости от числа частиц, я также согласен, что это можно применять различные аппроксимации.

На этом ответ на замечания ведущей организации и отзывов на автореферат окончен.

Председатель

Спасибо. Слово предоставляется официальному оппоненту доктору физ-мат наук Потехину Александру Юрьевичу.

Потехин А.Ю.

Выступление оппонента не стенографируется. Положительный отзыв Потехина А.Ю. имеется в деле.

В целом, результаты важные, результаты полезные, эффективность методов доказана. Учет квантовых эффектов хорошо проанализирован с применением потенциала Кельбга. И рассмотрена сложная, не только, вот я в замечаниях в основном на однокомпонентной плазме останавливался, а рассмотрена важнейшая, на мой взгляд, часть диссертации, это исследование двухкомпонентной невырожденной электронно-протонной плазмы. И поэтому, диссертация полностью соответствует всем требованиям, а диссертант на 100% является уже зрелым кандидатом наук и просто остается ему формально присвоить этот статус. Спасибо за внимание.

Председатель

Александр Юрьевич, спасибо вам. Спасибо. Так, Георгий Сергеевич, Вам предоставляете слово для ответа на замечания.

Демьянов Г.С.

Перейду к ответам на замечания. Первое замечание, которое было озвучено, – это моя критика в сторону отбрасывания дипольного слагаемого. Здесь я хотел бы пояснить, о чем в принципе идет речь, я буду пояснять это на примере двухкомпонентной системы, потому что проще всего это сделать именно для нее. Изначально для двухкомпонентной системы с периодическими граничными условиями записывается следующее выражение для энергии. Представим, что у нас в ячейке просто частицы с фиксированными координатами. Мы записываем следующее выражение: здесь есть ряд суммирования, и этот ряд сходится условно. Строго говоря, условно сходящийся ряд можно суммировать различными способами и получать

различные результаты, как это следует из теоремы Римана. И дальше зачастую в работах можно увидеть так называемый способ суммирования по сферам. Это некоторый определенный способ форсирования сходимости. Также нужно наложить условие электронейтральности. Результат суммирования по сферам имеет следующий вид. Это также некоторое постоянное слагаемое, вклад в парное взаимодействие и то самое дипольное слагаемое, которое зачастую отбрасывают и нужно как-то объяснить, почему его нужно отбросить. Здесь справа я привел картинку из книги, которая иллюстрирует этот способ суммирования по сферам. То есть здесь рассматривается следующая частичная сумма. Оказывается, что если поместить эти частичные суммы в такую металлическую оболочку, то это дипольное слагаемое пропадает. С моей точки зрения, это является некоторым способом подогнать под правильный ответ. То есть мы его заранее не знаем: мы получили результат, поняли, что он почему-то неправильный, а теперь стараемся изменить способ суммирования таким образом, чтобы финальное слагаемое убрать. Действительно, конечно же, речь идет о термодинамическом пределе, и поэтому в целом я согласен, что формально нам не важно, чем окружена система. Хотя, что такое окружение бесконечного пространства, я не вполне понимаю. То есть формально, математически, наверное, можно говорить в терминах частичных сумм, но если мы представим себе бесконечную систему, окруженную еще чем-то, то, с моей точки зрения, это не очень понятно. С моей точки зрения, если следовать традиционным методам суммирования, например метод по сферам, имеет смысл наложить два очень простых физических условия. Первое условие – это периодичность. Потенциал, как и финальная система, должен быть периодичным, и эта периодичность должна сохраняться. Соответственно, потенциал Эвальда является периодичным. Второе условие – это инвариантность удельной энергии относительно перехода к суперъячейке. То есть если сначала рассматривается одна ячейка, а потом рассматривается ячейка $2 \times 2 \times 2$, то удельная энергия на одну частицу должна остаться такой же. И, собственно, это дипольное слагаемое приводит к тому, что энергия не остается одинаковой. Поэтому это дипольное слагаемое необходимо отбросить. Также некоторые другие комментарии и мои мысли на этот счет я привел в диссертации. Самое главное, что исходный ряд сходится условно, и математически строгого метода просто не может быть. Для обоснования того или иного метода суммирования могут быть только физические обоснования.

Следующее замечание касается кластерного разложения. Я действительно знаю, что есть работа Кайоля и Жилья, в котором рассматриваются результаты Монте-Карло и результаты расчетов в гиперцепном приближении. Здесь под словом «продвинутым» я понимал то, что в работе Ортнера были получены следующие разложения по степеням Γ по сравнению с предыдущими работами. Также, с моей точки зрения, эта работа относительно работы 1969 года более новая, и язык в ней чуть более современный, хотя обе эти работы, в общем, достаточно сложны. И здесь под «продвинутым» я имел в виду, что предложено разложение по более высоким порядкам. Однако тем не менее в работе Кайоля и Жилья строгих математических соображений и каких-то доказательств того, почему эти выражения, эти коэффициенты при Γ^6 , неверны, я там не нашел. Да, действительно, эти поправки скорее ухудшают ситуацию, чем улучшают. Однако я это выражение Ортнера использовал при $\Gamma=0.1$, где можно просто сказать, что эти поправки уже не важны, и обе формулы дают одно и то же самое. Поэтому с замечанием я согласен. Да, вот формула. Первая часть поправок совпадает, а дальше дополнительные поправки Ортнера.

Следующая группа замечаний касается аппроксимации. Здесь я рассматриваю два уравнения состояния. Первое – это уравнение состояния Кайоля. В случае $s=1/4$ оно восходит к более ранним работам. Второе уравнение, предложенное оппонентом с соавторами в следующем виде. И конкретно здесь, на странице 140: «для определения уравнения состояния ОКП достаточно зависимости 4.2». Я здесь просто не очень аккуратно сформулировал. Конечно же, я имел в виду, что, чтобы знать термодинамические свойства, в том числе давление, достаточно знать зависимость энергии от параметра неидеальности, а не конкретно зависимость 4.2. То есть здесь просто не аккуратно сформулированное предложение. С замечанием согласен.

Следующее замечание касается аппроксимации. Оно также было высказано, и здесь я тоже соглашусь с этим замечанием. Ну и с последним замечанием я, в общем-то, также соглашусь. Оно касается использования аппроксимации. Я здесь предлагаю ее использовать, но не настаиваю на этом. Собственно, на этом ответ на замечания первого оппонента окончен.

Председатель

Георгий Сергеевич, спасибо. Слово предоставляется официальному оппоненту д.ф.-м.н. Юрию Васильевичу Петрову. Пожалуйста.

Петров Ю.В.

Выступление оппонента не стенографируется. Положительный отзыв Петрова Ю.В. имеется в деле.

Председатель

Спасибо, Юрий Васильевич. Теперь слово для ответа на замечания предоставляется Георгию Сергеевичу.

Демьянов Г.С.

Перейду к ответам на замечания второго оппонента. Соответственно, первое замечание касается опечатки в формуле. Здесь, действительно, в формуле 1.114 в суммировании должно быть $k=0$, а не вот $k=1$. Но это именно опечатка. Дальше нулевой коэффициент используется. Второе и третье замечания в принципе касаются сравнения с экспериментами. Здесь я уже отвечал на вопрос Олега Федоровича. Действительно, в работе сравнений с экспериментами не присутствует, однако, как я уже говорил, присутствует верификация как с теоретическими данными, так и можно сказать численными экспериментами различными, и верификация с моей точки зрения сделана достаточно надежно.

Председатель

Спасибо, Георгий Сергеевич. Так, теперь у нас есть время для дискуссий. Кто хотел бы выступить? Да, пожалуйста, Евгений Михайлович.

Апфельбаум Е.М.

Я знаком с Георгием на протяжении 6 лет, то есть эту работу знаю с самого начала. Хочу подчеркнуть, что все полученные результаты, о чем уже говорил научный руководитель, были получены именно в аспирантуре, все вот эти 9 статей. Георгий принимал отнюдь не формальное участие, были написаны за 4 года, что уже само по себе достижение, в весьма серьезных журналах. Перед ним была поставлена весьма неблагоприятная задача, как вы могли убедиться, то есть вопрос отсутствия сравнения с экспериментом возникал с самого начала, потому что часть его работы заключается в методической работе, потому что те методы, которые им рассмотрены, а именно методы суммирования Эвальда и потенциала Кельбга, они известны давно, не только до его рождения, но и до моего. И проблема была в том, что они, в определенном смысле, были не доведены до конца. Они использовались, естественно, активно. То есть, Эвальд был доведен до конца, но его проблема в целом численно заключается в том, что парно-аддитивный кулоновский потенциал в результате суммирования превращается в многочастичный, и это существенно затрудняет, так сказать, применение. Ну, много времени приходится тратить численно. А тот метод, который был предложен... я его называю метод Якуба, на самом деле до Якуба там еще были ученые, которые его предложили, он вроде как оставляет парно-аддитивный потенциал парно-аддитивным, но вот некие теоретические моменты были не до конца и нужно было это сделать, что и успешно было сделано соискателем. Ну, естественно, это большая работа, поэтому они рассматривают только модельные системы, однокомпонентную и двухкомпонентную плазму. А чтобы применить к конкретным веществам, это уже дополнительная работа, которую, я надеюсь, они сделают потом. Я, естественно, всячески поддерживаю эту работу и призываю совет голосовать за.

Филиппов А.В.

Георгий Сергеевич складывался как ученый у нас на глазах. Мы с ним часто пересекались на конференциях, он очень часто выступал на семинарах. И мне понравилось, как он себя на семинарах вел, особенно на семинаре теоретического отдела имени Леона Михайловича Бибермана, на котором, мягко скажу, присутствуют очень нетерпеливые сотрудники, ученые, которые перебивают и так далее. И мне понравилось, как Георгий Сергеевич спокойно ввел себя и спокойно все это отвечал на все вопросы, не вовремя заданные. И тема исследования, вот однокомпонентная плазма, она действительно имеет давнюю историю. Много там таких чудных результатов, которые не согласуются, в смысле вызывают вопросы, например, то, что там теряется устойчивость при некоторых значениях гамма больше, по-моему, один с чем-то там. И тема исследования очень интересная, и на этом поприще Георгий Сергеевич получает много результатов, и его хорошие знания математики, физики и плюс третий компонент — это программирование, позволяют надеяться, что он и дальше будет получать прекрасные результаты, и поэтому я призываю диссертационный совет поддержать Георгия Сергеевича и проголосовать за него.

Председатель

Спасибо. Есть ли еще вопросы? Я бы тоже хотел высказаться. Георгий Сергеевич представляет результаты, которые были получены в результате многолетней деятельности нашей научной школы нашего института. Школа, которая связана с моделированием, с квантовыми расчетами. Вы обратили внимание, присутствовали ссылки на работы Владимира Сергеевича Филинова, а у него много лет назад была выпущена классическая монография на тему квантового Монте-Карло, и конечно эта работа она является следствием тех результатов наработок, на которые уходят десятилетия. И очень хорошо, что Георгий Сергеевич не только это воспринял, а он этим проникся и делает шаги дальше. В самом деле эта однокомпонентная плазма, это некая классика, а с классики надо всегда начинать. Потом уже можно идти своим путем. И работа получилась, на мой взгляд, тоже классическая. И ее очень даже стоит поддержать. Спасибо.

Председатель

Мы переходим к голосованию. Слово предоставляется ученому секретарю.

Ученый секретарь

Уважаемые коллеги! Так как часть членов совета участвует дистанционно, решение диссертационного совета по рассматриваемому вопросу принимается тайным голосованием по присуждению ученой степени с использованием информационно-коммуникационных технологий. Голосование проводится на электронной платформе на сайте института. Прошу всех членов диссертационного совета войти в свою учетную запись и проголосовать по вопросу о присуждении Демьянову Георгию Сергеевичу ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы. Проголосовать можно как со своего устройства, так и с компьютера в зале совета.

(Проводится процедура тайного голосования)

Председатель

Уважаемые члены совета, давайте заслушаем результаты голосования.

Ученый секретарь

Позвольте огласить протокол голосования. Состав диссертационного совета утвержден в количестве 31 человека. Дополнительно введенные члены совета отсутствуют. Всего присутствовало на заседании 28 членов совета, в том числе докторов наук по профилю рассматриваемой диссертации – 12; очно присутствовало 21, в том числе докторов наук по

профилю рассматриваемой диссертации – 11; онлайн присутствовало 7, в том числе докторов наук по профилю рассматриваемой диссертации – 1.

Результаты голосования по вопросу о присуждении ученой степени кандидата физико-математических наук Демьянову Георгию Сергеевичу: за – 27, против – 1, недействительных бюллетеней – 0.

Председатель

Спасибо. Кто за утверждение протокола счетной комиссии? Прошу голосовать. Против? Воздержался? Протокол утверждается.

Теперь необходимо принять заключение диссертационного совета. Проект заключения был подготовлен и роздан членам совета. Есть ли замечания или предложения по проекту заключения? Если замечаний нет, ставлю вопрос на голосование. Кто за принятие заключения диссертационного совета? Против? Воздержался? Заключение диссертационного совета принято.

(Проект заключения принят единогласно).

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 27.05.2026г. № 3

О присуждении Демьянову Георгию Сергеевичу, гражданину Российской Федерации ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Эффективный учет дальнодействия в моделировании классических и квантовых кулоновских систем с помощью усредненного по углам потенциала Эвальда» по специальности 1.3.9 – физика плазмы принята к защите 18.03.2026г., (протокол заседания № 2) 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 образования и науки Российской Федерации № 105/нк от 11.04.2012г.

Соискатель Демьянов Георгий Сергеевич 1998 года рождения, в 2022 году окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)».

Работает в должности младшего научного сотрудника лаборатории № 7.1 – моделирования свойств материалов Теоретического отдела № 7 им. Л.М. Бибермана Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

Диссертация выполнена в лаборатории № 7.1 Теоретического отдела № 7 им. Л.М. Бибермана – моделирования свойств материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

Научный руководитель доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией № 7.1 Теоретического отдела № 7 им. Л.М. Бибермана Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Объединенный институт высоких температур Российской академии наук» Левашов Павел Ремирович.

Официальные оппоненты:

- доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник сектора теоретической астрофизики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физико-

технического института им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук Потехин Александр Юрьевич:

- доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник сектора плазмы и лазеров Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук Петров Юрий Васильевич

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук» (г. Москва) в своем положительном заключении, составленном ведущими научными сотрудниками ИПМ им. М.В. Келдыша РАН д.ф.-м.н. Веденяпиным В.В., д.ф.-м.н. Сакбаевым В.Ж. и научным сотрудником к.ф.-м.н. Вичевым И.Ю. (утвержденном 23.04.2026 г. директором членом-корреспондентом РАН М.В. Якобовским), указала, что диссертация представляет собой законченное научное исследование на актуальную тему, содержит новые важные результаты, которые могут применяться для решения различных теоретических и прикладных задач физики плазмы. Отдельно отмечена полученная в работе матрица плотности с учетом дальнего действия, которая позволяет учесть дальнедействующие взаимодействия квантовой двухкомпонентной системы.

Результаты работы могут быть использованы в научных и научно-образовательных центрах, а также в организациях, занимающихся моделированием неидеальной плазмы, кулоновских систем и экстремальных состояний вещества, в частности, в ФИЦ ПХФ и МХ РАН, ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ», АО «ГНЦ РФ – ФЭИ», РФЯЦ-ВНИИЭФ, РФЯЦ-ВНИИТФ им. Е.И. Забабахина, ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, ОИВТ РАН и МФТИ.

Соискатель имеет 20 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 9 работ в рецензируемых научных изданиях:

1. Demyanov G. S., Levashov P. R. Systematic derivation of angular-averaged Ewald potential // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. — 2022. — Т. 55, № 38. — С. 385202.
2. Demyanov G. S., Levashov P. R. One-component plasma of a million particles via angular-averaged Ewald potential: A Monte Carlo study // *Physical Review E*. — 2022. — Т. 106, № 1. — С. 015204.
3. Demyanov G. S., Levashov P. R. Accounting for long-range interaction in the Kelbg pseudopotential // *Contributions to Plasma Physics*. — 2022. — Т. 62, № 10. — e202200100.
4. Demyanov G. S., Onegin A. S., Levashov P. R. N-convergence in one-component plasma: Comparison of Coulomb, Ewald, and angular-averaged Ewald potentials // *Contributions to Plasma Physics*. — 2024. — Т. 64, № 6. — e202300164.
5. Onegin A. S., Demyanov G. S., Levashov P. R. Pressure of Coulomb systems with volume-dependent long-range potentials // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. — 2024. — Т. 57, № 20. — С. 205002.
6. Demyanov G. S., Levashov P. R. KelbgLIP: Program implementation of the high-temperature Kelbg density matrix for path integral and molecular dynamics simulations with long-range Coulomb interaction // *Computer Physics Communications*. — 2024. — Т. 305. — С. 109326.
7. Demyanov G. S., Onegin A. S., Levashov P. R. Reply to Comment on ‘Pressure of Coulomb systems with volume-dependent long-range potentials’ // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. — 2025. — Т. 58, № 8. — С. 088002.
8. Demyanov G. S., Onegin A. S., Levashov P. R. Comment on “A random batch Ewald method for charged particles in the isothermal–isobaric ensemble” [J. Chem. Phys. 157, 144102 (2022)] // *The Journal of Chemical Physics*. — 2025. — Т. 162, № 17. — С. 177101.
9. Demyanov G. S., Levashov P. R. Molecular dynamics of nondegenerate hydrogen plasma using improved Kelbg pseudopotential with electron thermal de Broglie wavelength correction // *Physics of Plasmas*. — 2025. — Т. 32, №12. — С. 123901.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет» (доцент кафедры вычислительной физики и моделирования физических процессов к.т.н. Файрушин И. И.) - отзыв положительный, с замечаниями:

- Может ли УУПЭ быть использован для получения траекторий частиц (ионов) жидкой ОКП методом МД с последующим корректным расчетом динамического структурного фактора?

2. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт космических исследований Российской академии наук (старший научный сотрудник к.ф.-м.н. Думин Ю.В.) - отзыв положительный, с замечаниями:

- В автореферате широко используются различные аббревиатуры, при этом некоторые из них расшифровываются при первом употреблении (например, МК – метод Монте-Карло), а другие – нет (например, МД – молекулярная динамика). В то же время далеко не очевидно, что термин “молекулярная динамика” хорошо известен каждому специалисту по физике плазмы. То же самое относится и к употреблению диссертантом своеобразного научного жаргона. Например, на протяжении всего автореферата многократно используется фраза “учёт дальнего действия”, но при этом её точный смысл не всегда достаточно понятен (так как, в принципе, все рассматриваемые в работе системы являются дальнедействующими).

- Включённые в автореферат рисунки, в принципе, очень хорошо иллюстрируют основные положения работы; однако оформление рисунков не всегда является достаточно аккуратным. В ряде случаев отсутствуют необходимые пояснения к обозначениям (например, на Рис. 10 и 11 не мешало бы пояснить, что такое r_s и r_a). По-видимому, это связано с тем, что при переносе из диссертации в автореферат были потеряны некоторые необходимые комментарии.

3. Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)» (старший преподаватель, заместитель заведующего кафедрой теоретической физики им. Ландау к.ф.-м.н. Черноусов И. В.) - отзыв положительный, с замечаниями:

- В работе используется метод квазиклассической молекулярной динамики для описания водородной плазмы. При этом в моделировании явно участвуют электроны, квантовая природа которых проявляется несмотря на малое вырождение. Стоит отметить, что даже в этом случае динамика системы не соответствует реальной динамике квантовой системы, описываемой оператором эволюции. Таким образом, этот метод не позволит получать истинные квантовые динамические свойства системы (например, динамический структурный фактор).

- В работе представлен улучшенный псевдопотенциал Кельбга с учетом дальнего действия. Однако в его выводе присутствует некоторое приближение, поскольку улучшенный псевдопотенциал Кельбга был получен из расчета матрицы плотности при конечной температуре, тогда как дополнительный вклад, отвечающий за дальнее действие, берется из высокотемпературного решения.

4. 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:

- В качестве замечания, носящего скорее характер пожелания на будущее, могу отметить, что сходимость расчетов с использованием усредненного по углам потенциала Эвальда к термодинамическому пределу можно было бы исследовать более детально, уделив еще большее внимание сравнению со сходимостью при расчете методом Эвальда. В частности, было бы интересно понять, насколько меньшее отклонение рассчитанного значения энергии от термодинамического предела будет достигаться при использовании усредненного потенциала Эвальда, по сравнению с расчетом по методу Эвальда при том же расчетном времени и разном, но большом, N . Отмечу также, что для оценки зависимости энергии ОКП от числа частиц я бы использовал скорее разложение в ряд по $(1/N)$, чем примененную в диссертации аппроксимацию $\sim(1/N)^{\gamma}$, но это замечание носит дискуссионный характер и требует проверки.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается:

- д.ф.-м.н. Потехин Александр Юрьевич является признанным специалистом в области физики плотной и неидеальной плазмы, кулоновских систем, физики нейтронных звезд и астрофизики. Опыт научной работы Потехина А.Ю. в области физики плотной и неидеальной плазмы, кулоновских систем, уравнений состояния и астрофизических приложений позволяет ему объективно и критично оценивать научную новизну и обоснованность представленных результатов. Потехин А.Ю. ранее успешно выступал в роли официального оппонента по смежным научным проблемам и обладает глубоким пониманием специфики теоретических и численных методов, применяемых при исследовании кулоновских систем. Его независимость и высокий авторитет в научном сообществе обеспечивают объективную и справедливую оценку диссертационной работы.

1. Potekhin A. Y., Yakovlev D. G. Urca cooling of the neutron star in the Cassiopeia A supernova remnant //Journal of High Energy Astrophysics. – 2025. – С. 100441.

2. Potekhin A. Y., Gusakov M. E., Chugunov A. I. Thermal evolution of neutron stars in soft X-ray transients with thermodynamically consistent models of the accreted crust //Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. – 2023. – Т. 522. – №. 4. – С. 4830-4840.

3. Potekhin A. Y., Chugunov A. I., Shchepochin N. N., Gusakov M. E. Cooling of neutron stars in soft X-ray transients with realistic crust composition //Journal of High Energy Astrophysics. – 2025. – Т. 45. – С. 116-124.

- д.ф.-м.н. Петров Юрий Васильевич является признанным специалистом в области физики экстремальных состояний вещества, неидеальной плазмы, уравнений состояния, физики высоких плотностей энергии и процессов взаимодействия ультракоротких лазерных импульсов с веществом. Опыт научной работы Петрова Ю.В. в области уравнений состояния, неидеальной водородной плазмы, физики конденсированного состояния и численного моделирования сильнонеравновесных систем позволяет ему объективно и критично оценивать научную новизну и обоснованность представленных результатов. Петров Ю.В. ранее успешно выступал в роли официального оппонента по смежным научным проблемам и обладает глубоким пониманием специфики теоретических и численных методов, применяемых при исследовании плазменных и кулоновских систем. Его участие как оппонента способствует всесторонней и критической оценке представленной диссертации.

1. Петров Ю. В., Ромашевский С.А., Дышлюк А.В., Хохлов В.А., Еганова Е.М., Поляков М.В., Евлашин С.А., Ашитков С.И., Витрик О.Б., Иногамов Н.А. Аномальное пропускание света оптически толстыми пленками никеля, являющимися оптоакустическими трансдьюсерами //Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2025. – Т. 167. – №. 5. – С. 645-671.

2. Дышлюк А. В., Ромашевский С. А., Петров Ю. В., Хохлов В. А., Витрик О. Б., Иногамов Н. А. Моделирование бриллюэновских осцилляций, порожденных метаматериалом на основе наноструктурированной пленки никеля // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2026. – Т. 123. – № 3. – С. 177–186.

3. Неласов И. В., Манохин С. С., Колобов Ю. Р., Жаховский В. В., Перов Е. А., Петров Ю. В., Хомич Ю. В., Малинский Т. В., Иногамов Н. А., Роголин В. Е. Эволюция микроструктуры приповерхностного слоя меди при термоциклировании лазерными импульсами наносекундной длительности // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2025. – Т. 167. – № 6. – С. 782–797.

- Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук» является ведущей научной организацией в области математического моделирования сложных физических систем, включая плазменные и кулоновские системы. Тематика работ сотрудников организации охватывает кинетические модели, задачи математической физики, численные методы и моделирование плазменных процессов, а также проведение расчетов различных свойств сильно взаимодействующих кулоновских систем. Высокая научная репутация

организации и опыт проведения исследований по смежным задачам обеспечивают квалифицированную и критическую оценку диссертационной работы.

1. Теплухин А. В. Расчет термодинамических и структурных характеристик жидких углеводородов методом Монте-Карло //Журнал структурной химии. – 2021. – Т. 62. – №. 1. – С. 73-85.

2. Орлов Ю. Н., Сакбаев В. Ж. Формулы Фейнмана–Каца для решений нестационарно возмущенных эволюционных уравнений //Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2025. – Т. 65. – №. 1. – С. 69-87.

3. Ovechkin A. A., Loboda P. A., Korolev A. S., Kolchugin S. V., Vichev I. Yu., Solomyannaya A. D., Kim D. A., Grushin A. S. Ionization balance of non-LTE plasmas from an average-atom collisional-radiative model //Matter and Radiation at Extremes. – 2022. – Т. 7. – №. 6.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– Разработан и аналитически обоснован усредненный по углам потенциал Эвальда для одно- и двухкомпонентных кулоновских систем, позволяющий эффективно учитывать дальнедействующие взаимодействия при периодических граничных условиях;

– Получены выражения для потенциальной энергии и давления кулоновских систем с учетом дальнедействия, включая поправки к вириальному давлению для потенциалов, зависящих от объема, что обеспечивает термодинамическую согласованность расчетов;

– Проведено моделирование однокомпонентной плазмы методом Монте-Карло с числом частиц до одного миллиона и построено уравнение состояния ОКП в широком диапазоне параметра неидеальности;

– Получена высокотемпературная кулоновская матрица плотности и обобщенный псевдопотенциал Кельбга с учетом дальнедействия, реализованные в программном комплексе KelbgLIP; проведено моделирование невырожденной водородной плазмы, рассчитаны ее радиальные функции распределения, степень ионизации, состав, энергия, давление и табличное уравнение состояния, а также предложено решение проблемы нефизической кластеризации при низких температурах.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

– В работе последовательно построен математически обоснованный и эффективный подход к учету дальнедействующего кулоновского взаимодействия в классических и квантовых системах, получены новые аналитические выражения для энергии, давления, матрицы плотности и псевдопотенциала;

– Исследовано влияние дальнедействия на сходимость термодинамических характеристик к термодинамическому пределу, а также показана возможность эффективного использования усредненного по углам потенциала Эвальда в крупномасштабном численном моделировании кулоновских систем.

– Развито квантово-статистическое описание невырожденной водородной плазмы с учетом кулоновского дальнедействия: получены термодинамические и структурные характеристики, включая уравнение состояния, радиальные функции распределения, степень ионизации и состав плазмы, а также предложен способ устранения нефизической кластеризации при моделировании с улучшенным псевдопотенциалом Кельбга.

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

– Разработанный подход на основе УУПЭ повышает вычислительную эффективность моделирования кулоновских систем и позволяет проводить расчеты с существенно большим числом частиц;

– Полученные данные для однокомпонентной плазмы и невырожденной водородной плазмы могут использоваться при построении и уточнении уравнений состояния в термодинамическом пределе;

– Выведенные выражения для матрицы плотности, псевдопотенциала Кельбга, энергии и давления с учетом дальнего действия могут быть применены в квантово-статистическом моделировании плазмы;

– Реализованный программный комплекс KelbgLIP может использоваться и развиваться для расчетов методом Монте-Карло с интегралами по траекториям и методом молекулярной динамики;

– Предложенный способ учета конечного значения тепловой длины волны де Бройля электронов расширяет возможности квазиклассического моделирования невырожденной водородной плазмы при низких температурах.

Результаты работы могут быть использованы при построении и уточнении широкодиапазонных моделей плазмы, интерпретации расчетных и экспериментальных данных, моделировании неидеальных кулоновских систем и разработке специализированных вычислительных комплексов для классического и квантово-статистического описания плазмы, в частности, в ФИЦ ПХФ и МХ РАН, ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ», АО «ГНЦ РФ – ФЭИ», РФЯЦ-ВНИИЭФ, РФЯЦ-ВНИИТФ им. Е.И. Забабахина, ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, ОИВТ РАН и МФТИ.

Достоверность полученных результатов обеспечивается последовательным аналитическим выводом используемых выражений, проверкой их предельных случаев и сопоставлением численных расчетов с независимыми известными результатами. Корректность учета дальнего действующего кулоновского взаимодействия с помощью усредненного по углам потенциала Эвальда подтверждается сравнением с обычным потенциалом Эвальда, расчетом постоянных Маделунга, анализом радиальных функций распределения и исследованием сходимости термодинамических величин по числу частиц. Для однокомпонентной плазмы полученные значения энергии и построенное уравнение состояния согласуются с аналитическими результатами в области слабого взаимодействия, теоретическими оценками и литературными численными данными. Для невырожденной водородной плазмы достоверность расчетов подтверждается использованием матрицы плотности и псевдопотенциала Кельбга, проверкой термодинамического предела, сравнением с результатом теории Дебая–Хюккеля при малом параметре неидеальности, литературными данными расчетов по химической модели плазмы и расчетами методом Монте-Карло с интегралами по траекториям, а также анализом состава плазмы, степени ионизации и радиальных функций распределения. Автор стал победителем конкурса для аспирантов и молодых ученых «PhD Student», получив индивидуальный грант Фонда развития теоретической физики и математики «Базис». Также автор получил первую премию конкурса научных работ студентов и молодых ученых ОИВТ РАН в номинации "Работы аспирантов и молодых ученых без степени в возрасте до 30 лет" за результаты, представленные в диссертационной работе.

Результаты работы опубликованы в высокорейтинговых научных журналах по тематике физики плазмы и статистической физики, а также представлены на международных и всероссийских конференциях, что дополнительно подтверждает их достоверность.

Личный вклад соискателя состоит в проведении численных расчетов, выполнении аналитических преобразований, обработке и анализе результатов, написании программного обеспечения, сравнении полученных данных с литературными результатами и подготовке публикаций по теме диссертации. Все результаты, включенные в диссертацию, получены автором лично под научным руководством доктора физико-математических наук Левашова П.Р. Выводы и положения, выносимые на защиту, сформулированы лично автором.

Апробация результатов исследования проводилась на 11 российских и международных конференциях при личном выступлении соискателя. Публикации по выполненной работе также подготовлены при определяющем участии автора.

В ходе защиты диссертации критических замечаний высказано не было.

Соискатель Демьянов Георгий Сергеевич ответил на задаваемые ему в ходе заседания вопросы, согласился с замечаниями, привел собственную аргументацию.

На заседании от 27.05.2026 г. диссертационный совет принял решение за решение научной задачи, имеющей значение для развития физики плазмы, а именно за разработку, аналитическое обоснование, программную реализацию и применение вычислительно эффективных методов моделирования классических и квантовых невырожденных кулоновских систем с корректным учетом дальнедействующих взаимодействий на основе усредненного по углам потенциала Эвальда присудить Демьянову Георгию Сергеевичу ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

При проведении тайного голосования Диссертационный совет 24.1.193.01 (Д 002.110.02) в количестве 28 человек, из них очно: 11 докторов наук по специальности 1.3.9. – физика плазмы и 8 докторов наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника; дистанционно: 1 доктор наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 5 докторов науки 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 27, против 1, недействительных бюллетеней - 0

Председатель диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02)
Академик РАН
д.ф.-м.н., профессор

Ученый секретарь диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02)
к.ф.-м.н.

Петров О.Ф.

Тимофеев А.В.
27.05.2026г.