

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 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 25.12.2019г. № 12

О присуждении Кадатскому Максиму Алексеевичу, гражданину Российской Федерации ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Квантово-статистический _____ расчёт термодинамических свойств простых веществ и смесей при высоких плотностях энергии» по специальности 01.04.08 – физика плазмы принята к защите 23.10.2019г., (протокол заседания № 9) диссертационным советом 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 Кадатский Максим Алексеевич 1992 года рождения, в 2015 году окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)»

Работает в должности научного сотрудника лаборатории № 16 – широкодиапазонных уравнений состояния Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

В 2019 году окончил очную аспирантуру Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего

образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)».

Диссертация выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук.

Научный руководитель кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией №16 федерального государственного бюджетного учреждения науки «Объединенный институт высоких температур Российской академии наук» Хищенко Константин Владимирович.

Официальные оппоненты:

- доктор физико-математических наук, эксперт-советник Отдела № 15 Федерального государственного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук» Шпатаковская Галина Васильевна;

- доктор технических наук, профессор, главный научный сотрудник Отдела экстремальных состояний вещества Института проблем химической физики Российской академии наук Острик Афанасий Викторович

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (г. Москва) в своем положительном заключении, составленном директором института лазерных и плазменных технологий (ЛаПлаз) НИЯУ МИФИ, д.ф.-м.н., профессором Кузнецовым А.П. (утвержденном 04.12.2019г. ректором НИЯУ МИФИ, д.ф.-м.н., профессором Стрихановым М.Н.) отметила научную и практическую значимость работы.

Соискатель имеет 21 публикацию в тезисах докладов и 6 опубликованных работ по теме диссертации в реферируемых журналах из списка ВАК:

- 1) *Kadatskiy M. A., Khishchenko K. V.* Термодинамические свойства латуни при высоких температурах в рамках модели Хартри–Фока–Слэтера // Известия Кабардино-Балкарского государственного университета. — 2014. — Т. 4, № 3. — С. 67—73.
- 2) *Kadatskiy M. A., Khishchenko K. V.* Comparison of Hugoniot calculated for aluminum in the framework of three quantum-statistical models // Journal of Physics: Conference Series. — 2015. — Vol. 653. — P. 012079.
- 3) *Kadatskiy M. A., Khishchenko K. V.* Shock compressibility of iron calculated in the framework of quantum-statistical models with different ionic parts // Journal of Physics: Conference Series. — 2016. — Vol. 774. — P. 012005.
- 4) *Kadatskiy M. A., Khishchenko K. V.* Theoretical investigation of the shock compressibility of copper in the average-atom approximation // Physics of Plasmas. — 2018. — Vol. 25, no. 11. — P. 112701.
- 5) *Kadatskiy M. A.* Quantum-statistical calculations of the thermodynamic properties of molybdenum at high energy densities // High Energy Density Physics. — 2019. — Vol. 33. — P. 100700.
- 6) *Orlov N. Yu., Kadatskiy M. A., Denisov O. B., Khishchenko K. V.* Application of quantum-statistical methods to studies of thermodynamic and radiative processes in hot dense plasmas // Matter and Radiation at Extremes. — 2019. — Vol. 4, no. 5. — P. 054403.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

- 1) **Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Кабардино-Балкарский Государственный университет им. Х.М. Бербекова»** (зав. кафедрой физики наносистем д.ф.-м.н. Савинцев А.П.) – отзыв положительный, с замечаниями:
 - а) В тексте автореферата нет разъяснения, что за параметр ρ_{00} и, соответственно, что означает в подписи к рисунку 3 выражение $\rho_{00} = \rho_0 = 2.712 \text{ г/см}^3$.

б) На рисунке 3 автором многие источники результатов измерений обозначены чисто символически (например, Волков 1980, Подурец 1994 и т.п.) и не расшифрованы в примечаниях, как, например, Ragan 1982, Ragan 1984.

в) В издании отсутствуют пробелы между подписью к рисунку и текстом автореферата, что усложняет знакомство с материалом.

2) Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» Саровский физико-технический институт — филиал федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (СарФТИ НИЯУ МИФИ) (доцент кафедры прикладной математики к.ф.-м.н. Вронский М.А.) – отзыв положительный, с замечаниями:

а) Формулы модели ХФС раздела 1 первой главы фактически полностью (за исключением формулы (1.26) для плотности числа состояний промежуточной группы) взяты из [Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы. М.: Физматлит. 2000.] Наиболее важную часть реализации модели представляют особенности алгоритмов. Описание таких особенностей полностью отсутствует в диссертации. Без такого описания (хотя бы некоторых особенностей) трудно сделать вывод о том, что сделано автором самостоятельно.

б) Промежуточные состояния с указанными граничными условиями не ортогональны состояниям дискретного спектра (с выбранным граничным условием $R_{nl}(r_0) = 0$). Ортогональность состояний существенно используется при сведении многоэлектронной задачи к одноэлектронной. Исследование того, велика ли степень этой неортогональности, и как она может повлиять на рассчитанные термодинамические функции, в диссертации отсутствует.

в) Формулы для нахождения давления и внутренней энергии электронной

компоненты взяты из [Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б. *Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы*. М.: Физматлит. 2000.]. Вместе с тем, известно, что расчёт по этим формулам имеет ряд серьёзных трудностей, которые в том числе приводят к отказу (во всяком случае для давления) от формул типа (1.30а), а применению теоремы вириала и иных подходов (см., например, [Lieberman D. A. *Self-consistent field model for condensed matter // Physical Review B*. 1979. V. 20, No. 12. P. 4981-4989.],[Овечкин А. А., Новиков В. Г., Грушин А. С. *Особенности вычисления энтропии в моделях самосогласованного поля // Теплофизика высоких температур*. 2011. Т. 49, № 6. С. 845—855.], ссылки на которые есть в диссертации, а также [Новиков В.Г., Овечкин А.А. *Вычисление давления в модели ограниченного атома*. М.: ИПМ им. М.В.Келдыша РАН. 2009. *Препринт № 77*. 26 с.]). Никаких упоминаний о такого рода сложностях и путях их преодоления в диссертации нет.

г) При рассмотрении вклада в термодинамические функции ионов считается, что они имеют заряд Z_0 , равный средней степени ионизации плазмы. Это означает, что ионы рассматриваются вместе со связанными электронами. С другой стороны, вклад связанных электронов уже учтён. Таким образом, возможен двойной учёт некоторых составляющих.

д) В диссертации много говорится об эталоне. При этом, подтверждений более высокого качества получаемых уравнений состояния (по сравнению с моделями ТФ или ТФП), по-моему, недостаточно. Наличие осцилляций термодинамических величин, которые трактуются, как оболочечные эффекты, таким подтверждением не является. Например, из рисунка 1.2 (а также других) видим значительное отклонение результатов расчётов по реализованной модели ХФС там, где ТФ и ТФП - близки (при температурах выше 100 эВ), а значит, квантовые поправки - малы и ХФС также должна давать результаты, близкие к ТФ.

е) По моему мнению, в диссертации недостаточно отражены результаты, полученные В. Г. Новиковым и А. С. Грушиным (ИПМ им. М. В. Келдыша

РАН), очень близкие к тематике диссертации.

3) Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова» (ФГУП «ВНИИА») (старший научный сотрудник подразделения №171 - лаборатории компьютерного материаловедения Центра фундаментальных и прикладных исследований ФГУП «ВНИИА» к.ф.-м.н. Дьячков С.А.) – отзыв положительный, с замечанием:

а) Квантово-статистические модели, используемые диссертантом для расчетов и реализованные в авторском программном коде, очень сложны с точки зрения используемых численных алгоритмов, однако эти детали совершенно не раскрыты автором. В частности, не раскрываются детали программной реализации (языки программирования, используемые библиотеки, архитектура программы), а также характерное время расчета одной точки в таблице широкодиапазонного уравнения состояния.

4) Федеральное государственное унитарное предприятие «Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина» Государственной корпорации по атомной энергии «Росатом» (начальник лаборатории научно-исследовательского отделения №4, к.т.н. Смирнов Е.Б.) – отзыв положительный, без замечаний.

5) Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук (руководитель отдела взаимодействия когерентного излучения с веществом, д.ф.-м.н. Красюк И.К.) – отзыв положительный, без замечаний.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается:

д.ф.-м.н. **Шпатаковская Галина Васильевна** является признанным специалистом в области разработки квантово-статистических моделей строения вещества, использующих приближение среднего атома.

1) Shpatakovskaya G. V., Karpov V. Ya. "Shell correction to the Thomas—Fermi statistical model of plasma with different atomic composition at high and low temperatures." *Journal of Physics: Conference Series*. Vol. 653. No. 1. IOP Publishing, 2015.

2) Shpatakovskaya G. V., Karpov V. Ya. "Atomic number scaling of electron spectra in the free atoms." *Journal of Physics: Conference Series*. Vol. 774. No. 1. IOP Publishing, 2016.

3) Шпатаковская Г. В. "Квазиклассический метод анализа и оценки орбитальных энергий связи в многоэлектронных атомах и ионах." *Успехи физических наук* 189.2 (2019): 195-206.

д.т.н., профессор **Острик Афанасий Викторович** является признанным специалистом в области построения широкодиапазонных уравнений состояния композитных материалов.

1) Ostrik A. V. "Numerical modeling of droplets growth and their thermal radiation from metallic targets heated by heavy ion beams." 2015 IEEE International Conference on Plasma Sciences (ICOPS). IEEE, 2015.

2) Ким В. В., Ломоносов И. В., Острик А. В. "Численная реализация табличных уравнений состояния компонентов композиционных материалов в современных гидрокодах." *Конструкции из композиционных материалов* 2 (2015): 39-45.

3) Острик А. В., Бугай И. В. "Моделирование переноса потока ионизирующего излучения в многослойных преградах." *Информационно-технологический вестник* 3 (2018): 143-157.

В Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» проводятся как фундаментальные, так и прикладные исследования по направлениям, соответствующим специальности физика плазмы. В Институте лазерных и плазменных технологий (ЛаПлаз) ведутся интенсивные работы по изучению поведения веществ, находящихся в состояниях с высокой плотностью энергии.

- 1) Богданова Ю. А., Губин С. А., Викторов С. Б., Губина Т. В. "Теоретическая модель уравнения состояния двухкомпонентного флюида с потенциалом $\exp(-6)$ на основе теории возмущений." Теплофизика высоких температур 53.4 (2015): 506-516.
- 2) Bogdanova Y. A., Gubin S. A., Victorov S. B., Anikeev A. A. "Application of a Theoretical Model of State Equation for Calculation of N_2 , O_2 , and CO_2 Shock Adiabatic Curves." Russian Physics Journal 59.2 (2016): 190-196.
- 3) Kozlova S. A., Gubin S. A., Maklashova I. V., Selezenev A. A. "Molecular-dynamic simulations of the thermophysical properties of hexanitrohexaazaisowurtzitane single crystal at high pressures and temperatures." Russian Journal of Physical Chemistry A 91.11 (2017): 2157-2160.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

- 1) Предложен алгоритм расчёта термодинамических зависимостей, позволяющий получить новую информацию об уравнении состояния простых веществ и смесей в области горячей плотной плазмы (в диапазоне температур от 0.1 до 10^4 эВ, и в диапазоне плотностей от ρ_0 до $6\rho_0$). В широком диапазоне температур (от 0.1 до 10^4 эВ) получены значения изохорической и изобарической электронной теплоёмкости алюминия ($\rho = 2.712$ г/см³) и молибдена ($\rho = 10.22$ г/см³) по моделям Томаса-Ферми, Томаса-Ферми с поправками и Хартри-Фока-Слэтера. С помощью рассчитанных зависимостей может быть получена оценка электронной температуры, получаемой в экспериментах по изучению взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с веществом.
- 2) Построены ударные адиабаты сплошных и пористых образцов Al, Fe, Cu, Mo и SiO_2 в диапазоне давлений от 100 до 10^7 ГПа, рассчитанные по варианту модели Хартри-Фока-Слэтера, в котором автоматически определяется число состояний образующих зонную структуру электронов, с учётом вклада ионной подсистемы по моделям идеального газа

Больцмана (для простых веществ и соединений) и заряженных твёрдых сфер (для простых веществ).

- 3) Предложены аппроксимации ударных адиабат алюминия, железа, меди и молибдена, рекомендованные для проведения интерпретации результатов экспериментов, где перечисленные вещества используются в качестве эталонов. На основе полученных аппроксимаций дана оценка области применимости модели Хартри-Фока-Слэтера с учётом ионной подсистемы по модели заряженных твёрдых сфер.
- 4) По моделям Томаса-Ферми с поправками и Хартри-Фока-Слэтера с учётом вклада ионной подсистемы по моделям идеального газа Больцмана и заряженных твёрдых получены зависимости относительного изменения скорости фронта ударных волн при прохождении границы раздела двух веществ: Fe–Al, Mo–Al, SiO₂–Al, Al–Mo, Fe–Mo и Pb–Cu. Это позволило локализовать область параметров, где можно экспериментально подтвердить наличие наблюдаемых в теории осцилляций. Дана оценка (равная 0.5%) необходимой относительной точности измерения волновых скоростей, при которой возможно экспериментальное подтверждение наличие наблюдаемых в теории осцилляций термодинамических зависимостей.
- 5) На основе модели Хартри-Фока-Слэтера с учётом вклада ионной подсистемы по модели заряженных твёрдых сфер проведена интерпретация экспериментальных данных других авторов по относительным измерениям сжимаемости Al в сильных ударных волнах с использованием эталонов из Fe и Mo.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

- 1) на основе сравнения результатов расчётов зависимости относительного изменения скорости фронта ударных волн при прохождении границы раздела алюминия и железа по моделям Хартри-Фока-Слэтера и Томаса-Ферми с поправками получено теоретическое подтверждение наличия осцилляций значений плотности вещества на ударных адиабатах при

высоких давлениях.

Значение полученных соискателем результатов **исследования для практики подтверждается:**

- 1) полученной оценкой необходимой относительной точности измерения волновых скоростей, при которой возможно экспериментальное подтверждение наличие наблюдаемых в теории осцилляций значений плотности вещества на ударных адиабатах при высоких давлениях;
- 2) полученными аппроксимациями ударных адиабат эталонных веществ (Al, Fe, Cu и Mo);
- 3) проведённой интерпретацией экспериментальных данных других авторов по относительным измерениям сжимаемости Al в сильных ударных волнах с использованием эталонов из Fe и Mo.

Результаты работы могут быть использованы в научных и научно-образовательных центрах, в которых проводятся исследования поведения веществ в экстремальных условиях, в частности, в Объединенном институте высоких температур РАН, в Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, в Институте проблем химической физики РАН, в Федеральном государственном унитарном предприятии «Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина», в Институте гидродинамики им. М.А. Лаврентьева СО РАН, в Московском физико-техническом институте (национальном исследовательском университете), в Национальном исследовательском ядерном университете «МИФИ».

Достоверность результатов исследования подтверждается сравнением полученных результатов с большим массивом доступных экспериментальных данных и с результатами аналогичных расчётов по другим теоретическим моделям.

Личный вклад соискателя является определяющим. Представленные расчётные алгоритмы реализованы соискателем в виде программ. Все

основные результаты диссертации получены соискателем самостоятельно.

Апробация результатов исследования проводилась на 28 российских и международных конференциях. Основные публикации по выполненной работе также подготовлены при определяющем участии автора.

Диссертационным советом сделан вывод о том, что диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, которая соответствует критериям пункта 9, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013г.

На заседании от 25.12.2019 г. диссертационный совет принял решение присудить Кадатскому Максиму Алексеевичу ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 23 человек, из них 10 докторов наук по специальности 01.04.08 — «Физика плазмы» и 13 докторов наук по специальности 01.04.14 — «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.

Зам. председателя диссертационного совета Д 002.110.02

д.ф.-м.н., профессор

Андреев Н.Е.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 002.110.02

д.ф.-м.н.



Васильев М.М.

25.12.2019г.