

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Князева Дмитрия Владимировича  
«РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ, ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И ОПТИЧЕСКИХ  
СВОЙСТВ ПЛОТНОЙ ПЛАЗМЫ НА ОСНОВЕ МЕТОДА КВАНТОВОЙ  
МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И ФОРМУЛЫ КУБО-ГРИНВУДА»  
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук  
по специальности 01.04.08 – Физика плазмы

Диссертация Князева Дмитрия Владимировича посвящена актуальной теме расчета коэффициентов переноса в плотной неидеальной плазме, объекте, который плохо поддается аналитическим исследованиям и требует для своего изучения широкого применения численных методов и компьютерного моделирования. Важнейшим из таких методов, наиболее близким к *ab initio*, является метод квантовой молекулярной динамики, который сочетает в себе неизбежный квантовый характер электронной подсистемы при температурах ниже температуры вырождения и классический характер ионов при температурах выше дебаевской, которые только и рассматриваются в диссертационном исследовании Д.В. Князева. Квантовый характер электронов учитывается решением уравнений Кона-Шэма в методе функционала плотности с дальнейшим применением формул Кубо-Гринвуда для расчета коэффициентов Онзагера и коэффициентов электропроводности и теплопроводности. Все рассматриваемые приближения являются самым современным подходом к расчету термодинамических характеристик и кинетических коэффициентов плотного вещества, поэтому исследования, проведенные Д.В. Князевым, имеют важное значение. Они тесно связаны с изучением воздействия интенсивных потоков энергии на конденсированное вещество, в частности, взаимодействия ультракоротких лазерных импульсов с конденсированными мишенями, и вносят существенный вклад в исследования, проводимые в этой области.

Работа Д.В. Князева характеризуется высоким уровнем организации исследований, достоверность результатов подтверждается тщательным изучением влияния большого числа различных факторов в расчетах, таких, как число атомов (в значительной мере ограниченное вследствие трудоемкости расчетов), число и способ выбора ионных конфигураций, уширение дельта-функции в формуле Кубо-Гринвуда, число точек в пространстве волновых векторов, выбор псевдопотенциала и обменно-корреляционного функционала, энергия обрезания, число используемых энергетических зон. По поводу использования псевдопотенциального приближения можно сделать замечание, поскольку автор рассчитывает электропроводность плазмы эффективного состава  $\text{CH}_2$  вплоть до температур 10 кК, при которых для достаточно легкого атома углерода возможно возбуждение и самых внутренних электронов. Может быть, наряду с расчетами с различным выбором псевдопотенциала в пакете программ VASP, следует провести расчеты по программам, не использующим приближения псевдопотенциала, а учитывающих температурное возбуждение всех электронов.

Следует отметить ясное, четкое изложение содержания диссертационной работы в автореферате. Но можно сделать следующее техническое замечание к его тексту, в котором присутствует достаточно много ссылок на работы других авторов (например, указывается (Кришиан, 1993)), но список литературы, на которую имеются ссылки, в автореферате не приводится. Хотелось бы, чтобы литература, на которую приводятся ссылки, присутствовала не только в тексте диссертации, но и автореферате. Все перечисленные замечания носят рекомендательный характер и не снижают общей значимости диссертационной работы.

Диссертация Князева Д.В. представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным пунктом 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением

Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. Князев Дмитрий Владимирович заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 – Физика плазмы.

Отзыв составлен старшим научным сотрудником сектора плазмы и лазеров Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук (ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН), доктором физико-математических наук Петровым Юрием Васильевичем.

д.ф.-м.н., старший научный сотрудник  
сектора плазмы и лазеров ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН  
142432, Московская область, г. Черноголовка,  
просп. Академика Семенова, д. 1-А  
8-(495)-702-93-17, uvr49@mail.ru

Петров Ю.В.

Ученый секретарь ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН  
к. х. н.  
142432, Московская область, г. Черноголовка,  
просп. Академика Семенова, д. 1-А  
8-(495)-702-93-17, sakr@itp.ac.ru



Крашаков С.А.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук (ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН)  
142432, Московская область, г. Черноголовка, просп. Академика Семенова, д. 1-А  
8-(495)-702-93-17, office@itp.ac.ru