

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

СТЕНОГРАММА

заседания диссертационного совета Д 002.110.02
на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Объединенного института высоких температур Российской академии наук
(125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2)
от 23 декабря 2015 г. (протокол № 17)

**Защита диссертации Князева Дмитрия Владимировича
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
«Расчет электропроводности, теплопроводности и оптических свойств
плотной плазмы на основе метода квантовой молекулярной динамики и
формулы Кубо-Гринвуда»**

Специальность 01.04.08 – физика плазмы

Москва – 2015

СТЕНОГРАММА

заседания диссертационного совета Д 002.110.02
на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Объединенного института высоких температур Российской академии наук
(125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2)
Протокол № 17 от 23 декабря 2015 г.

Диссертационный совет 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 26 человек, из них 12 докторов наук по специальности 01.04.08 – физика плазмы и 14 докторов наук по специальности 01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника. Дополнительно введены на разовую защиту 0 человек. Кворум имеется.

Председатель – зам. председателя диссертационного совета Д 002.110.02
д.ф.-м.н., профессор Андреев Н.Е.

Ученый секретарь – ученый секретарь диссертационного совета Д 002.110.02
к.ф.-м.н. Васильев М.М.

1	Фортов В.Е.	Академик, д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Отсутствует
2	Канель Г.И.	Чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Присутствует
3	Андреев Н.Е.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
4	Васильев М.М.	К.ф.-м.н.	01.04.08	Присутствует
5	Агранат М.Б.	Д.ф.-м.н., с.н.с.	01.04.14	Присутствует
6	Амиров Р.Х.	Д.ф.-м.н., с.н.с.	01.04.08	Присутствует
7	Баженова Т.В.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
8	Вараксин А.Ю.	Чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Присутствует
9	Васильев М.Н.	Д.т.н., профессор	01.04.14	Присутствует
10	Василяк Л.М.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
11	Ваулина О.С.	Д.ф.-м.н.	01.04.08	Отсутствует
12	Воробьев В.С.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
13	Голуб В.В.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Присутствует
14	Гордон Е.Б.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
15	Грязнов В.К.	Д.ф.-м.н.	01.04.14	Присутствует
16	Зейгарник Ю.А.	Д.т.н., с.н.с.	01.04.14	Присутствует
17	Еремин А.В.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Присутствует
18	Иванов М.Ф.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Присутствует
19	Иосилевский И.Л.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
20	Кириллин А.В.	Д.ф.-м.н.	01.04.14	Присутствует
21	Лагарьков А.Н.	Академик, д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Отсутствует
22	Ломоносов И.В.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Присутствует
23	Медин С.А.	Д.т.н., профессор	01.04.14	Присутствует
24	Норман Г.Э.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
25	Петров О.Ф.	Чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
26	Полежаев Ю.В.	Чл.-корр. РАН, д.т.н., профессор	01.04.14	Отсутствует
27	Савватимский А.И.	Д.т.н.	01.04.14	Присутствует
28	Сон Э.Е.	Чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
29	Старостин А.Н.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Присутствует
30	Храпак А.Г.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.14	Присутствует
31	Якубов И.Т.	Д.ф.-м.н., профессор	01.04.08	Отсутствует

ПОВЕСТКА ДНЯ

На повестке дня защита диссертации и.о. младшего научного сотрудника лаборатории 1.2.2.4 – моделирования свойств материалов Научно-исследовательского центра теплофизики экстремальных состояний (НИЦ-1 ТЭС) Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН) **Князева Дмитрия Владимировича** на тему «Расчет электропроводности, теплопроводности и оптических свойств плотной плазмы на основе метода квантовой молекулярной динамики и формулы Кубо-Гринвуда». Диссертация впервые представлена на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 – физика плазмы. Диссертация выполнена в лаборатории 1.2.2.4. – моделирования свойств материалов НИЦ-1 ТЭС ОИВТ РАН (125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, jih.ru).

Научный руководитель:

Левашов Павел Ремирович – к.ф.-м.н., заведующий лабораторией 1.2.2.4 – моделирования свойств материалов Научно-исследовательского центра теплофизики экстремальных состояний Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук, г. Москва.

Официальные оппоненты:

Волков Николай Борисович - гражданин РФ, д.ф.-м.н., старший научный сотрудник, заведующий лабораторией нелинейной динамики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института электрофизики Уральского отделения Российской академии наук (ИЭФ УрО РАН; Россия, 620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 106).

Магницкая Мария Викторовна – гражданка РФ, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник теоретического отдела Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук (ИФВД РАН; Россия, 142190, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, стр. 14).

Ведущая организация:

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

На заседании присутствуют официальные оппоненты д.ф.-м.н., старший научный сотрудник Волков Н.Б. и к.ф.-м.н. Магницкая М.В., научный руководитель Князева Д.В. к.ф.-м.н. Левашов П.Р.

СТЕНОГРАММА

Председатель

Добрый день, уважаемые члены совета и все присутствующие. Мы начинаем заключительное заседание нашего диссертационного совета в этом году. Мы сегодня заслушаем две защиты. Давайте перейдем без промедления к первой. Это Князев Дмитрий Владимирович. И Михаил Михайлович нас ознакомит сейчас с необходимыми документами.

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 вопросы какие-нибудь? Требуется уточнения? Если нет, тогда давайте перейдем к существу дела. Дмитрий Владимирович, пожалуйста, я так понимаю, в пределах 20 минут.

Князев Д.В.

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

Председатель

Спасибо, Дмитрий Владимирович. Вопросы? Пожалуйста, Генри Эдгарович.

Норман Г.Э.

Дмитрий, один у меня предварительный вопрос, потом основной. Вот у Вас в положениях пять пунктов, а в заключении четыре. Это значит, Вы одно из положений не защитили? Почему?

Князев Д.В.

Мне казалось, что заключение не обязано дословно повторять положения, выносимые на защиту. В начале автореферата есть все положения, выносимые на защиту.

Норман Г.Э.

Вопрос спорный.

Гордон Е.Б.

Нет, ну, может быть, одно объединяет два.

Норман Г.Э.

Основной вопрос: какой из результатов заключения является, с Вашей точки зрения, наиболее интересным? Из заключения. Потому что заключение, оно дает результат работы. Поэтому какой наиболее интересный результат из заключения?

Князев Д.В.

Наиболее интересными мне кажутся результаты, полученные для плазмы алюминия в неравновесном случае.

Норман Г.Э.

Это какой пункт заключения?

Князев Д.В.

Третий пункт. Третий пункт заключения мне кажется наиболее интересным, потому что мы рассмотрели свойства алюминиевой плазмы. Мы изучали как зависимость от температуры ионов при фиксированной температуре электронов, так и зависимость от температуры электронов при фиксированной температуре ионов. Таким образом, мы получили полную картину зависимости переносных и оптических свойств, как от температуры ионов, так и от температуры электронов.

Норман Г.Э.

Наверное, Вы говорите немножко лучше, чем это написано.

Председатель

Генри Эдгарович, это основной вопрос, или все еще...

Норман Г.Э.

Основной, основной. И последний, больше нет.

Председатель

Хорошо, вы удовлетворены? Тогда мы перейдем к следующим. Михаил Федорович.

Иванов М.Ф.

Скажите, вот когда Вы доказывали правомерность разработанной Вами программы, Вы сравнивали результаты с полученными, как я слышал из Вашего доклада, по той же технологии. То есть квантовая молекулярная динамика. Вот вопрос такой: что побудило Вас сделать самому теперь вот эту программу? И второе, что нового она могла принести, а вот та работа не могла, предыдущие авторы. Потому что если бы могли, тогда можно было бы просто воспользоваться.

Князев Д.В.

Для чего была разработана программа. Мы решили реализовать ровно ту формулу, которая была реализована в статье Дежарли. Она приведена в статье других авторов, с которой я сравнивался. Мы решили реализовать точно ту же формулу Кубо-Гринвуда, что там приведена. Для того, чтобы четко понимать, что мы считаем, мы эту программу написали сами. И узнали при этом много интересного об этой формуле.

Для чего нам нужны самим такие расчеты. Другие авторы посчитали не все точки на фазовой диаграмме, которые нам могут быть интересны. Например, результаты для двухтемпературного случая получены нами одними из первых. Поэтому, нам нужно, естественно, самим научиться проводить такие же расчеты, что мы и сделали, проделав эту работу.

Что касается сравнения с результатами других авторов, мы должны обеспечить, что наши расчеты могут воспроизвести расчеты других авторов. Что делали в одной группе, делали в другой группе, и получаем близкие результаты.

Иванов М.Ф.

Понятно, спасибо.

Председатель

Пожалуйста, Эдуард Евгеньевич.

Сон Э.Е.

Можно мне Вам такой вопрос. Вопрос, который Вы затронули в диссертации, является принципиально важным для теории многих тел.

И поэтому есть такие принципиальные вопросы, например: вот в термодинамике, что может быть больше другим известно, есть общее выражение для статистической суммы, которая содержит в себе связанные состояния, свободные электроны и т.д. Но для того, чтобы вычислить статсумму, необходимо сделать либо приближение – вириальное разложение и т.д. Вот с этой точки зрения формула Кубо-Гринвуда – она аналогична. В том смысле, что она просто говорит о том, что если у нас есть термодинамически равновесная система, Вы прикладываете слабое электрическое поле, возникает пропорциональный ток.

Там содержится много разных вещей, например, к вопросу об области применимости. Если Вы говорите, что область полностью ионизованной плазмы или частично ионизованной плазмы описываете, тогда Ваш подход должен содержать такие вещи, как выделение кулоновского сечения, которое должно точно воспроизводиться. А конкретно, квантовая формула Резерфорда, так называемая, первое. Второе, должны быть точно воспроизведены транспортные сечения рассеяния электронов на атомах алюминия. А для этого нужно считать фазовые сдвиги. То есть рассматривать систему электрон-атом на больших расстояниях и считать падающий пакет, который потом уходит, теряет фазу и, соответственно, считать фазовые сдвиги.

Дальше, вопрос о релаксации, например, он в плазмах совершенно очевиден. Потому что в релаксационные времена, если плазма частично ионизована, тогда входят частоты, соответственно, атомарные плюс молекулярные. Они должны совпадать, никаких новостей вводить туда нельзя. Только в том случае, если плазма находится в состоянии сильного взаимодействия, там, где нельзя взять...

Поэтому вопрос: Вы сравниваете, но в этой области для того, чтобы сравнивать, нужно быть уверенным, что вот эти вещи Вы воспроизводите. А вот в пакете VASP они в принципе не могут быть воспроизведены, потому что это пакет, в котором Вы фиксируете ионы и считаете электронные состояния. А Вы считаете электронные свойства, это совсем другая задача. То есть Вы могли бы наложить слабое поле электрическое и тогда смотреть.

Поэтому вопрос о том, на какую область применимости Вы претендуете. С одной стороны Вы на первых графиках показали некоторое состояние, с другой стороны Вы сравниваете с химической моделью, 10000 К, где Вы должны воспроизвести результаты...

И последнее, сюда же относится: в формуле Кубо-Гринвуда есть проблемы, связанные с тем, что взаимодействие электронов с электронами, например – это нелинейное взаимодействие, они не могут быть учтены. То есть теория правильно написана, но рассчитать их... Поэтому формулы Спитцера содержат коэффициент 0.582. То есть 58% уже сразу закладывается в неопределенность. И поэтому говорить о точности 23%, которую Вы говорите, в области достаточной ионизации – это есть вопрос. И кроме того, влияние электрон-электронных столкновений проявляется не при степенях ионизации порядка единицы, а при частотах столкновений порядка единицы. Все, я закончил.

Председатель

Эдуард Евгеньевич, было много утверждений. Не могли бы Вы выделить основной вопрос для того, чтобы соискатель мог на него, прежде всего, ответить.

Сон Э.Е.

Основной вопрос я бы сформулировал так. Если Вы создали некую модель и ее верифицируете с полностью или частично ионизованными плазмами, то воспроизводятся ли остальные величины, такие как кулоновское рассеяние, транспортное сечение электронов? И выражение для времени релаксации, то, что Вы предлагаете, оно для этой части, тоже Вы считаете, что оно правильно? Или мы можем пользоваться теми, которые известны в физике плазмы?

Князев Д.В.

Прежде всего, мы говорим здесь о плотной плазме, вырожденной плазме со значительной степенью неидеальности. То есть здесь важны коллективные эффекты. Кроме того, ионы здесь расположены со сложным структурным фактором, то есть сильны ион-ионные корреляции. То есть мы не можем рассматривать рассеяние на индивидуальных ионах, мы должны рассматривать рассеяние на ионах, расположенных со сложным структурным фактором.

Теперь по поводу того, воспроизводим ли мы сечения рассеяния и фазовые сдвиги, все вот эти вещи. Я считаю, что мы их правильно воспроизводим в рамках метода функционала плотности. То есть опять, рассмотреть рассеяние электрона только на одном ионе мы здесь не можем. Вот собрали систему, там ионы, там электроны, хитрая электронная плотность сложным образом расположена. И вот нужно рассматривать рассеяние электронов на всем вот этом вот. В рамках метода функционала плотности мы считаем, что мы правильно рассчитываем электронную плотность. Это проверялось ранее, насколько метод функционала плотности может давать разумные результаты по электронной плотности. Далее в этой плотности мы рассчитываем уровни энергии. Поэтому мы получаем уровни энергии в потенциале, создаваемом многими ионами. Когда мы это рассчитаем, мы получим и фазовые сдвиги, и сечения рассеяния. Все это автоматически входит в матричные элементы.

Что касается области применимости, то на данный момент она ограничивается, в основном, техническими параметрами расчета. То есть при слишком высоких температурах мы считать не можем, потому что там нужно взять много зон и это приведет к большому времени расчета. Есть, конечно, и физические ограничения, то есть мы не рассматриваем слишком разреженную плазму, потому что не понятно, как там будут работать псевдопотенциалы и обменно-корреляционные функционалы. В той области применимости, о которой мы говорим, то есть это плотности, близкие к нормальной (то есть плотное вещество) и температуры выше температуры плавления мы произвели верификацию, сравнивали с экспериментом и получили неплохое соответствие.

Что касается времени релаксации, мы получили результаты по переносным и оптическим свойствам и выяснили, что они неплохо описываются этим эмпирическим временем релаксации. Для конденсированного состояния не так-то просто получить разумное время релаксации; для конденсированного неупорядоченного состояния мы предлагаем эмпирическую аппроксимацию.

Председатель

Спасибо, Дмитрий Владимирович. Мне кажется, что ответ достаточно ясный, по крайней мере. Да, Евгений Борисович.

Гордон Е.Б.

Я так понял, что Вы сравниваете с экспериментом по фемтосекундной абляции, да?

Князев Д.В.

Мы представляем свойства, сравниваем с экспериментом по измерению переносных и оптических свойств. Теплофизические эксперименты.

Гордон Е.Б.

Но это лазерные эксперименты?

Князев Д.В.

Нет, нет-нет.

Гордон Е.Б.

Это не лазерные эксперименты.

Князев Д.В.

Нет.

Гордон Е.Б.

А какой тогда? Какие это эксперименты? Где это интересно?

Князев Д.В.

Есть на самом деле разные эксперименты. Есть, где жидкий образец помещается во вращающееся магнитное поле, и по возникающей скорости вращения образца определяется электропроводность. Есть такие эксперименты. Есть эксперименты просто по контактному измерению.

Гордон Е.Б.

Нет, как плазма возникает?

Канель Г.И.

У него не было сравнения с экспериментом на фемтосекундных временах.

Председатель

Неравновесного не было сравнения. Там же сравнение с экспериментом только равновесным.

Гордон Е.Б.

То есть каким-то образом возникла плазма, да?

Князев Д.В.

Да.

Гордон Е.Б.

С большим количеством электронов. И дальше вы смотрите... Теперь как экспериментально это делается? Вы же сравниваете с экспериментом.

Князев Д.В.

Я сравниваю с экспериментом по переносным и оптическим свойствам. То есть я сравниваю с экспериментом по измерению электропроводности. Не важно, какой это эксперимент, главное, чтобы он давал электропроводность, теплопроводность, все эти величины. А по поводу фемтосекундного лазерного нагрева, потом эти свойства мы собираемся применять для моделирования фемтосекундного лазерного нагрева.

Гордон Е.Б.

Но вот я как раз хотел сказать по поводу фемтосекундных лазеров. Фемтосекундный лазер обычно имеет не один импульс, а несколько. Как правило, это не очень важно, потому что нелинейные процессы все идут в фокусе. А если ушло из фокуса, то они не страшны. Но если у Вас есть так много электронов, как Вы говорите, у Вас есть линейное поглощение электронами. И тогда все импульсы, которые подаются на систему, они в эту систему влезают. Поэтому я просто говорю, что это надо учитывать. Фемтосекундные эксперименты так нельзя...

Князев Д.В.

Фемтосекундные эксперименты, их моделирование рассматривается в рамках двухтемпературной гидродинамической модели моими коллегами.

Гордон Е.Б.

Один импульс?

Князев Д.В.

Они и один импульс моделируют, и два импульса моделируют.

Председатель

И предимпульс моделируют.

Князев Д.В.

И предимпульс моделируют. Моя задача получить свойства. Потом эти свойства будут загружены в модель.

Гордон Е.Б.

Чисто модельно.

Председатель

Еще есть вопросы?

Иванов М.Ф.

А почему выбрано CH_2 , что Вы взяли?

Князев Д.В.

Это соответствует полиэтилену.

Иванов М.Ф.

Это я понимаю. А зачем нужно, есть кварц, например, очень важный.

Князев Д.В.

Мотивация связана со следующим. На лазерной установке PHELIX в GSI проводятся эксперименты, и для блокировки предимпульса можно использовать пластиковую пленку. И для того, чтобы нам моделировать, как на нее действует предимпульс, нам нужно знать свойства пластика. Эти свойства я и рассчитываю в своей диссертации.

Председатель

Да, они действительно необходимы для таких расчетов.

Дмитрий Владимирович, можно я у Вас спрошу. Мне показалось немножко странным, что Ваши результаты, когда Вы тестировали сравнение электропроводности, они ближе к эксперименту, когда Вы уменьшаете число атомов. Как это объяснить? То есть, казалось бы, Ваша модель становится менее точной, а к экспериментальным данным Вы приближаетесь.

Князев Д.В.

Там было две кривых – 108 атомов и 256. Эксперимент лежит где-то здесь. Вот дальнейшая зависимость от числа атомов: 500, 864 и 1372. Число k -точек здесь равно единице. Сходимости мы так и не достигли, но видно, что разброс больше не стал. Так что в данном случае это совпадение, на мой взгляд, следует считать случайным.

Председатель

Случайным, понятно.

И второй вопрос относительно все-таки заряда или плотности электронов свободных, которую вы должны вставлять в формулу для проводимости. Что значит 3.23? Вы сказали, что это неточность расчета. Но вообще-то говоря, все пропорционально там плотности электронов, то есть, в конце концов, эффективному заряду для свободных носителей, которые там есть. Вы все-таки претендуете, на то, что Вы его рассчитываете, или Вам нужно было подобрать, только чтобы приблизиться к тому, что Вы хотели описать?

Князев Д.В.

Скажу так. Есть расчет, в котором получаются волновые функции, вот эта вся сложная кухня, там находятся три электрона. Потом очень сложный расчет по формуле Кубо-Гринвуда, не все детали которого сразу видны, и получаем результат по динамической электропроводности. Мы аппроксимировали ее формулой Друде и посмотрели, какой там получится при этом заряд. Так вот этот заряд получился 3.23. Не 3, а 3.23. Вот почему так получилось? Вот дальше можно это обсуждать. На мой взгляд, это погрешность расчета, но в процентном отношении она не столь велика.

Председатель

Нет, но Ваш ответ тогда такой. Вы считаете, что все правильно, а поскольку Вы хотите применить формулу Друде, которая, вообще-то, не обязательно должна работать, то там должен быть какой-то эффективный заряд. Так нужно понимать?

Князев Д.В.

Да-да. Так, так-так.

Председатель

Спасибо.

Князев Д.В.

Но все-таки у меня есть мнение, что должно быть 3.

Председатель

Хорошо. Еще есть вопросы? Если нет, тогда следующим пунктом мы заслушаем мнение руководителя. Павел Ремирович, пожалуйста.

Левашов П.Р.

Дорогие коллеги, Дмитрий Владимирович начал работать под моим руководством в 2010 году. До этого он занимался экспериментом в группе Михаила Александровича Шейндлина и, как Вы видите, это повлияло на его дальнейшую работу. Его работа весьма кропотливая, достаточно большая методическая часть. И эта часть, на мой взгляд, очень важна именно в силу того, что такие расчеты на сегодняшний день в России проводятся только в ИВТАНе. То есть у ИВТАНа в этой области большой приоритет и то, что Дмитрий Владимирович многие вещи сделал впервые в этой работе, я считаю, это его большая заслуга.

Он работал самостоятельно: он самостоятельно ставил задачи, которые мы с ним вместе обсуждали, и успешно их решал. То, что я хотел бы отметить, это написание им параллельного модуля для расчета оптических и переносных свойств. Это действительно сложная программа, ему пришлось потратить на это практически год. И он с этим успешно справился, пока в России больше никто на это не решился. Поэтому я считаю, что он является сложившимся ученым. Работы его, безусловно, должны быть продолжены, и я предлагаю поддержать его работу. Спасибо.

Председатель

Спасибо, Павел Ремирович. Я думаю, что тут вопросов у совета не возникнет. Михаил Михайлович, пожалуйста, отзыв ведущей организации.

Ученый секретарь

Уважаемые коллеги, в качестве **ведущей организации** был предложен **Институт общей физики имени Прохорова Российской академии наук**. Отзыв положительный. В отзыве обсуждается структура диссертации, с Вашего позволения я полностью его зачитывать не буду.

Зачитаю только **замечание**, или как здесь сформулировано, скорее пожелание автору диссертации заключается в следующем. Было бы интересно использовать полученные результаты для моделирования экспериментов по определению транспортных свойств неидеальной плазмы, выполненных в Институте проблем химической физики РАН, например работа Минцева, Шилкина. Ссылка на статью, опубликованную в Contributions to Plasma Physics, 2003 год. Сделанное замечание ни в коей мере не снижает высокую оценку диссертации Князева в целом.

Обсуждаются наиболее существенные результаты, которые вошли в положения на защиту соискателя. Отзыв составлен заведующим отделом взаимодействия когерентного излучения с веществом, доктором физико-математических наук **Красюком Игорем Корнелиевичем** и утвержден заместителем директора по научной работе ИОФ РАН **Михалевичем**.

Также на разосланный автореферат поступили отзывы. **6 отзывов на автореферат, отзывы положительные.**

(Первый отзыв). Отзыв из **Института металлургии Уральского отделения РАН**, подписан доктором физико-математических наук, заведующим лабораторией порошковых, композиционных и наноматериалов **Гельчинским Борисом Рафаиловичем**. Отзыв положительный, имеется ряд замечаний:

- почему результаты по электропроводности алюминия, полученные для 108 атомов, лучше согласуются с экспериментом, чем результаты для 256 атомов? Этот вопрос уже прозвучал сегодня.

- почему в автореферате нет сравнения расчетной теплопроводности алюминия с экспериментом?

- почему для алюминия не рассчитана теплоемкость?

(Второй отзыв). Следующий отзыв поступил из **Института проблем химической физики РАН**. Отзыв подписан старшим научным сотрудником лаборатории Электромагнитных процессов в ударно-сжатых средах, кандидатом физико-математических наук **Шилкиным Николаем Сергеевичем**. Отзыв положительный, без замечаний.

(Третий отзыв). Следующий, третий, отзыв из **Института теоретической физики имени Ландау**, подписан доктором физико-математических наук, старшим научным сотрудником сектора плазмы и лазеров **Петровым Юрием Васильевичем**. Отзыв положительный, имеется ряд замечаний:

- для плазмы эффективного состава CN_2 при максимальной температуре около 100 кК полезно сравнить результаты псевдопотенциальных расчетов с результатами полноэлектронных расчетов;

- и второе: хотелось бы, чтобы в автореферате присутствовали не только краткие ссылки на работы других авторов, но и список использованной литературы с полными библиографическими ссылками.

(Четвертый отзыв). Четвертый отзыв на автореферат получен из **Института теоретической физики имени Ландау**, подписан кандидатом физико-математических наук, научным сотрудником сектора плазмы и лазеров **Хохловым Виктором Александровичем**. Отзыв положительный, без замечаний.

(Пятый отзыв). Поступил отзыв на автореферат из **Московского физико-технического института**, подписанный **Ткаченко Светланой Ивановной**, доктором физико-математических наук, профессором департамента молекулярной и биологической физики. Отзыв положительный, имеется ряд замечаний:

- вызывает сомнение приведенное в автореферате утверждение о том, что с помощью «...однажды построенных обменно-корреляционных функционалов и псевдопотенциалов оказывается возможным рассчитать свойства для большого числа веществ в различных условиях»;

- и второе: из автореферата не ясен способ, которым в расчете задавались и поддерживались температуры электронов и ионов.

(Шестой отзыв). Последний, шестой отзыв на автореферат поступил из **Российского федерального ядерного центра – Всероссийского научно-исследовательского института технической физики имени академика Забабахина**, город Снежинск, подписан кандидатом физико-математических наук **Овечкиным Антоном Александровичем**. Отзыв положительный, высказан ряд замечаний:

- первое: полезно изучить влияние на результат числа **k**-точек и энергии обрезания, используемых при квантовом молекулярно-динамическом моделировании;

- далее, в дальнейшем было бы интересно изучить термодинамические функции плотной плазмы (например, теплоемкость) в двухтемпературном случае;

- и было бы интересно проинтерпретировать полученное убывание теплоемкости плазмы эффективного состава CN_2 при росте температуры от 5 кК до 10 кК.

Все, это все отзывы и замечания, которые поступили от различных организаций.

Председатель

Дмитрий Владимирович, пожалуйста, ответьте на замечания, которые есть в отзыве ведущей организации и отзывах на автореферат.

Князев Д.В.

Начнем с отзывов на автореферат.

Первый вопрос из отзыва **Бориса Рафаиловича Гельчинского** и **Анатолия Аркадьевича Юрьева** близок к тому, что уже спрашивали. То есть если мы рассмотрим зависимость рассчитанной электропроводности от используемого числа атомов, то

сходимости не наблюдается, но и разброс не становится больше чем то, что уже есть. Поэтому лучшее совпадение с экспериментом для 108 атомов следует считать случайным.

Теперь к замечанию от **Светланы Ивановны Ткаченко**. Замечание заключается в следующем. В автореферате содержалась фраза «с использованием однажды построенных обменно-корреляционных функционалов и псевдопотенциалов оказывается возможным рассчитать свойства для большого числа веществ в различных условиях». Вот верно это или нет?

Мы используем те псевдопотенциалы и обменно-корреляционные функционалы, которые поставляются вместе пакетом VASP. Способ их построения представлен в этой работе. С помощью этих псевдопотенциалов могут быть рассчитаны длины связей в молекулах. В оригинальной работе Крессе и Жубера, то есть авторов VASP, приведено сравнение с полноэлектронным расчетом; так проверяется правильность псевдопотенциала, но не обменно-корреляционного функционала. С помощью этих же псевдопотенциалов могут быть рассчитаны парные корреляционные функции для жидких металлов; имеется согласие с экспериментом – это работа Рекуль и Крокомбе, которая упоминалась в моем докладе. Может быть рассчитана электропроводность жидких металлов, наблюдается согласие с экспериментом; это моя диссертация, хорошее ли согласие или плохое, я пытался продемонстрировать в докладе. И могут быть рассчитаны ударные адиабаты, наблюдается согласие с экспериментом; это диссертация моего коллеги по лаборатории Дмитрия Минакова.

Все это мы делаем с одними и теми же псевдопотенциалами, каждый раз мы их не переделываем при переходе к новой системе. Системы достаточно разные. Информацию именно об интересующих нас свойствах мы каждый раз не привлекаем. Это с одной стороны. С другой стороны, можно найти и условия, и вещества, когда эти псевдопотенциалы будут работать плохо, например, при больших сжатиях. Тогда псевдопотенциалы нужно переделывать.

Поэтому, в принципе, здесь формулировка достаточно размытая, замечание принимается. Но под этой формулировкой имелось в виду то, что указано на этом слайде.

Следующее замечание от **Светланы Ивановны Ткаченко**: как задаются и поддерживаются температура электронов и температура ионов? И следует ли из этого, что «статическая электропроводность алюминия не зависит от T_e и убывает с ростом T_i »?

Ионы в системе считаются классическими. Зависимость от температуры ионов учитывается следующим образом. Добавляются дополнительные силы в уравнения Ньютона со стороны термостата Но́зе. С помощью этих сил энергия выводится на величину $(3/2)(N_{at}-1)kT_i$.

Квантовые свойства электронов в системе рассчитываются в адиабатическом приближении с помощью метода функционала плотности; электроны полностью подстраиваются под ионы. На каждом шаге моделирования производится расчет электронной структуры – решаются уравнения Кона-Шэма. Это уравнения Шрёдингера с некоторым потенциалом, который хитрым образом зависит от электронной плотности. В плотность входят числа заполнения, в числа заполнения входит температура электронов. Так в расчете учитывается температура электронов.

Вот это все входит в расчет, основанный на квантовой молекулярной динамике и формуле Кубо-Гринвуда. Производим расчет, он нам выдает результат. Наносим на график зависимость статической электропроводности от температуры электронов, получаем постоянное поведение в диапазоне температур от 3 кК до 20 кК.

Что касается других вопросов из отзывов на автореферат, то они имеют вид пожеланий по проведению дополнительных исследований, дальнейшему улучшению работы, и их мы, безусловно, принимаем.

Теперь **отзыв ведущей организации**. Замечание заключается в следующем: применить расчет, основанный на методе квантовой молекулярной динамики и формуле

Кубо-Гринвуда, для интерпретации экспериментов Виктора Борисовича Минцева с соавторами. Эксперимент посвящен измерению электропроводности и оптических свойств плазмы ксенона. Подобное исследование было произведено в диссертации Ильнура Саитова; также результаты приведены вот в этой статье, недавно опубликованной. На мой взгляд, расчеты эти произведены хорошо, поэтому в диссертации я привожу просто ссылку на эту статью.

Председатель

Спасибо, тогда мы переходим к оппонентам. И первый у нас Николай Борисович Волков, пожалуйста.

Волков Н.Б.

Здравствуйте. В этой аудитории, по моему мнению, нет смысла говорить о чрезмерной важности расчета транспортных коэффициентов (электронных) для плазмы. Поэтому я сразу говорю, что данная работа актуальна. С Вашего позволения я не буду зачитывать полностью отзыв, потому что в отзыве подробно рассматривается вся диссертация, вся структура диссертации. Остановлюсь только на вопросах, наиболее связанных, по моему мнению, с достижениями.

Диссертация состоит из шести глав. Из этих шести глав две главы обзорные. Вернее одна глава посвящена обзору метода расчета, вторая глава посвящена обзору полуэмпирических широкодиапазонных моделей, с которыми автор сопоставляет результаты своих расчетов. Шестая, пятая и четвертые главы – это основные результаты данной работы.

Третья глава имеет так называемую... Если в предыдущей главе автор, там, где он рассматривал методы, сформулировал, что является достоинством этой работы, те ограничения, как физические, так и технические, приводящие к погрешности, то в главе, связанной с выбором оптимальных условий расчета, он проверяет именно влияние всех этих данных. В результате он формулирует следующий результат: погрешность его расчета составляет 23%, из них наибольший вклад вносит число атомов. Для того чтобы действительно получать точные результаты, нужно увеличивать число атомов. Различие в псевдопотенциалах – это вносит в погрешность около 5%.

Следующая глава относится к верификации метода расчета. Автор сравнивает свои расчеты с экспериментом и с расчетами, проведенными близкими методами. Он показывает, что различие между результатами, полученными близкими методами, можно объяснить тем, что в разных группах используются разные технические параметры. И очень часто об этих технических параметрах, которые можно назвать «зарытый топор», в статьях не очень сильно стараются писать. Достоинством диссертанта является то, что в своей диссертации он не «закапывает топор», который позволяет ему получить результат. Это большое достоинство.

В главе пятой – основные результаты по двухтемпературному случаю, и глава шестая – это пластик. В заключении – результаты работы.

Автореферат включает в себя необходимые сведения о диссертации Князева Дмитрия Владимировича и соответствует ее содержанию. Сама диссертационная работа структурирована по правилам ВАК, содержит требуемые формальные разделы, в достаточной степени иллюстрирована и дает полное представление о проведенных исследованиях и их результатах. Все полученные автором научные результаты обладают несомненной научной новизной и практической ценностью. Они могут быть использованы при анализе результатов экспериментов по изучению взаимодействия интенсивных ультракоротких потоков лазерного и электронного излучения с веществом, проводимых в научных организациях Российской академии наук, Госкорпорации «Росатом», НИЦ «Курчатовский институт», а также использованы при подготовке

специалистов в области физики плазмы, электрофизики и физики высоких плотностей энергии. Достоверность полученных результатов хорошо обоснована тщательностью выбора технических параметров проводимых компьютерных экспериментов, сравнением рассчитанных значений электронных кинетических коэффициентов плотной плазмы жидкого алюминия и пластика эффективного состава CH_2 с известными из литературы экспериментальными данными и феноменологическими моделями других авторов в области их применимости. Дополнительным аргументом в пользу достоверности и обоснованности полученных результатов диссертанта может служить подробный критический анализ не только чужих, но и своих результатов, наличествующий во всех главах диссертации. Следует также отметить, что личный вклад автора диссертации в проделанную работу не вызывает сомнения.

Как это типично для любой серьёзной научно-квалификационной работы, по диссертации Князева Д.В. можно сделать некоторые **замечания**.

Первое. Два из положений, выносимых диссертантом на защиту, относятся к двухтемпературному случаю использованного в диссертации КМД+КГ метода. Однако исходные положения КМД+КГ метода относятся к случаю, когда ионы и электроны имеют равные температуры, обеспечиваемые термостатом Нозе-Гувера. Более того, известно, что при моделировании металлических систем на больших временах следует контролировать адиабатичность электронов (выполнение условия Борна-Оппенгеймера). В указанной работе для этого предлагается два термостата Нозе, один термостат поддерживает температуру ионов, другой – температуру электронов, постоянными. Авторы пакета VASP держат с помощью термостата постоянной лишь температуру ионов. При этом они сравнили свои результаты с работой, в которой два термостата, и показали, что энергия электронов в процессе моделирования на длинных временах не растёт. Она сохраняется. Но это говорится в основном о случаях, когда электронная и ионная отличаются флуктуационно, то есть энергия электронов и ионов близка. С моей позиции, нелишне было бы обсудить в диссертации применимость пакета VASP к случаю, когда электронная температура может превышать ионную в несколько раз. В данной ситуации как раз такой случай и рассматривается. В реальной плотной плазме в этом случае происходит передача энергии от горячих электронов к ионам и нагрев последних. По моему мнению, независимость переносных и оптических свойств жидкого алюминия от T_e , обнаруженная в расчетах, связана, в первую очередь, с учетом электрон-ионного обмена энергией. Если авторы взяли бы термостат, который бы поддерживал постоянство энергии всей системы, как в системе центра масс, и допустили взаимный обмен между электронами и ионами, тогда, с моей позиции, было бы более точно. Потому что Кубо-Гринвуд именно по этому ансамблю, по термостату, усреднял, когда энергия постоянная. Но в принципе, это надо было обсудить. К сожалению, автор не обсудил в своей диссертации применимость этого пакета.

Второе. Результаты диссертанта, полученные в главе 4, систематически завышают статические и динамические переносные и оптические характеристики жидкого алюминия по сравнению с экспериментальными и справочными данными: на 13%-23% для статической электропроводности; 12%-23% - для теплопроводности; в 1.3-1.65 раз – для динамической электропроводности. По моему мнению, это завышение невозможно списать только на недостаточное обеспечение в расчете требуемых значений технических параметров. Следовало бы, как минимум, обсудить возможные другие причины этого завышения.

Диссертация написана ясным, грамотным русским языком. Однако автор иногда допускает не достаточно корректные, по моему мнению, с физической точки зрения утверждения.

(Третье замечание). Так, например, на с. 23 автором написано: «Задачей этой работы является расчет свойств при заданных T_i и T_e . При этом возникают вопросы о том,

насколько такую информацию можно использовать для моделирования фемтосекундного лазерного нагрева, можно ли считать, что электронная и ионная подсистемы находятся в равновесии. Эти вопросы должны решаться не в этой работе, а в работах, посвященных моделированию фемтосекундного лазерного нагрева. В них должны обсуждаться и применимость двухтемпературной гидродинамической модели, и использование для нее свойств, рассчитанных для двухтемпературного случая». Я, в общем-то, не согласен с этим утверждением. По моему мнению, автор всегда должен обсуждать применимость своих результатов и не отсылать к другим работам.

(Четвертое замечание). На с. 73 написано: «При этом физический смысл имеет лишь динамический коэффициент [Онзагера] $L_{11}(\omega) = \sigma_1(\omega)$. Остальные же коэффициенты в этой работе рассматриваются лишь как некоторые выражения, дающие правильные пределы при $\omega \rightarrow 0$ ». Обращение к первоисточнику - статье Кубо (ссылка), перевод – «Вопросы квантовой теории необратимых процессов», показывает, что физический смысл имеют все коэффициенты Онзагера. В этом и нельзя было сомневаться.

И последнее, **пятое**. На с. 174 написано: «В связи с этим возникает вопрос, какое именно выражение должно использоваться для расчета числа Лоренца. В этой главе опробованы выражения $K/(\sigma_{1DC} T_e)$ и $L_{22}/(\sigma_{1DC} T_e)$ ». Как известно из учебников, правильно лишь первое из этих двух соотношений. Так классики его определили. То, что в твердом теле при низких температурах оба соотношения дают мало отличающиеся значения, не дают нам право считать второе соотношение числом Лоренца.

Ну и заключение. Отмеченные замечания не снижают общего положительного впечатления о работе Князева Дмитрия Владимировича и имеют характер пожеланий более тщательно относиться к формулировке высказываемых утверждений. Я полагаю, что ответы на заданные вопросы не составят для него проблемы и дадут специализированному совету Д 002.110.02 дополнительные основания для позитивной оценки диссертационной работы. Здесь уместно заметить, что представленные в диссертации материалы исследований имеют достаточно хороший уровень верификации и апробации. Список основных публикаций Князева по теме диссертации включает 7 работ, 4 статьи из которых опубликованы в рецензируемых журналах, включенных в международную базу цитирования Web of Science и перечень ВАК (3 из этих статей опубликованы в ведущих по специальности 01.04.08 - физика плазмы журналах: Physics of Plasmas (две работы) и Contributions to Plasma Physics (одна работа)). Не вызывает сомнения, что полученные Князевым Дмитрием Владимировичем результаты будут востребованы научным сообществом для дальнейших применений в национальных и мировых исследовательских центрах.

Общее заключение. Таким образом, Князев Дмитрий Владимирович представил к защите завершённую научно-исследовательскую квалификационную работу, в которой развит метод расчета электронных переносных и оптических свойств плотной неидеальной плазмы, получены новые научные результаты, имеющие важное значение для развития научного направления «Термодинамические, переносные и оптические свойства неидеальной плазмы». На основе изложенного можно заключить, что диссертационная работа «Расчет электропроводности, теплопроводности и оптических свойств плотной плазмы на основе метода квантовой молекулярной динамики и формулы Кубо-Гринвуда» удовлетворяет всем критериям, установленным в п. 9 «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г., а её автор, Князев Дмитрий Владимирович, несомненно, заслуживает присвоения искомой ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 – физика плазмы.

Спасибо за внимание.

Председатель

Спасибо большое, Николай Борисович. Очень внимательный отзыв и я думаю, что Дмитрий Владимирович сейчас ответит на большинство вопросов, которые достаточно серьезны.

Князев Д.В.

Постараюсь ответить на замечания официального оппонента.

(Первое замечание). Первое замечание можно коротко сформулировать следующим образом. Нелишне было бы обсудить в диссертации применимость пакета VASP к случаю, когда T_e может превышать T_i в несколько раз. Здесь можно сказать следующее. В пакете VASP используется приближение адиабатичности (приближение Борна-Оппенгеймера): электроны полностью подстраиваются под текущее расположение ионов. Для того чтобы проверить применим ли VASP к случаю, когда T_e много больше T_i , можно сделать следующее.

Сравнить адиабатический расчет с расчетом с динамикой электронов в случае, когда T_e много больше T_i . Оппонент сказал, что аналогичное сравнение для однотемпературного случая проведено в статье авторов VASP, когда VASP еще только начинал появляться. Единственное что, при этом сравнении нужно учитывать, что расчет с динамикой электронов – там динамика электронов все равно фиктивная, все равно в рамках метода функционала плотности. И еще большой вопрос, как она связана с решением временного уравнения Шрёдингера.

Второе. Нужно определить или оценить характерное время передачи энергии от электронов к ионам для случая, когда температура электронов много больше температуры ионов для различных комбинаций T_i и T_e . Опять же нужно оценивать это время для тех условий, которые рассматриваются в диссертации. Когда ионы разупорядочены, то есть не кристаллическая фаза, это не так-то просто сделать. Но если получатся значения, когда это время передачи энергии очень мало, то двухтемпературного состояния вообще в этом случае нет. И тогда делать так, как в диссертации, естественно, нельзя. И вообще о двухтемпературном состоянии нельзя говорить.

Ну и, естественно, верховным критерием правильности является эксперимент. Можно сравнить с экспериментом по измерению зависимости статической электропроводности от электронной температуры в случае постоянной ионной температуры. Такой эксперимент проделан, например, в работе Милчберга и других. Справедливости ради, там температура ионов 300 К, а мы в диссертации рассматриваем те температуры ионов, когда ионная подсистема уже разупорядочена.

Ну и, естественно, все эти вещи мы можем сделать только в будущем. Сейчас замечание принимается, такое исследование, действительно, нужно было бы сделать.

(Второе замечание). Теперь следующее замечание от Николая Борисовича. Заключается оно в следующем. Рассматривается жидкий алюминий. Расчетные данные всюду превышают эксперимент. Есть теплопроводность, сейчас ее рассматривать не будем. Для краткости рассмотрим статическую электропроводность (превышение в 1.13-1.23 раза) и динамическую электропроводность (превышение в 1.3-1.65 раз). Различие нельзя списать на недостаточную сходимость. В чем причина различия?

Вот, собственно, данные, которые есть для статической электропроводности в зависимости от температуры. Видим, что здесь расхождение составляет: если с нижними данными, то, действительно, порядка 23%; если с верхней кривой, то даже чуть меньше, чем 13%. Но все экспериментальные кривые лежат в рамках погрешности расчета. То есть пока погрешность расчета не уменьшена, искать физический смысл, на мой взгляд, преждевременно. Если будет маленькая погрешность и будет превышение, то будем обсуждать физические причины.

Что касается динамической электропроводности в зависимости от частоты, здесь есть вот эта экспериментальная кривая. На ней есть пик. Это дискуссионный вопрос, есть

ли пик на кривых динамической электропроводности в жидкой фазе, потому что существуют эксперименты, где его нет. Экспериментальная кривая только одна. Слева видно, сколько разных кривых для статической электропроводности. Эксперимент по измерению динамической электропроводности, на мой взгляд, более сложный. Здесь разброс может быть не только меньше, но и больше. На нашей кривой погрешности здесь тоже не приведено. В общем, пока вся эта методическая работа не сделана, приписывать этому физический смысл, на мой взгляд, сложно.

(Третье замечание). Следующее замечание, номер три, оно принимается.

(Четвертое замечание). Теперь замечание по поводу физического смысла коэффициентов Онзагера. Физический смысл статических коэффициентов Онзагера в работе не отрицается. Это коэффициенты, которые связывают приложенную напряженность электрического поля и приложенный градиент температуры с возникающей плотностью электрического тока и плотностью потока энергии. В работе рассчитываются некоторые выражения, зависящие от частоты; при конечной частоте они рассчитываются по формуле Кубо-Гринвуда. Затем экстраполируются к нулевой частоте, и утверждается, что при нулевой частоте они приводят к правильным пределам. И мы считаем, что эти пределы имеют физический смысл.

Если мы посмотрим на коэффициент Онзагера L_{11} , то он связывает приложенную напряженность электрического поля с возникающей плотностью электрического тока. Если мы рассмотрим зависимость от частоты, то можно себе представить: наложили поле некоторой частоты и получили плотность электрического тока. Естественно, можно представить себе между ними коэффициент. Это действительная часть динамической электропроводности. Можно доказать, что коэффициент Онзагера L_{11} в случае конечной частоты действительно является тем, что дает связь между напряженностью и плотностью электрического тока. Поэтому можно считать, что действительно, коэффициент Онзагера $L_{11}(\omega)$ имеет смысл – он является действительной частью динамической электропроводности.

Что касается других коэффициентов Онзагера, возьмем, допустим, L_{22} . Тогда можно представить себе, что в системе существуют электрическое поле частоты ω и градиент электронной температуры тоже некоторой частоты. И возникает плотность потока энергии некоторой частоты. И здесь есть динамические коэффициенты Онзагера. Мне сложно представить, что такое градиент температуры, который изменяется с оптическими частотами, поэтому физический смысл динамических коэффициентов Онзагера мне не ясен.

(Пятое замечание). И еще один ответ на замечание Николая Борисовича. При расчете числа Лоренца правильно только выражение для числа Лоренца с K , но не с L_{22} .

Поясню: закон Видемана-Франца был экспериментально открыт и заключается он в следующем. Отношение теплопроводности к произведению электропроводности на температуру равно постоянной. И постоянная эта называется числом Лоренца. Закон этот был открыт еще в девятнадцатом веке. Эксперимент, естественно, проводился при низких температурах. В эксперименте, естественно, измерялась K . Поэтому при низких температурах, действительно, верно выражение с K .

Но посмотрим еще на следующее обстоятельство. K выражается через L_{22} минус термоэлектрический член. При низких температурах K приблизительно равно L_{22} . При низких температурах нельзя рассуждать, о том, что лучше, K или L_{22} , потому что они дают близкие результаты, которые совпадают с точностью до членов более высокого порядка малости. Поэтому при низких температурах можно использовать и K , и L_{22} совершенно одинаково. Они дадут одинаковые результаты.

При более высоких температурах у нас нет эксперимента по прямому измерению теплопроводности, а K и L_{22} могут отличаться. Поэтому заранее не ясно, будет ли вообще для кого-то справедлив закон Видемана-Франца, для кого он будет выполняться лучше.

Поэтому в принципе, я считаю, что мы такое исследование можем провести: рассматривать K , рассматривать L_{22} , и рассмотреть, для чего будет лучше. Конечно, справедливости ради, числом Лоренца должно называться то, что с K . А это мы можем называть «выражением, похожим на число Лоренца, но с L_{22} ».

На этом все с ответами на замечания оппонента.

Председатель

Спасибо, спасибо большое. Я думаю, что мы можем перейти ко второму отзыву и заслушать Марию Викторовну Магницкую. Пожалуйста.

Магницкая М.В.

После прозвучавшего доклада и выступления первого оппонента я не буду еще раз говорить о содержании диссертации. Скажу только, что мне было ее интересно читать, с той точки зрения, что я еще помню время, когда развивались методы первопринципных расчетов оптических свойств металлов в кристаллическом состоянии. Сейчас эту область можно считать закрытой, то есть все металлы пересчитаны, все методы развиты, все проблемы известны, технические методики отлажены. И интересно видеть, как в новой области эти методы после появления первопринципной квантовой молекулярной динамики применяются к таким сложным объектам, как плазма и еще в экстремальных условиях.

Поэтому здесь большое значение имеет именно методическая сторона. И радуется, что в диссертации Князева проделана эта тщательная методическая работа. Во-первых, развита сама методика – написана параллельная программа, затем проведена оптимизация практически по всем техническим и свободным параметрам расчета. Я просто представляю, что это, действительно, очень большая работа. Оценка вычислительной погрешности сделана тщательно, также произведена верификация модели. Так что считаю, что работа хорошая, и я просто зачитаю свои замечания.

(Первое замечание). Как известно, результаты расчетов в какой-то степени зависят от выбора псевдопотенциала. Поэтому было бы желательно более четко обосновать применимость использованных псевдопотенциалов в условиях, рассматриваемых в диссертации. Подходят ли эти псевдопотенциалы для расширения исследований на область более высоких плотностей, и если нет, то как они должны быть модифицированы.

(Второе замечание). Второе замечание относится к верификации методики. В диссертации приводится сравнение вычисленной оптической проводимости алюминия в твердом и жидком состоянии с экспериментальными данными. Было бы полезно также сравнить эти результаты с другими расчетами, особенно выполненными альтернативными методами. Например, согласие результатов для твердого алюминия со стандартным расчетом методами теории твердого тела могло бы стать дополнительным подтверждением справедливости используемого подхода.

(Третье замечание). И, наконец, третье, скорее не замечание, а пожелание. Читателю диссертации было бы удобнее, если бы наряду с плотностями, при которых производится расчет, были указаны соответствующие им значения давления.

Приведенные замечания носят рекомендательный характер и не снижают общую положительную оценку диссертации Князева. Изложение материала в диссертации ясное и логичное. Автор свободно владеет методами первопринципных расчетов, понимает их теоретические основы и хорошо разбирается в современной физике экстремальных состояний вещества.

Результаты диссертации своевременно опубликованы в виде 4 статей в рецензируемых изданиях из перечня ВАК и представлены лично автором на 13 международных и 12 российских конференциях по соответствующей тематике. Автореферат правильно и в полной мере отражает содержание диссертации. Личный

вклад автора в результаты, представленные в работе, не вызывает сомнений. Содержание диссертации соответствует специальности 01.04.08 – физика плазмы.

В целом диссертация Князева представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным пунктом 9 «Положения о присуждении ученых степеней» № 842 от 24 сентября 2013 года. Автор диссертации Князев Дмитрий Владимирович, безусловно, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 – физика плазмы.

У меня все.

Председатель

Спасибо большое. Я думаю, что вопросов у нас не возникло кроме тех, на которые должен ответить Дмитрий Владимирович.

Князев Д.В.

Постараюсь ответить на замечания Марии Викторовны.

Замечание первое заключается в следующем. Нужно четче обосновать применимость используемых псевдопотенциалов в условиях, рассматриваемых в диссертации. Применимы ли эти псевдопотенциалы при более высоких плотностях?

Основным способом проверки правильности построения псевдопотенциала является сравнение с полноэлектронным расчетом. Сравнение с полноэлектронным расчетом при комнатных температурах произведено в самой статье авторов VASP, которые и разработали псевдопотенциалы, поставляемые вместе с VASP. Поэтому при комнатных температурах необходимая проверка произведена в этой статье.

Дальше мы можем рассмотреть алюминий. Причем рассмотреть ионы, расположенные в идеальной ГЦК решетке, а температуры электронов увеличивать. Понятно, что в этом случае ионы не могут слишком близко подойти друг к другу. Вот такое исследование было произведено моим коллегой по лаборатории Дмитрием Минаковым. И было выяснено, что при температурах электронов, меньших 8 эВ, наблюдается согласие с полноэлектронным расчетом. Здесь что происходит? При таких температурах электроны кора не возбуждаются и погрешности в расчете не наблюдаются.

Но выясняется, что если мы производим квантовый молекулярно-динамический расчет, ионы могут двигаться и подходить достаточно близко друг к другу, то даже если электроны кора не возбуждаются, области присоединения, которые есть в этих псевдопотенциалах, могут пересечься. И это может привести к неправильным результатам. Вот такое исследование опять-таки проводилось моим коллегой по лаборатории Дмитрием Минаковым, и там было произведено сравнение с расчетом с большим числом электронов, и, соответственно, меньшей областью присоединения. Такое исследование приведено в недавно опубликованной статье. В общем, здесь получается следующий критерий: нужно выбирать область присоединения достаточно малой. Чтобы они не пересекались при сближении ионов на те характерные расстояния, на которые они могут сблизиться при данной температуре.

Если говорить о псевдопотенциалах при более высоких плотностях, о псевдопотенциалах класса PAW (проеекционно-присоединенных волн), то нужно использовать меньшую область присоединения, чтобы они не пересекались для высоких плотностей. Нужно учесть электроны кора, чтобы области, где они расположены тоже не пересеклись при более высоких плотностях. Ну, и основным критерием правильности является сравнение с полноэлектронным расчетом.

Что касается **двух других замечаний** оппонента, то они касаются проведения дальнейших исследований, улучшения расчета, поэтому они просто принимаются.

Председатель

Спасибо, Дмитрий Владимирович. У нас есть теперь время для дискуссий. Пожалуйста, кто хотел бы высказаться?

Амиров Р.Х.

Я работу достаточно хорошо знаю, потому что Дмитрий был студентом нашей кафедры физтеховской. Я еще слушал дипломную работу. На меня большое впечатление производят ответы, потому что некоторые члены диссертационного совета пытались запутать. По-моему, им не удалось этого сделать.

И очень, максимально добросовестное отношение к своим результатам, я бы даже сказал, критическое. То есть, конечно, квалификация соискателя очень высокая.

И я напомним, что в этом году в нашем институте проводили конкурс научных работ. Самый тяжелый конкурс был в номинации аспиранты и молодые ученые до 28 лет. Было представлено 26 работ. Дмитрий стал победителем этого конкурса, это раз. А кроме того, для всех участников конкурса была установлена одна специальная премия «Лучшая теоретическая работа». Теоретических работ было где-то порядка 30 во всем институте. И он тоже получил вот эту единственную премию. Здесь сидят представители комиссии, они это могут подтвердить.

Для меня вопрос очевиден, я буду голосовать «за». Я призываю членов диссертационного совета не ошибиться при голосовании, правильно заполнить бюллетени. Спасибо.

Председатель

Спасибо большое, Равиль Хабибулович. Еще есть желающие? Пожалуйста, Генри Эдгарович.

Норман Г.Э.

Как и Равиль Хабибулович, я познакомился с Дмитрием, когда он был еще студентом. Он стал ходить на мои лекции, и уже тогда я понял, что это человек исключительно квалифицированный, и уже тогда у меня не было сомнений, что он станет достаточно быстро кандидатом наук. Поэтому сегодня я, конечно же, буду голосовать «за».

Что касается тематики, которой посвящена диссертация, то первым в России эти работы начал Владимир Стегайлов. Естественно, у нас эти работы продолжают в отделе, в лабораториях, а Павел Ремирович является сейчас нашим конкурентом. Но мы такую конкуренцию приветствуем, потому что это способствует и нашему продвижению более быстро и более активному и, соответственно, Павел Ремирович развивается.

Что касается вот этой работы, то я бы ответил высокую вычислительную культуру. Это очень важно в этой деятельности. Это как-то уже прозвучало, потому что принято говорить: “ab initio, ab initio”, и людям кажется иногда, что это...

Председатель

Что это правда.

Норман Г.Э.

Вот-вот-вот, совершенно верно.

Иосилевский И.Л.

А это не ab initio.

Норман Г.Э.

А это, на самом деле, приближенный метод. И мы, скажем, в нашей деятельности нарываемся тоже на эти приближенности, поэтому вот когда здесь возникают различия, и это отмечали в отзывах, и оппоненты отмечали, то это значит, не вполне *ab initio*. Вот именно в этом направлении и нужно продолжать теоретические работы. Вот это, я думаю, главное достоинство этой диссертации.

Председатель

Спасибо, Генри Эдгарович.

Сон Э.Е.

Я хотел бы продолжить то, что Генри Эдгарович говорил, но хотел сказать, что, во-первых, я, безусловно, поддерживаю эту работу.

Но хотелось бы еще добавить, что направление, которое выбрано, вообще является принципиально важным в теоретической физике, в физике многих частиц. В чем дело? Дело в том, что методы функционала плотности хорошо известны, широко используются у нас в институте в самых разных областях. Будь это спектроскопия атомов, у нас есть группа, которая этим занимается. Для равновесных задач ситуация довольно простая: мы строим функционал для свободной энергии, минимизируем ее и получаем термодинамические состояния системы.

Но вопрос возникает, а можно ли пакеты, типа VASP, которые позволяют метод функционала плотности считать, использовать для переносных свойств? Вот квантовая молекулярная динамика, которой занимается, кроме Стегайлова, Игорь Морозов, еще другие, основана на том, что поскольку приближение Борна-Оппенгеймера используется, то при фиксированных ядрах система подстраивается, поэтому можно их разводить на любое расстояние и находить энергию взаимодействия. То есть как бы псевдопотенциал. Поэтому вот это естественная часть. Что же касается электронных свойств, то здесь ситуация сложнее, потому что электроны входят в саму квантовую волновую функцию, и, поэтому их подстраивание очень сложное. Вот Николай Борисович очень хороший отзыв дал, квалифицированный отзыв, как специалист. И он правильно ответил, что такие важные вопросы, как наличие двух термостатов Ноэ – это вопрос принципиальный. Многие, принципиально важные вопросы для метода остались немного в стороне и, на самом деле, требуют еще обоснования. Вот такие вот обоснования, то есть главный вопрос: можно ли равновесные пакеты метода функционала плотности использовать для электронных свойств, это требует, осмысления и анализа. И после этого можно уже следующим ходом амплитуду рассеяния, фазовые сдвиги. То есть все, что касается взаимодействия одного электрона; одного протона можно изучать, а вот электронов... Я хотел сказать, что многие вопросы остаются.

Поэтому я хотел сказать, что, конечно, это одна из лучших работ, которая в этом смысле выполнена. Работа под руководством Павла Ремировича, во-первых, очень активно и продуктивно работает этот коллектив, в том числе, в первую очередь, автор диссертации. Поэтому я предлагаю голосовать за него и считаю, что одна из работ, которая украшает работу ИВТ АН.

Председатель

Спасибо, Эдуард Евгеньевич. Еще есть желающие высказаться?

Если нет, тогда я два слова только хочу сказать. Я согласен, что здесь, на самом деле, очень большое поле для деятельности, потому что вообще термодинамические и переносные свойства неравновесных систем – это то, чем сейчас активно занимаются в разных областях, в частности, вот в лазерном нагреве.

Также я прекрасно знаю, что автор и его руководитель понимают те вопросы, которые здесь есть. И основной вопрос для обоснования, на мой взгляд, это каково время обмена между электронной и ионной системой, потому что все эти расчеты выполнены в бесконечном времени; температура и та, и другая – константы. Конечно, было бы крайне желательно, в первую очередь, ответить на этот вопрос, и, желательно, как можно ближе к рамкам этого же метода. Как можно оценивать правильно время обмена? Тогда часть вопросов принципиальных будет, на мой взгляд, снята.

Но это, безусловно, работа на будущее. А та работа, которую мы сейчас здесь смотрели, по-моему, действительно, является одной из лучших из тех, которые мы рассмотрели в этом году. Так что призываю всех правильно проголосовать.

Спасибо, теперь Дмитрию Владимировичу предоставляется заключительное слово, пожалуйста.

Князев Д.В.

Я хотел бы поблагодарить научного руководителя за те силы и время, которые он на меня потратил и вас за то, что меня сегодня выслушали.

Председатель

Спасибо, и мы должны теперь перейти к голосованию. Для этого выбрать счетную комиссию. Тут есть предложение такое. Три члена счетной комиссии: Александр Викторович Ерёмин, Игорь Владимирович (*Ломоносов, председатель счетной комиссии*) тоже давно у нас не работал и Михаил Фёдорович (*Иванов*). Нет возражений? Если нет, то мы должны проголосовать. Кто за? Прошу голосовать. Возражения? Нет? (*Счётная комиссия выбирается единогласно*). Тогда прошу счётную комиссию приступить, а всех членов диссертационного совета проголосовать. (*Проводится процедура тайного голосования*).

Председатель

Уважаемые члены Совета! Давайте послушаем результаты.

Ломоносов И.В.

Уважаемые члены Совета! Позвольте огласить протокол заседания комиссии. Состав диссертационного совета утвержден в количестве **31** человека. Дополнительно введены члены совета – **нет**. Присутствовало на заседании **26** членов совета, в том числе, докторов наук по профилю рассматриваемой специальности – **12**. Роздано бюллетеней – **26**, осталось не роздано – **5**, оказалось в урне бюллетеней – **26**.

Результаты голосования по вопросу о присуждении ученой степени кандидата физико-математических наук Князеву Дмитрию Владимировичу:

за – 26, против – нет, недействительных бюллетеней – нет.

Председатель

Спасибо. Мы должны утвердить, а потом похлопать. Кто за? Против нет? Воздержавшихся нет? (*Протокол счетной комиссии утвержден единогласно*).

Спасибо большое, поздравляем.

Переходим к обсуждению проекта заключения. Есть замечания, пожелания? (*Члены диссертационного совета обсуждают проект заключения*). Если больше нет желающих обсуждать проект, тогда мы должны его проголосовать с теми замечаниями, которые были высказаны. Кто за заключение с замечаниями, которые были указаны? Кто против? Нет. Кто воздержался? Нет. Спасибо, принято единогласно. (*Проект заключения принят единогласно*).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.110.02
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 23.12.2015 г. № 17

О присуждении Князеву Дмитрию Владимировичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Расчет электропроводности, теплопроводности и оптических свойств плотной плазмы на основе метода квантовой молекулярной динамики и формулы Кубо-Гринвуда» по специальности 01.04.08 – физика плазмы, принята к защите 08.10.2015 г., протокол № 11, диссертационным советом Д 002.110.02 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, jiht.ru, 8-(495)-485-83-45), утвержденным Приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 11.04.2012 г. № 105/нк.

Соискатель Князев Дмитрий Владимирович 1989 года рождения, в 2012 году окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)». В настоящее время является аспирантом Московского физико-технического института (государственного университета) (с 01.09.2012 г. по 31.08.2016 г.).

Работает и.о. младшего научного сотрудника лаборатории № 1.2.2.4 (моделирования свойств материалов) Научно-исследовательского центра теплофизики экстремальных состояний (НИЦ-1 ТЭС) Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН).

Диссертация выполнена в лаборатории № 1.2.2.4 (моделирования свойств материалов) НИЦ-1 ТЭС ОИВТ РАН.

Научный руководитель – кандидат физико-математических наук, Левашов Павел Ремирович, заведующий лабораторией № 1.2.2.4 (моделирования свойств материалов), НИЦ-1 ТЭС ОИВТ РАН.

Официальные оппоненты:

Волков Николай Борисович, д.ф.-м.н., старший научный сотрудник, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук (ИЭФ УрО РАН, 620016, г. Екатеринбург, ул. Амундсена, д. 106, www.iep.uran.ru, 8-(343)-267-87-96), заведующий лабораторией нелинейной динамики;

Магницкая Мария Викторовна, к.ф.-м.н., Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук (ИФВД РАН, 142190, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, стр. 14, www.hppi.troitsk.ru, 8-(495)-851-05-82) старший научный сотрудник Теоретического отдела

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук (ИОФ РАН, 119991, г. Москва, ул. Вавилова, д. 38, www.gpi.ru, 8-(499)-135-41-48) в своем положительном заключении, подписанном Михалевичем Владиславом Георгиевичем, д.ф.-м.н., профессором, заместителем директора по научной работе ИОФ РАН (составленном Красюком Игорем Корнелиевичем, д.ф.-м.н., заведующим отделом взаимодействия когерентного излучения с веществом ИОФ РАН), указала, что:

1. В диссертации получены новые результаты по переносным и оптическим свойствам алюминиевой плазмы в двухтемпературном случае, термодинамическим, переносным и оптическим свойствам плазмы эффективного состава CH_2 .

2. Полученные результаты способствуют уточнению границ применимости уже имеющихся моделей плотной плазмы и дают основу для дальнейших исследований. Диссертацию Князева Д.В. можно квалифицировать как существенный вклад в физику плазмы.

3. Полученные результаты могут быть использованы для моделирования различных экспериментов в области физики плазмы: экспериментов по воздействию фемтосекундного лазерного излучения на вещество, экспериментов по электровзрыву металлов и др. Результаты диссертации могут быть применены в ОИВТ РАН, ИОФ РАН (г. Москва), РФЯЦ-ВНИИЭФ (г. Саров), РФЯЦ-ВНИИТФ (г. Снежинск), ИПМ РАН (г. Москва) и других организациях.

Соискатель имеет 29 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации 29 работ, опубликованных в рецензируемых научных изданиях из перечня ВАК 4 работы:

1. Knyazev D.V., Levashov P.R. “Ab initio calculation of thermodynamic, transport, and optical properties of CH₂ plasmas” // Phys. Plasmas. 2015. Vol. 22. P. 053303. В статье рассчитаны термодинамические, переносные и оптические свойства плазмы эффективного состава CH₂. Вклад диссертанта – 6 страниц из 10.
2. Knyazev D.V., Levashov P.R. “Transport and optical properties of warm dense aluminum in the two-temperature regime: Ab initio calculation and semiempirical approximation” // Phys. Plasmas. 2014. Vol. 21. P. 073032. В статье рассматривается влияние неравновесного возбуждения электронной подсистемы на переносные и оптические свойства плазмы алюминия. Вклад диссертанта – 8 страниц из 14.
3. Knyazev D.V., Levashov P.R. “Ab initio calculation of transport and optical properties of aluminum: Influence of simulation parameters” // Comput. Mater. Sci. 2013. Vol. 79. PP. 817 – 829. В статье изучается влияние технических параметров на результаты расчета переносных и оптических свойств алюминиевой плазмы. Вклад диссертанта – 8 страниц из 13.
4. Povarnitsyn M.E., Knyazev D.V., Levashov P.R. “Ab Initio Simulation of Complex Dielectric Function for Dense Aluminum Plasma” // Contrib. Plasma Phys. 2012. Vol. 52, Issue 2. PP. 145 – 148. В статье рассчитана комплексная диэлектрическая проницаемость плазмы алюминия, произведено сравнение результатов расчета с экспериментальными данными. Вклад диссертанта – 2 страницы из 4.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. Институт металлургии Уральского отделения РАН (ИМЕТ УрО РАН), г. Екатеринбург (д.ф.-м.н., зав. лабораторией порошковых, композиционных и наноматериалов Гельчинский Борис Рафаилович; к.ф.-м.н., старший научный сотрудник лаборатории порошковых, композиционных и наноматериалов Юрьев Анатолий Аркадьевич) – отзыв положительный с замечаниями:

- почему результаты по электропроводности алюминия, полученные для 108 атомов, лучше согласуются с экспериментом, чем результаты для 256 атомов?

- почему в автореферате нет сравнения расчетной теплопроводности алюминия с экспериментом?

- почему для алюминия не рассчитана теплоемкость?

2. Институт проблем химической физики РАН (ИПХФ РАН), г. Черноголовка, Московская область (к.ф.-м.н., старший научный сотрудник лаборатории Электромагнитных процессов в ударно-сжатых средах Шилкин Николай Сергеевич) – отзыв положительный, без замечаний.

3. Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН (ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН), г. Черноголовка, Московская область (д.ф.-м.н., старший научный сотрудник сектора плазмы и лазеров Петров Юрий Васильевич) – отзыв положительный с замечаниями:

- для плазмы эффективного состава CH_2 при максимальной температуре около 100 кК полезно сравнить результаты псевдопотенциальных расчетов с результатами полноэлектронных расчетов;

- хотелось бы, чтобы в автореферате присутствовали не только краткие ссылки на работы других авторов, но и список использованной литературы с полными библиографическими ссылками.

4. Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН (ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН), г. Черноголовка, Московская область (к.ф.-м.н., научный сотрудник сектора плазмы и лазеров Хохлов Виктор Александрович) – отзыв положительный, без замечаний.

5. Московский физико-технический институт (государственный университет) (МФТИ), г. Долгопрудный, Московская область (д.ф.-м.н., профессор департамента молекулярной и биологической физики Ткаченко Светлана Ивановна) – отзыв положительный, с замечаниями:

- вызывает сомнение приведенное в автореферате утверждение о том, что с помощью «...однажды построенных обменно-корреляционных функционалов и псевдопотенциалов оказывается возможным рассчитать свойства для большого числа веществ в различных условиях»;

- из автореферата не ясен способ, которым в расчете задавались и поддерживались температуры электронов и ионов.

6. Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина (РФЯЦ-ВНИИТФ), г. Снежинск, Челябинская область (к.ф.-м.н. Овечкин Антон Александрович) – отзыв положительный, с замечаниями:

- полезно изучить влияние на результат числа k -точек и энергии обрезания, используемых при квантовом молекулярно-динамическом моделировании;

- в дальнейшем было бы интересно изучить термодинамические функции плотной плазмы (например, теплоемкость) в двухтемпературном случае;

- в дальнейшем было бы интересно проинтерпретировать полученное убывание теплоемкости плазмы эффективного состава CH_2 при росте температуры от 5 кК до 10 кК.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается проводимыми ими исследованиями по теме диссертации.

Выбор Волкова Николая Борисовича в качестве оппонента обосновывается тем, что он является известным специалистом в области построения моделей свойств плотной плазмы и моделирования быстропротекающих процессов в плазменных образованиях:

1. N.B. Volkov, E.A. Chingina, A.P. Yalovets “Two-temperature model for the metals at high energy densities” // Известия высших учебных заведений. Физика. 2012. Т. 55, № 10/3. С. 438-442.
2. С.В. Барахвостов, М.Б. Бочкарев, Н.Б. Волков, К.А. Нагаев, В.П. Тараканов, С.И. Ткаченко, О.Р. Тимошенкова, Е.А. Чингина «Механизмы разрушения микронных проводников электромагнитным импульсом с субнаносекундным фронтом» // Письма в ЖЭТФ. 2011. Т. 94, № 7. С. 590-596.

3. S.V. Barahkvostov, M.B. Bochkarev, K.A. Nagaev, N.B. Volkov “Features of the plasma-channel formation during the voltage generator with the 1-MV/ns-voltage-rise-rate discharge to the vacuum coaxial line containing microconductor enclosed gap” // Известия высших учебных заведений. Физика. 2012. Т. 55, № 10/3. С. 36-39.

Выбор Магницкой Марии Викторовны в качестве оппонента обосновывается тем, что она является известным специалистом по расчету переносных и оптических свойств вещества в экстремальных условиях, квантовому молекулярно-динамическому моделированию и методу функционала плотности:

1. Е.Г. Максимов, С.В. Лепешкин, М.В. Магницкая «Первопринципные расчеты динамики решетки и фазовой диаграммы натрия при высоких давлениях и температурах» // Кристаллография. 2011. Т. 56, № 4. С. 725-728.
2. С.В. Лепешкин, М.В. Магницкая, Н.Л. Мацко, Е.Г. Максимов «Плавление и динамика решетки натрия при высоких давлениях. Расчет методом квантовой молекулярной динамики» // Журнал экспериментальной и теоретической физики. 2012. Т. 142, № 7. С. 115-122.
3. В.В. Бражкин, О.Б. Циок, М.В. Магницкая «ТермоЭДС кальция при высоком давлении» // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 97, № 7-8. С. 561-565.

Выбор ИОФ РАН в качестве ведущей организации обусловлен тем, что в ИОФ РАН проводится большое число экспериментов по воздействию лазерного излучения на вещество. Данные по переносным и оптическим свойствам, полученные в диссертации Князева Д.В., полезны при анализе и численном моделировании таких экспериментов:

1. С.А. Абросимов, А.П. Бажулин, А.П. Большаков, В.И. Конов, И.К. Красюк, П.П. Пашинин, В.Г. Ральченко, А.Ю. Семенов, Д.Н. Сovyк, И.А. Стучебрюхов, В.Е. Фортов, К.В. Хищенко, А.А. Хомич «Исследование прочности синтетических алмазов при растягивающих напряжениях, возникающих при пикосекундном лазерном воздействии» // Прикладная механика и техническая физика. 2015. Т. 56, № 1. С. 171-179.
2. С.А. Абросимов, А.П. Бажулин, В.В. Воронов, А.А. Гераськин, И.К. Красюк, П.П. Пашинин, А.Ю. Семенов, И.А. Стучебрюхов, К.В.

Хищенко, В.Е. Фортов. «Особенности поведения вещества в области отрицательных давлений, создаваемых действием лазерного импульса пикосекундной длительности» // Квантовая электроника. 2013. Т. 43, № 3. С. 246-251.

3. Е.В. Бармина, А.А. Серков, Г.А. Шафеев «Наноструктурирование монокристаллического карбида кремния пикосекундным ультрафиолетовым лазерным излучением» // Квантовая электроника. 2013. Т. 43, № 12. С. 1091-1093.

4. P.G. Kuzmin, G.A. Shafeev, G. Viau, B. Warot-Fonrose, M. Barberoglou, E. Stratakis, C. Fotakis “Porous nanoparticles of Al and Ti generated by laser ablation in liquids” // Applied Surface Science. 2012. Vol. 258, Issue 23. PP. 9283-9287.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

разработана параллельная программа для расчета переносных и оптических свойств по формуле Кубо-Гринвуда;

с помощью разработанной программы проведены расчеты переносных и оптических свойств алюминиевой плазмы при нормальной плотности в двухтемпературном случае; предложена эмпирическая аппроксимация, описывающая рассчитанные свойства;

доказано, что результаты расчетов по методике, используемой в диссертации, находятся в согласии со справочными и экспериментальными данными;

новых понятий и терминов не вводилось.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

применительно к проблематике диссертации результативно (эффективно, то есть с получением обладающих новизной результатов) использован метод расчета переносных и оптических свойств, основанный на квантовой молекулярной динамике и формуле Кубо-Гринвуда;

изложена процедура выбора оптимальных технических параметров расчета; раскрыто влияние плотности электронных состояний на статическую электропроводность плазмы эффективного состава CH_2 ;

изучено влияние температуры электронов и ионов на переносные и оптические свойства алюминиевой плазмы при нормальной плотности.

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

разработана эмпирическая аппроксимация переносных и оптических свойств алюминиевой плазмы при нормальной плотности;

определены переносные и оптические свойства алюминиевой плазмы, термодинамические, переносные и оптические свойства плазмы эффективного состава CH_2 ;

создана параллельная программа, которая в дальнейшем может быть использована для расчета переносных и оптических свойств по формуле Кубо-Гринвуда;

представлены таблицы с рассчитанными переносными свойствами алюминиевой плазмы, термодинамическими и переносными свойствами плазмы эффективного состава CH_2 .

Результаты диссертационного исследования могут быть рекомендованы для использования в ОИВТ РАН, ИОФ РАН (г. Москва), РФЯЦ-ВНИИЭФ (г. Саров), РФЯЦ-ВНИИТФ (г. Снежинск), ИПМ РАН (г. Москва), ФИАН (г. Москва), ТРИНИТИ (г. Москва, г. Троицк).

Оценка достоверности результатов исследования выявила:

теория, использованная в диссертации, приводит к результатам, находящимся в согласии с экспериментальными и справочными данными по теме диссертации;

идея базируется на методе функционала плотности, хорошо протестированном ранее;

установлено удовлетворительное совпадение результатов диссертации с данными, ранее полученными другими авторами по той же методике;

использована современная методика расчета переносных и оптических свойств, основанная на квантовой молекулярной динамике и формуле Кубо-Гринвуда и современный вычислительный пакет VASP.

Личный вклад соискателя состоит в получении результатов, изложенных в диссертации. Автором диссертации была создана параллельная программа для

расчета переносных и оптических свойств по формуле Кубо-Гринвуда. Подготовка основных публикаций по выполненной работе осуществлялась совместно с соавторами при определяющем вкладе соискателя. Результаты работы были представлены лично диссертантом на 13 международных и 12 российских конференциях. На основании проведенных исследований соискателем были сформулированы положения, выносимые на защиту.

Диссертационным советом сделан вывод о том, что диссертация представляет собой 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.

На заседании 23 декабря 2015 года диссертационный совет Д 002.110.02 принял решение присудить Князеву Д.В. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 26 человек, из них 12 докторов наук по специальности 01.04.08 – физика плазмы и 14 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 26, 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

к.ф.-м.н.

Васильев М.М.

23.12.2015 г.

М.П.

