

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.V. 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. Созык, И.А. Стучебрюхов, В.Е. Фортон, 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.

