

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.193.01
(Д 002.110.02), СОЗДАННОГО НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ
ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ВЫСОКИХ ТЕМПЕРАТУР
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК, ПО ДИССЕРТАЦИИ НА
СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № _____

решение диссертационного совета от 15.12.2021г. № 31

О присуждении Лавриненко Ярославу, гражданину Украины ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Исследование неидеальной электрон-ионной плазмы методом динамики волновых пакетов» по специальности 1.3.9 – физика плазмы принята к защите 8.10.2021г., (протокол заседания № 19) диссертационным советом 24.1.193.01 (Д 002.110.02), созданным на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (125412, г. Москва, Ижорская ул., д. 13, стр. 2, (495) 485-8345, jiht.ru), утвержденного Приказом Министерства образования и науки Российской Федерации № 105/нк от 11.04.2012г. (ред. 1046/нк от 15.10.2021г.)

Соискатель Лавриненко Ярослав 1993 года рождения, в 2017 году окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)».

Работает в должности научного сотрудника лаборатория № 1.6. – теплофизических баз данных (Термоцентр им. В.П. Глушко) Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

В 2021 году окончил очную аспирантуру Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего

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

Диссертация выполнена в лаборатории № 1.6 - теплофизических баз данных (Термоцентр им. В.П. Глушко) Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук.

Научный руководитель кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий лабораторией № 1.6 - теплофизических баз данных (Термоцентр им. В.П. Глушко) Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук Морозов Игорь Владимирович

Официальные оппоненты:

- доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник теоретического отдела Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра «Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук» Игнатов Александр Михайлович;

- кандидат технических наук, старший научный сотрудник центра теоретической физики и вычислительной математики отдела физики неидеальной плазмы Акционерного общества «Государственный научный центр Российской Федерации Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований» Решетняк Виктор Витальевич

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химической физики Российской академии наук (г. Черноголовка) в своем положительном заключении, составленном заведующим лабораторией электромагнитных процессов в ударно-сжатых средах, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. Минцевым В.Б. (утвержденном 26.11.2021г. ученым секретарем ИПХФ РАН д.х.н. Психой Б.Л.), указала, что новизна и научная значимость полученных результатов

заключается в создании новой модели неидеальной электрон-ионной плазмы и основанного на этой модели подхода для компьютерного моделирования – метода молекулярной динамики с волновыми пакетами и теории функционала плотности. Оригинальность предложенного метода заключается в том, что для определения полной энергии системы электронов кинетическая энергия и электростатические вклады рассчитываются методом динамики волновых пакетов, а обменно-корреляционная энергия и ее производные рассчитываются путем вычисления функционала электронной плотности, получаемой из параметров волновых пакетов и, в частности, таких как их положение и ширина.

Предложенный метод обладает рядом уникальных особенностей, таких как высокая скорость вычислений, возможность моделирования неадиабатических процессов и более точный учет квантово-механических эффектов в сравнении с исходным методом динамики волновых пакетов и классическим методом молекулярной динамики.

Полученные в диссертационной работе новые результаты в области компьютерного моделирования процессов в сильно неидеальной плазме и в веществе с высокой плотностью энергии представляют несомненный интерес для специалистов в данных областях. С полученными результатами целесообразно ознакомить следующие организации: Московский государственный университет, Санкт-Петербургский государственный университет, Институт проблем химической физики РАН, НИЦ Курчатовский институт, Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики и др.

Соискатель имеет 6 опубликованных работ по теме диссертации в реферируемых журналах из списка ВАК:

1. Lavrinenko Y. S., Morozov I. V., Valuev I. A. High performance wave packet molecular dynamics with density functional exchange-correlation term for non-ideal plasma simulations //Journal of Physics: Conference

- Series. – IOP Publishing, 2021. – Т. 1787. – №. 1. – 012043.
2. Lavrinenko Y. S., Morozov I. V., Valuev I. A. Wave packet molecular dynamics–density functional theory method for non-ideal plasma and warm dense matter simulations //Contributions to Plasma Physics. – 2019. – Т. 59. – №. 4-5. – e201800179.
 3. Lavrinenko Y. S., Morozov I. V., Valuev I. A. Thermodynamic properties of the nonideal hydrogen plasmas: Comparison of different simulation techniques //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2018. – Т. 946. – №. 1. – 012097.
 4. Reinholz H. et al. Relaxation and collective excitations of cluster nanoplasmas //Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics. – 2017. – Т. 51. – №. 1. – 014001.
 5. Lavrinenko Y. S., Morozov I. V., Valuev I. A. Reflecting Boundary Conditions for Classical and Quantum Molecular Dynamics Simulations of Nonideal Plasmas //Contributions to Plasma Physics. – 2016. – Т. 56. – №. 5. – С. 448-458.
 6. Lavrinenko Y. S., Morozov I. V., Valuev I. A. Reflecting boundary conditions for classical molecular dynamics simulations of nonideal plasmas //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2016. – Т. 774. – №. 1. – 012148.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. **Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»** (профессор кафедры вычислительной физики, член-корреспондент РАН, д.ф.-м.н. Петров И.Б.) – отзыв положительный, без замечаний.

2. **Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова»** (руководитель лаборатории

релятивистской лазерной плазмы, д.ф.-м.н. Савельев-Трофимов А.Б.) – отзыв положительный, с замечаниями:

- на стр.15 указано, что “значения температур, предсказанных методом МДВП-ФП, являются несколько заниженными в сравнении с другими теоретическими моделями”. К сожалению, автор не обсуждает причин такого результата.

- На стр. 3 присутствует странное утверждение, что “Неидеальная плазма - это экстремальное состояние вещества при высоких температурах и давлениях”. Не ясно, почему автор не дал нормального определения неидеальной плазмы.

- Подписи к большинству рисунков выполнена на английском языке.

- Результаты высокого уровня опубликованы в журналах с низким импакт фактором, в основном в журналах, не индексируемых WoS.

3. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук (главный научный сотрудник отделения квантовой радиофизики, профессор, д.ф.-м.н. Быченков В.Ю.) – отзыв положительный, без замечаний.

4. Федеральное государственное унитарное предприятие «Российский Федеральный Ядерный Центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина» (начальник Научно теоретического отделения №1, д.ф.-м.н. Лобода П.А.) - отзыв положительный, с замечаниям:

- На странице 10 в комментарии к формуле (3) выражение для вклада в электронную плотность от i -го волнового пакета, вообще говоря, должно содержать множитель, отвечающий фермиевским числам заполнения с указанием способа определения химического потенциала электронов. Или же, должно быть приведено пояснение, почему в контексте использования теории функционала электронной плотности эти числа заполнения можно считать равными единице.

- Непонятно, как определялось расстояние от границ ячейки моделирования, на котором результат считался малочувствительным к влиянию отражающего потенциала.

- Неясно, какой обменно-корреляционный потенциал использовался в модели МДВП-ФП: потенциал Кона-Шема (учитывающий только обменный вклад), Хедина-Лундквиста или какой-то другой потенциал.

- Определения “метод Ферми-Зельдовича”, “уравнение Ферми-Зельдовича” не являются общепринятыми: в автореферате следовало бы привести само уравнение и дать надлежащие ссылки на источники, где это уравнение называется соответствующим образом.

- В комментарии к рисунку 5 (страница 15) отсутствует пояснение, почему температуры, предсказанные методом МДВП-ФП для изэнтроп ударно сжатого дейтерия, получились “несколько” (и насколько?) заниженными по сравнению с другими теоретическими моделями.

- В тексте автореферата диссертации присутствует ряд грамматических ошибок и опечаток.

5. Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики им. Н.Л. Духова» (ведущий научный сотрудник подразделения № 171, к.ф.-м.-н. Мигдал К. П.) - отзыв положительный, с замечаниями:

- Было бы полезным подчеркнуть, что используемый вид гауссовой функции, описывающей волновой пакет, выдвинутый ранее Клаковым и Тёппфером, сохраняет симплектичность эрмитовой норм-матрицы и не приводит к появлению дополнительных множителей в уравнениях гамильтоновой динамики для канонических переменных, введенных для описания динамики волнового пакета. Это в положительную сторону отличает предложенный автором метод от ранее выдвинутого метода электронного силового поля (eFF), где уравнения движения для ширины и импульса гауссова пакета имеют дополнительный

множитель, возникающий из-за нарушения условия симплектичности норм-матрицы.

- При сравнении с методом eFF для ударной адиабаты Гюгонио для дейтериевой плазмы было бы полезным добавить результаты работы J. T. Su, W. A. Goddard III, Phys. Rev. Lett. 99, 185003 (2007), которая сделана разработчиками метода eFF и к тому же содержит сравнение со старой версией метода динамики волновых пакетов.
- Согласно работе одного из наиболее известных разработчиков метода динамики волновых пакетов К. Тёппфера (G. Zwicknagel, C. Toepffer, P.-G. Reinhard, Phys. Reports, 309, 117 (1999)) ещё одним возможным применением метода является описание потерь энергии заряженными частицами в плазме. Рассмотрение такой задачи могло бы повысить практическую ценность представленной автором работы. Кроме того, учитывая прогресс и в самом методе, достигнутый автором, и рост вычислительных возможностей за 20 лет, такой шаг мог бы привести к новым научным результатам, недоступным к получению другими методами.

б. Сколковский институт науки и технологий (профессор Сколковского института науки и технологий, д.ф.-м.н. Бриллиантов Н.В.), отзыв положительный, без замечаний.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается:

- д.ф.-м.н., Игнатов Александр Михайлович, является признанным специалистом в области компьютерного моделирования в физике плазмы.

1. Игнатов А. М. Устойчивость планарного плазменного кристалла //Физика плазмы. – 2020. – Т. 46. – №. 4. – С. 358-367.
2. Игнатов А. М. Нелинейная динамика линейной цепочки пылевых частиц //Физика плазмы. – 2020. – Т. 46. – №. 9. – С. 847-853.
3. Игнатов А. М. Влияние невзаимных сил на устойчивость пылевых кластеров //Физика плазмы. – 2021. – Т. 47. – №. 5. – С. 391-400.

- к.т.н., Решетняк Виктор Витальевич является признанным специалистом в области физики плазмы и численных методов атомистического моделирования.

1. Решетняк В. В., Решетняк О. Б., Филиппов А. В. Нуклеация и рост зародышей стабильной кристаллической фазы в переохлажденной жидкости юкавы //Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2021. – Т. 159. – №. 2. – С. 330-338.
2. Reshetniak V. V., Reshetniak O. B., Filippov A. V. Phase coexistence of Yukawa liquid and bcc crystal by the Kofke integration method and a two phase approach //Journal of Physics: Conference Series. – IOP Publishing, 2021. – Т. 1787. – №. 1. – 012056.
3. Aborkin A. V. et al. Thermal expansion of aluminum matrix composites reinforced by carbon nanotubes with in-situ and ex-situ designed interfaces ceramics layers //Journal of Alloys and Compounds. – 2021. – Т. 872. – 159593.

- Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химической физики Российской академии наук является профильной организацией, специализирующейся на проведении исследований в области физики плазмы и экстремального состояния вещества, в том числе исследований физико-химических процессов, протекающих при экстремально высоких значениях давления, температуры и плотности энергии.

1. Nikolaev D. N. et al. Measurement of dense plasma temperature of the shock- compressed silicon //Contributions to Plasma Physics. – 2021. – Т. 61. – №. 10. – e202100113.
2. Zaporozhets Y. B. et al. The investigation of the optics of shock-compressed strongly correlated plasma //Contributions to Plasma Physics. – 2021. – Т. 61. – №. 10. – e202100110.
3. Schoenberg K. et al. High-energy-density-science capabilities at the Facility for Antiproton and Ion Research //Physics of Plasmas. – 2020. – Т. 27. – №.

4. – 043103.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– Предложена модель неидеальной электрон-ионной плазмы, основанная на представлении электронов в форме гауссовских волновых пакетов и учете обменно-корреляционного взаимодействия, выраженного через функционал электронной плотности. Показано, что использование отражающих граничных условий позволяет решить проблему расплывания волновых пакетов, а влияние этого типа граничных условий на измеряемые характеристики плазмы можно учесть за счет анализа профиля электронной плотности внутри расчетной ячейки.

– На базе предложенной модели разработан эффективный метод компьютерного моделирования неидеальной плазмы и плотного разогретого вещества. Показано, что расчет обменно-корреляционного взаимодействия может быть ускорен более чем в 100 раз за счет использования адаптивной пространственной сетки и применения графических ускорителей. Интеграция применяемого алгоритма в пакет LAMMPS позволяет выполнять расчеты на суперкомпьютерных кластерах с ускорением до десятков раз.

– С помощью метода МДВП-ФП исследованы равновесные свойства неидеальной плазмы водорода и дейтерия. На примере молекулы водорода показано, что учет обменно-корреляционного взаимодействия улучшает точность моделирования многоэлектронных систем. Результаты расчета уравнения состояния неидеальной водородной плазмы показывают преимущества метода в области высокой концентрации электронов и демонстрируют качественное согласие с результатами более трудоемкого квантового метода Монте-Карло.

– Проведен расчет уравнения состояния водородной плазмы в широком диапазоне температур до 50 кК и концентраций электронов до 10^{24} см⁻³, расчет ударной адиабаты дейтерия до давлений 350 ГПа и, на основе разработанного алгоритма для моделирования изоэнтропического сжатия с

использованием метода МДВП-ФП, рассчитана изоэнтропа сжатия дейтерия до плотностей 15 г/см^3 .

– На примере расчетов изоэнтропы сжатия плазмы дейтерия и электрон-ионной релаксации в неизотермической неидеальной плазме водорода продемонстрированы возможности предложенного метода для изучения динамических и неравновесных процессов за пределами адиабатического приближения, что предоставляет новый уникальный инструмент для исследования свойств вещества с высокой плотностью энергии.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что результаты, изложенные в диссертации, могут быть использованы для фундаментальных исследований в области физики неидеальной плазмы и плотного разогретого вещества, интерпретации экспериментальных данных по термодинамическим свойствам неидеальной плазмы водорода и дейтерия в области высоких давлений, создания эффективных методов компьютерного моделирования вещества в условиях облучения твердотельных мишеней интенсивными лазерными импульсами и потоками частиц, ударного сжатия, в астрофизических объектах, прикатодной области высоковольтных разрядов, на стенках ускорителей частиц и в других экстремальных состояниях.

Результаты, изложенные в диссертации, могут быть использованы для фундаментальных исследований в области физики неидеальной плазмы и плотного разогретого вещества. С предложенным в работе методом компьютерного моделирования и результатами его применения целесообразно ознакомить следующие организации: Московский государственный университет, Московский физико-технический институт, Санкт-Петербургский государственный университет, Институт проблем химической физики РАН, НИЦ Курчатовский институт, Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики и др.

Оценка достоверности результатов. Степень достоверности полученных результатов является высокой, что подтверждается, с одной стороны, изложением материалов диссертационной работы в рецензируемых изданиях, индексируемых в системах Web of Science и Scopus, а с другой стороны, непротиворечивостью полученных закономерностей и данных, известных из научной литературы. В работе использованы современные математические методы и методы математического моделирования. Обсуждение опирается на надежно установленные факты и закономерности.

Личный вклад соискателя. Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причем вклад диссертанта был определяющим. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором.

Апробация результатов исследования проводилась на 17 российских и международных конференциях и симпозиумах. Основные публикации по выполненной работе также подготовлены при определяющем участии автора.

В ходе защиты диссертации критических замечаний высказано не было. Соискатель Лавриненко Ярослав согласился с рядом технических замечаний и ответил на задаваемые ему в ходе заседания вопросы, приведя собственную аргументацию и обоснования.

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

На заседании от 15.12.2021г. диссертационный совет принял решение: за решение научной задачи, имеющей значение для развития соответствующей отрасли знаний, либо новые научно обоснованные технические, технологические или иные решения и разработки, имеющие существенное значение для развития страны, присудить Лавриненко

Ярославу ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 21 человек, из них очно: 10 докторов наук (6 - по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 4 по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника), дистанционно: 11 докторов наук (5 - по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 6 - по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника), участвовавших в заседании, из 30 человек, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за 21, против 0, недействительных бюллетеней - 0.

Зам. председателя диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02)
д.ф.-м.н., профессор

Андреев Н.Е.

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



Васильев М.М.

15.12.2021г.