

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

**СТЕНОГРАММА**

заседания диссертационного совета 24.1.193.01 (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 15 декабря 2021 г.  
(протокол № 31)

Защита диссертации **Лавриненко Ярослава**  
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук  
**«Исследование неидеальной электрон-ионной плазмы методом динамики  
волновых пакетов»**

Специальность 1.3.9 – физика плазмы;

Москва – 2015

## СТЕНОГРАММА

заседания диссертационного совета 24.1.193.01 (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 № 31 от 15 декабря 2021 г.

Диссертационный совет 24.1.193.01 (Д 002.110.02) утвержден Приказом № 105/нк Минобрнауки РФ 11 апреля 2012г., редакция Приказ № 1046/нк от 15 октября 2021г. Министерства науки и высшего образования Российской Федерации, в количестве 30 человек. На заседании присутствует 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). Дополнительно введены на разовую защиту 0 человек. Кворум имеется.

**Председатель** – Зам. председателя диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02)

д.ф.-м.н., профессор Андреев Николай Евгеньевич

**Ученый секретарь** – ученый секретарь диссертационного совета

24.1.193.01(Д002.110.02) д.ф.-м.н. Васильев М.М.

1	Петров О.Ф.	Академик, д.ф.-м.н.	1.3.9	Подключен
2	Андреев Н.Е.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.14	Присутствует
3	Канель Г.И.	Чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Отсутствует
4	Васильев М.М.	Д.ф.-м.н.	1.3.9	Присутствует
5	Агранат М.Б.	Д.ф.-м.н., с.н.с.	1.3.14	Отсутствует
6	Амиров Р.Х.	Д.ф.-м.н., с.н.с.	1.3.9	Присутствует
7	Баженова Т.В.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Отсутствует
8	Вараксин А.Ю.	Чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор	1.3.14	Присутствует
9	Васильев М.Н.	Д.т.н., профессор	1.3.14	Подключен
10	Василяк Л.М.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Подключен
11	Воробьев В.С.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Подключен
12	Гавриков А.В.	Д.ф.-м.н., доцент	1.3.14	Присутствует
13	Голуб В.В.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Присутствует
14	Грязнов В.К.	Д.ф.-м.н.	1.3.14	Подключен
15	Дьячков Л.Г.	Д.ф.-м.н.	1.3.9	Присутствует
16	Еремин А.В.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.14	Присутствует
17	Зейгарник Ю.А.	Д.т.н., с.н.с.	1.3.14	Присутствует
18	Иосилевский И.Л.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.14	Подключен
19	Кириллин А.В.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Отсутствует
20	Лагарьков А.Н.	Академик, д.ф.-м.н., профессор	1.3.14	Отсутствует
21	Ломоносов И.В.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Отсутствует
22	Медин С.А.	Д.т.н., профессор	1.3.14	Подключен
23	Норман Г.Э.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.14	Подключен
24	Полежаев Ю.В.	Чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Отсутствует
25	Савватимский А.И.	Чл.-корр. РАН, д.т.н., профессор	1.3.14	Присутствует
26	Сон Э.Е.	Академик, д.ф.-м.н., профессор	1.3.14	Отсутствует
27	Старостин А.Н.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Отсутствует
28	Филиппов А.В.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Присутствует
29	Храпак А.Г.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.14	Присутствует
30	Яньков Г.Г.	Д.т.н., с.н.с.	1.3.9	Подключен

## ПОВЕСТКА ДНЯ

На повестке дня защита диссертации научного сотрудника лаборатории 1.6 – теплофизических баз данных (Термоцентр им. В.П. Глушко) Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН) **Лавриненко Ярослава** на тему «Исследование неидеальной электрон-ионной плазмы методом динамики волновых пакетов». Диссертация впервые представлена на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы. Диссертация выполнена в в лаборатории № 1.6 - теплофизических баз данных (Термоцентр им. В.П. Глушко) ОИВТ РАН (125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, [jiht.ru](http://jiht.ru)).

### Научный руководитель:

**Морозов Игорь Владимирович** – к.ф.-м.н., заведующий лабораторией № 1.6 - теплофизических баз данных (Термоцентр им. В.П. Глушко) Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук, г. Москва.

### Официальные оппоненты:

**Игнатов Александр Михайлович** – гражданин РФ, д.ф.-м.н. главный научный сотрудник теоретического отдела Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра «Института общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук» (119991, г. Москва, Ленинские горы, 1/2, тел.: +7(495)9392694 [phys.msu.ru](http://phys.msu.ru), e-mail: [uvarov@phys.msu.ru](mailto:uvarov@phys.msu.ru))

**Решетняк Виктор Витальевич** – гражданин РФ, к.т.н. старший научный сотрудник центра теоретической физики и вычислительной математики отдела физики неидеальной плазмы Акционерного общества "Государственного научного центра Российской федерации Троицкого института инновационных и термоядерных исследований" (108840, г. Москва, г. Троицк, ул. Пушкиных, вл. 12, тел. (495) 841-5309, [triniti.ru](http://triniti.ru), e-mail: [liner@triniti.ru](mailto:liner@triniti.ru))

### Ведущая организация:

**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт проблем химической физики Российской академии наук (ИПХФ РАН; Россия, 142432, г. Черноголовка, проспект академика Семенова, д. 1, (495) 993-5707, [icp.ac.ru](http://icp.ac.ru), e-mail: [office@icp.ac.ru](mailto:office@icp.ac.ru))**

На заседании присутствуют официальный оппонент к.т.н. старший научный сотрудник Решетняк В.В., научный руководитель Лавриненко Я.С. к.ф.-м.н. Морозов И.В.

## СТЕНОГРАММА

### Ученый секретарь

В наш диссертационный совет обратился Лавриненко Ярослав с просьбой принять к защите его диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности физика плазмы. Тема "Исследование неидеальной электрон-ионной плазмы методом динамики волновых пакетов". По диссертации была создана экспертная комиссия из состава членов диссертационного совета в составе Игоря Львовича Иосилевского, Филиппова Анатолия Васильевича и Генри Эдгаровича Нормана. Эксперты сказали, что работа может защищаться в нашем диссертационном совете, соответствует требованиям ВАК. В деле имеются все документы, оформленные в соответствии с требованиями ВАК. С вашего позволения зачитывать я их не буду. А если есть вопросы я готов на них ответить.

### Председатель

Ну если вопросов нет, тогда перейдем к защите по существу. Ярослав, пожалуйста, вам 20 минут.

### Лавриненко Я.

*Выступает с докладом по диссертационной работе (выступление не стенографируется, доклад Лавриненко Я. прилагается).*

### Председатель

Спасибо, Ярослав. Пожалуйста, вопросы.

### Амиров Р.Х.

Меня интересует область применимости вашего метода в разных концентрациях, какие механизмы новые при этом включаются и сравнить область применимости с классическим подходом.

### Лавриненко Я.

Можно вернуться к диаграмме, на которой отмечена область применимости молекулярной динамики. Мы ограничили её плотностью  $10^{22}$  см<sup>-3</sup>, хотя на самом деле потенциал Кельба позволяет нам слегка продвинуться в эту область, но тоже не сильно далеко, в то время как предлагаемый нами метод демонстрировал результаты, которые согласуются с экспериментами при плотностях около  $10^{25}$  см<sup>-3</sup>, до которых мы дошли в процессе моделирования квазиэнтропического сжатия. Собственно, это и обосновывает наш выбор ограничения метода по плотности.

### Амиров Р.Х.

Вопрос несколько по другому сформулирован: могу ли я моделировать плазму при более высоких плотностях или возникают некие физические эффекты, которые не позволяют нам этого сделать?

### Лавриненко Я.

В целом, моделирование при более высокой плотности теоретически возможно, но так как мы этого не проверяли, то мы не можем утверждать этого. То есть предпосылок,

запрещающих это делать, мы пока не обнаружили, но утверждать смело, что при более высокой плотности мы получим что-то достоверное, мы также не можем.

**Амиров Р.Х.**

Я имею в виду классические методы, что имеются в наличии.

**Лавриненко Я.**

Если говорить о классической молекулярной динамике, то у нас является ограничением псевдопотенциал, а также низкая степень учета эффектов вырождения. Когда мы моделировали классической молекулярной динамикой водородную плазму и рассчитывали её энергию, то при плотностях более высоких, чем  $10^{22} \text{ см}^{-3}$ , у нас наблюдались некоторые эффекты, связанные с образованием в системе артефактов в виде "слипшихся" электронов в одной точке, что физически не корректно.

**Амиров Р.Х.**

Всё, спасибо.

**Воробьев В.С.**

Можно вопрос, Воробьев.

**Председатель**

Да, пожалуйста.

**Воробьев В.С.**

Сейчас интенсивно обсуждается в литературе возможность в неидеальной электрон-ионной плазме фазового перехода. И этот фазовый переход может быть обусловлен как взаимодействием сильных электронов и ионов, так и процессом ассоциации и диссоциации в молекулярном газе. Как-то у вас это не прозвучало. В ваших исследованиях, вы получили что-нибудь, что говорит в пользу или против этого процесса?

**Лавриненко Я.**

В наших расчетах мы никаких намеков на наличие фазового перехода не получили. Поэтому ничего про него и сказано не было.

**Воробьев В.С.**

И какова роль процессов ассоциации и диссоциации? Как-то вы не выделили на этих картинках, ну скажем без них и с ними. У вас молекулярной газ есть, потом диссоциировал, стал атомарным. Это же переходы все, такие как бы, размытые фазовые. Ну и как вы продемонстрируете их влияние.

**Лавриненко Я.**

Особого исследования влияния данных процессов, ассоциации и диссоциации, у нас в работе не проводилось. И более того, если рассматривать нашу ударную адиабату, то она имеет достаточно пологий ход с отсутствием характерного изгиба, который наблюдается в других работах, авторы которых связывают его наличие с процессом диссоциации. У нас такого исследования не проводилось и, возможно, в дальнейшем мы займемся этим вопросом.

**Савватимский А.И.**

Скажите, пожалуйста, можно ли указать погрешность вашего расчета для какого-то конкретного параметра, температуры или числа частиц. Вообще такая возможность

оценки погрешности присутствует в вашем подходе или ее нет?

**Лавриненко Я.**

Основные погрешности, которые у нас возникают, и которые мы можем указать и оценить - это статистические погрешности и связанные с флуктуациями наблюдаемых нами параметров в процессе моделирования. Так как мы брали достаточно длинные траектории и системы с большим количеством частиц, то размер этих погрешностей в целом сопоставим с размером маркера на диаграмме, поэтому мы здесь их и не отмечали.

**Савватимский А.И.**

Спасибо.

**Председатель**

Как там, Ольга Александровна, больше нет желающих?

**Панова О.А.**

Там больше нет.

**Председатель**

Тогда мы возвращаемся в зал.

**Вараксин А.Ю.**

Вы очень быстро говорили, но говорили очень четко и это хорошо. Мой вопрос касается преимуществ и недостатков предложенной вами модели. Среди трех ограничений, последнее третье было, "ее применение только для простых атомов". А вот если атом будет сложный, то есть будет больше электронов, то что, возникают какие-то непреодолимые трудности? Они касаются времени расчета или это возрастает погрешность, что перекрывает все исследуемые эффекты? Вот эти вещи проясните, пожалуйста.

**Лавриненко Я.**

Сначала более глобальный ответ на этот вопрос. Учитывая пример использования родственного нам метода под названием electron Force Field, который тоже является методом динамики волновых пакетов и успешно применялся для описания атомов с сложной электронной структурой, то можно говорить о том, что семейство данных методов способно моделировать такие атомы. Если говорить о работе, которую мы проделали, то выбор водородоподобных атомов обоснован необходимостью валидации предлагаемого метода, что легче делать на атомах с простой электронной структурой. На данный момент мы проводим расчеты квазиизэнтропического сжатия для гелия, которые пока еще не завершены, но тем не менее демонстрируют некоторые приемлемые результаты. Если рассматривать более сложные атомы, с более сложной электронной структурой, то нам необходимо для нашего метода либо уточнять параметризацию волновой функции, потому что Гауссовый волновой пакет не позволяет точно параметризовать ассиметричные орбитали, либо же вводить псевдопотенциалы, как это делается в eFF. В целом, это является направлением нашей дальнейшей работы.

**Председатель**

Спасибо, еще вопросы, пожалуйста.

**Дьячков Л.Г.**

Может быть, я прослушал, вы говорили, возможно, но вот какое должно быть

соотношение или ограничение на размер волнового пакета и расчетной области.

**Лавриненко Я.**

Ограничение расчетной области у нас выбирается из требований к количеству частиц для набора достаточно точных статистических данных. Эти ограничения можно получить из некоторых предварительных расчетов, выполненных нами в классической молекулярной динамике. Это нам дает размер моделируемой системы. Касательно размера ширины волнового пакета: так как мы используем отражающие граничные условия, то у нас размеры волновых пакетов гарантированно не превышают размера ячейки и в большинстве случаев они по размерам в десятки раз меньше, чем пространство требуемой ячейки.

**Дьячков Л.Г.**

То есть каких-то таких вот формальных ограничений нет?

**Лавриненко Я.**

Нет, формальных ограничений нет. Если мы возьмем периодические граничные условия, то там размер пакета может увеличиваться до бесконечности.

**Дьячков Л.Г.**

Если размер пакета больше области расчета, то это как-то странно.

**Лавриненко Я.**

Да, совершенно верно. И с этим мы как раз боремся путем введения вот такого типа граничных условий, чтобы обеспечить, что ширина волнового пакета будет находиться в пределах одной ячейки и меньше её.

**Дьячков Л.Г.**

То есть, где-то по порядку величины они могут быть?

**Лавриненко Я.**

Я сейчас продемонстрирую одну картинку, которая показывает распределение ширины волновых пакетов внутри ячейки. На ней можно оценить характерный размер волновых пакетов в моделировании. Это размер половины ячейки, то есть сама ячейка в два раза больше - 40 ангстрем, и пик распределения ширины волновых пакетов находится где-то на 4-х ангстремах.

**Председатель:**

Пожалуйста, еще вопросы есть? Если нет, я бы тогда хотел спросить, вы на части иллюстрации ваших результатов приводили сравнение с молекулярной динамикой классической и как бы положительно оценивали тот факт, что они совпадали. Тогда вроде роль вашей работы уменьшается. Это первый вопрос. Второй вопрос вы к негативным отнесли необходимость использования современных вычислительных систем. По-моему, это достоинство, а не недостаток. И третий вопрос, чтобы больше не возвращаться. Значит, вам приходится там увеличивать плотность за счет того, что у вас такие граничные условия. Вы говорили, что в центре электронная плотность увеличена, и вы должны это учитывать. Но это, как говорится, ручная подгонка происходит. А вот какая-нибудь сходимости тех результатов, которые вы показывали от величины вашей области и, соответственно, от роли границы, исследовалась или нет?

**Лавриненко Я.**

Так, давайте в обратном порядке пойдём. Сходимость от размера моделируемой системы нами изучалась. В самом тексте диссертации представлены соответствующие картинки. Мы наблюдали сходимость рассчитываемых величин при увеличении размера ячейки, так как у нас размер ячейки, занятый однородной электронной плотностью, становится существенно больше приграничных слоев. Тот прием, который мы используем, связанный с расчетом плотности в середине ячейки, он используется только для систем с малым числом частиц.

**Председатель**

Так быстрее можно делать?

**Лавриненко Я.**

Да. Второй вопрос касательно сравнения с классической молекулярной динамикой. Сравнение с классической МД у нас присутствовало для процессов релаксации, так как моделируемые там системы имеют малую плотность, и результаты их моделирования нам известны, и с ними можно сравниться.

**Председатель**

То есть это тестовый расчет?

**Лавриненко Я.**

Да, это тестовый расчет. На самом деле метод ориентирован на то, что он будет работать при больших плотностях, где молекулярная динамика уже не доступна. Касательно картинки с энергией водородной плазмы, то совпадение с МД в области малой плотности является естественным, потому что роль обменно-корреляционных взаимодействий там достаточно мала, и мы получаем обычную МД, грубо говоря, с некоторым парным псевдопотенциалом. И следующий вопрос...

**Председатель**

Про расчет на карточках. Почему это плохо?

**Лавриненко Я.**

С одной стороны, это хорошо, наш метод может использовать современные вычислительные устройства, с другой стороны, не везде они есть.

**Председатель**

Спасибо, больше нет вопросов. Тогда, значит, у нас по порядку: Игорь Владимирович, пожалуйста, вам слово.

**Морозов И.В.**

Уважаемые коллеги, я очень рад, что работа Ярослава дошла до того, чтобы её можно было представить на совете. Я должен сказать, что Ярослав работает в нашем институте еще начиная с того момента, когда он был второкурсником физтеха и посещал мои лекции, собственно, с этого началось наше сотрудничество. Надо сказать, что Ярослав сразу показался мне человеком очень компетентным, особенно в вопросах вычислительной физики, очень активно и прилежно систематически занимался научной работой. Соответственно, он защитил диплом под моим руководством и вот сейчас представляет эту работу здесь. Я должен сказать, что вот эта задача, которую мы рассмотрели, она оказалась очень непростой, и очень много раз наши расчеты фактически заходили в тупик. Мы рассматривали какой-то вариант метода, который оказывался либо слишком медленным, либо выдавал странные результаты. Долго мы обсуждали



возможность использования различных граничных условий, на самом деле до сих пор этот вопрос дискуссионный, но тем не менее, несмотря на эти явные сложности, Ярослав мужественно продолжал работать. То есть мы теряли иногда по полгода на какой-то тупиковой ветви, но, тем не менее, Ярослава это не демотивировало. Он рассматривал другой метод и, благодаря его настойчивости на самом деле, нам удалось пробиться через вот эти самые преграды, через которые, на самом деле, многие люди не пробились. Потому что я неоднократно на конференциях слышал о том, что этот метод тупиковый, и вряд ли он может принести какой-то результат. Но я думаю, что именно благодаря настойчивости Ярослава, его целеустремленности, эта работа была доведена до конца и, я надеюсь, что она будет продолжена, поэтому я буду рад, если диссертационный совет сочтет возможным поддержать эту работу и присвоить ученую степень.

### **Председатель**

Спасибо. Михаил Михайлович, вы нас ознакомьте, пожалуйста, с письмами.

### **Ученый секретарь**

В нашу организацию на разосланный автореферат поступили отзывы. Всего 6 отзывов и все они положительные, ряд отзывов имеет замечания. Я остановлюсь только на перечислении организаций, от которых поступили отзывы, кем они подписаны и на замечаниях, если они есть.

**Первый отзыв** поступил из Московского физико-технического института. Отзыв составлен Петровым Игорем Борисовичем, доктором физ.-мат. наук., член-корреспондентом РАН. Отзыв положительный, без замечаний.

**Второй отзыв** поступил из МГУ имени Ломоносова. Отзыв составил доктор физ.-мат. наук Савельев-Трофимов Андрей Борисович. Отзыв положительный, имеются замечания:

- На стр.15 указано, что “значения температур, предсказанных методом МДВП-ФП, являются несколько завышенными 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 выполнены на английском языке.

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

Тем не менее, это не снижает высокой оценки работы, а соискатель заслуживает присуждения искомой степени.

**Следующий отзыв** поступил из физического института имени Лебедева Российской академии наук. Составлен и подписан профессором, доктором физ.-мат. наук Быченковым Валерием Юрьевичем. Отзыв положительный, без замечаний.

**Следующий отзыв** из Российского федерального ядерного центра ВНИИТФ им. Забабахина. Отзыв составлен и подписан доктором физ.-мат. наук Лободой Петром Анатольевичем. Отзыв положительный, имеются замечания:

- 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.

Тем не менее, это не снижает общей положительной оценки. Соискатель заслужил присуждение искомой степени.

**Пятый отзыв** поступил из Всероссийского научно-исследовательского института автоматики им. Духова. Подписан и составлен ведущим научным сотрудником, кандидатом физ.-мат. наук Мигдалом Кириллом Петровичем, отзыв положительный, имеются замечания:

- 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.

Наконец, **шестой отзыв** поступил из Сколковского института науки и технологий подписан доктором физ.-мат. наук Бриллиантовым Николаем Васильевичем. Отзыв положительный, без замечаний.

В деле имеется **отзыв ведущей организации**. В качестве ведущей организации выступал институт проблем химической физики Российской академии наук. С вашего позволения, зачитывать отзыв целиком я не буду, остановлюсь только на структуре и на замечаниях, которые в этом отзыве сделаны. Отзыв подписан Виктором Борисовичем Минцевым, член-корреспондентом РАН, главным научным сотрудником. Итак, отзыв включает в себя актуальность, научно-практическую новизну, обсуждение достоверности полученных результатов, а также описание структуры и общее содержание диссертационной работы, с которой нас соискатель познакомил. Обсуждаются основные

результаты, а также результаты и рекомендации по использованию этих результатов и выводов работы. В отзыве имеется ряд замечаний.

- Текст диссертации изобилует большим количеством орфографических ошибок и опечаток, особенно в первой половине диссертации, что затрудняет чтение диссертации.

- В диссертации уделено значительное внимание анализу части экспериментов, в частности, экспериментов по отражению лазерного излучения от ударно-сжатой плазмы, но в дальнейшем изложении эти данные никак не потребовались. Не совсем понятна практическая цель этого анализа.

- В диссертации проведено сравнение полученных данных по ударному сжатию дейтерия в координатах плотность-давление и указано хорошее совпадение с данными эксперимента Sandia по максимальной степени сжатия дейтерия, в то же время, не прокомментировано, что это максимальное сжатие достигнуто при совершенно других, отличающихся в 4 раза давлениях.

- Автор почему-то ограничился лишь американскими экспериментальными данными, пренебрегая данными эксперимента, полученными в Сарове в 2001-2005 годах.

- На наш взгляд, следовало бы дополнительно привести сравнение результатов расчета в координатах плотность-температура, что существенно дополнило бы впечатление о работоспособности предлагаемого метода.

Тем не менее, все перечисленные выше замечания не носят принципиального характера и не затрагивают основных результатов работы. Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая по актуальности поставленных задач, научной новизне, теоретической и практической значимости, достоверности полученных результатов, степени обоснованности выводов, объему выполненных исследований и уровню публикаций в открытой печати полностью соответствует квалификационным требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ No 842 от 24 сентября 2013 г., предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор Лавриненко Ярослав заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

### **Председатель**

Спасибо, Михаил Михайлович. Пожалуйста, вам время для ответа.

### **Лавриненко Я.**

С вашего позволения, я возьму несколько листов, на которых продублированы вопросы, чтобы ничего не пропустить. Начнем с замечаний от **ведущей организации**.

**Первое замечание**, про обилие грамматических ошибок. Согласен, ошибки могут присутствовать в тексте.

**Второе замечание**, касаясь приведения в литературном обзоре данных экспериментов, которые не используются в дальнейшем. Данные эксперименты приведены для демонстрации актуальности разрабатываемого нового метода и мы в дальнейшем предполагаем, что данный метод может быть использован для описания результатов этих экспериментов.

**Третье замечание**, относительно давления на ударной адиабате. Завышение давления в тексте диссертации отмечено нами, но оно отмечено только в области низких температур. Действительно, стоило бы отметить его еще и при приближении к пределу сжимаемости. Возможной причиной такого завышения является недостаточная точность параметризации волновой функции одним Гауссовым пакетом, а также, возможно, выбор тривиального обменно-корреляционного функционала. В работах Дежарле и Кнудсона предполагается, что именно в области максимального сжатия существенно проявляется влияние обменно-корреляционных функционалов.

**Четвертое замечание**, касательно отсутствия точек из Сарова. Да, действительно, в тексте диссертации у меня представлены только данные с иностранных лабораторий. Но для презентации эти данные с Сарова были нанесены на график (черные точки). Они, в целом, тоже согласуются с полученными данными, их анализ будет опубликован в дальнейшем.

**Пятое замечание**, касательно дополнения рисунка с ударной адиабатой в координатах  $P(\rho)$ , аналогичным точками в координатах  $T(\rho)$ . Да, эти данные стоило бы представить в тексте диссертации. В докладе это график представлен, и он демонстрирует хорошее согласие наших данных с другими работами.

### **Лавриненко Я.**

#### **Отзыв от МГУ им. Ломоносова.**

**Первое замечание**, касательно отсутствия комментариев о причинах занижения температуры в процессе квазиизэнтропического сжатия. Занижение температуры у нас наблюдалось только в сравнении с методом квантовой молекулярной динамики. Если сравнивать с моделью SAHA, которой эти расчеты были проведены, то там мы идем чуть выше него по температурам. Возможно, отличие в температурах также можно связать с недостаточной точностью параметризации волновой функции, так как занижение температуры наблюдается в сравнении с ДФТ. Стоит отметить, что наш метод не предполагался как прямой конкурент теории функционала плотности в плане точного описания равновесного состояния. Его основной целью применения является описание релаксационных и неадиабатических процессов, которые для ДФТ недоступны. И то, что наш метод демонстрирует подобные результаты, мы считаем это вполне приемлемым.

**Второе замечание**, касательно определения неидеальной плазмы. Насколько я помню, оно дано дальше на этой же странице.

**Третье замечание**, относительно подписей к рисункам. Скорее всего подразумевается, что легенда и подписи к осям выполнены на английском. Да, это так, но описания всех кривых и всех величин приведено в тексте автореферата на русском языке в исчерпывающем количестве.

**Четвертое замечание** относительно публикаций. Насколько мне помнится, что все приведенные публикации и все журналы, которые там представлены, они индексируются WoS.

### **Председатель**

Conference series не имеют импакт-фактора.

### **Лавриненко Я.**

Да, он действительно не имеет импакт-фактора. Но там три из шести журналов они входят в квинтиль и имеют импакт-фактор. Ну и последнее, наши публикации, которые, к сожалению, не вошли в список публикаций диссертации, потому что вышли слишком поздно, они уже в более высокорейтинговых журналах.

### **Лавриненко Я.**

Теперь к отзывам от ВНИИТФ им. Забабахина.

**Первое замечание**, относительно способа расчета электронной плотности. В методе МДВП расчет чисел заполнения не является особо тривиальной задачей, нежели для теории функционала плотности. Поэтому исследования в данном направлении мы будем продолжать, но пока мы сделали довольно грубое предположение, что они все равны единице, и мы их не учитываем.

**Второе замечание**, связанное с определением расстояния от границы ячейки моделирования, на котором результат считается мало чувствительным к влиянию

окружающего потенциала. Вывод о размере области, по которой мы можем выполнять расчет электронной плотности или других параметров, можно получить либо экспериментально, исследуя сходимость требуемых величины в зависимости от выбранного внутреннего объема, либо же опираясь на некоторые предварительные расчеты. В целом, предположение о том, что внутренняя область, ограниченная половиной ячейки, будет содержать достаточное количество частиц для набора статистики, будет справедливо для системы с 512 частицами и больше.

**Третье замечание.** В работе использовалось приближение локальной электронной плотности с параметризацией Perdew и Zunger, предложенной в их работе 1981 года. Действительно, ссылка на этот функционал не представлена в автореферате, но она присутствует в тексте диссертации.

**Четвертое замечание.** Касательно определения метода расчета изэнтропии, то аналогично. Ссылка есть в тексте диссертации.

**Пятое замечание,** относительно температуры, оговорено ранее. Ну и то, что есть опечатки - да, согласен.

### Лавриненко Я.

**Касательно отзыва от ВНИИА им. Духова.**

**Первое замечание,** было бы полезно подчеркнуть, что используемый вид гауссовой волновой функции описывает волновой пакет. Да, в целом, было бы это полезно это подчеркнуть, действительно, различия между этими двумя методами существуют.

**Второе замечание,** при сравнении с методом eFF для ударной адиабаты Гюгонио для дейтериевой плазмы было бы полезно добавить результаты работы Su и Goddard. Да, действительно, было бы полезно, эти результаты мы добавили для презентации, но они не вошли в текст диссертации.

**И последнее замечание:** согласно работе одного из наиболее известных разработчиков, еще одним возможным применением метода является описание потерь энергии. Да, эта задача была бы интересной, возможно, является актуальной и, я думаю, мы рассмотрим ее в будущем, так как есть некоторые предпосылки, что она может быть успешно решена.

### Председатель

Спасибо. Мы переходим к заслушиванию рецензентов, оппонентов и первое слово предоставляется Виктору Витальевичу. Пожалуйста.

### Решетняк В.В.

Диссертационная работа направлена на развитие метода молекулярной динамики волновых пакетов, что, на мой взгляд, является очень важным, потому что в отличие от обычных ab initio методов молекулярной динамики, этот метод позволяет учитывать и рассматривать релаксационные процессы и рассчитывать совместно динамику электронов и ионов. И, по сравнению с классической молекулярной динамикой, позволяет продвинуться в область больших плотностей, то есть заслуживает внимания. Что касается проблем, связанных с использованием этого метода, то это, во-первых, учет обменного взаимодействия электронов при сохранении высокой производительности метода, высокой скорости, и, во-вторых, это одно из основных ограничений, которое я вижу, это расчеты неограниченных систем. Есть принципиальные трудности, они отмечены в работах разных авторов, связанные с использованием периодических граничных условий. Работа Ярослава как раз направлена на преодоление этих трудностей и, в связи с этим, является очень ценной и актуальной. Работа мне понравилась, но по результатам прочтения диссертации у меня возникло несколько замечаний.

Первое: в обзорной части диссертации недостаточное внимание уделено квантовым

методам молекулярной динамики, развитым для неадиабатических процессов. Упоминается о существовании таких методов, но, мне кажется, все-таки, поскольку это ваши основные конкуренты, можно было чуть-чуть больше внимания уделить этим методам.

Потом: утверждение о неправомерности использования вириального уравнения состояния в системе с отражающими граничными условиями на странице 71, на мой взгляд, требует пояснения. После прочтения диссертации я не очень понял, что имел в виду автор.

Дальше: при описании предложенного автором нового метода расчета уравнения изоэнтропы недостаточное внимание уделено обратимости процесса сжатия. Мне неясно было, как априори до начала вычислений в произвольном диапазоне параметров задавать параметры расчетов для того, чтобы процесс был заведомо обратимым.

Ну и действительно бросается в глаза ряд отпечаток в диссертации.

Но отмеченные недостатки не умаляют научной и практической значимости диссертационной работы, и поэтому общее заключение такое: предложенная к защите диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, и соискатель заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук.

### Председатель

Спасибо, Виктор Витальевич. Ярослав, вам слово для ответа на замечания.

### Лавриненко Я.

Касательно **первого замечания**, что в обзорной части недостаточно уделено внимание квантовым методам для неадиабатических процессов. Да, действительно, в обзорной части упоминается метод time dependent DFT, но, к сожалению, не приводится его подробное описание. Да, я считаю это достаточно сильным упущением и соглашаюсь с этим замечанием. Если сравнивать его с нашим методом, то ожидается, что он будет все-таки более вычислительно сложным.

**(Второе замечание)** Касательно утверждений о неправомерности использования вириального уравнения. Неправомерность использования вириального уравнения у нас связана не только с использованием отражающих граничных условий, а еще и с тем, что у нас в системе присутствуют не точечные частицы, а гауссовы волновые пакеты, которые имеют некоторую конечную и переменную ширину, и силы, возникающие в системе зависят не только от положения моделируемых частиц, но также и от динамики изменения их ширины. В целом, проблема расчета давления в методе динамики волновых пакетов была обсуждена в работе Su и Goddard. Если смотреть диссертацию, то это тридцать вторая ссылка, и там утверждается, что если мы собираемся использовать вириальное выражение для расчета давления, то нам стоит рассчитывать две конфигурации с учетом в вириале сил, связанных с динамикой ширины волнового пакета, и без их учета. Утверждается, что истинное значение давления будет находиться где-то между этими двумя параметрами. Поэтому в данной работе, так как у нас есть отражающий потенциал, то мы можем через него считать давление в явном виде.

**(Третье замечание).** Касательно описания подхода к построению изоэнтропы: у нас полагается, что обратимость процесса сжатия связана со сходимостью наблюдаемых результатов при уменьшении скорости этого сжатия. То есть мы предполагаем, что у нас скорость сжатия достаточно маленькая, чтобы процесс в конечном итоге был обратим на одном этапе сжатия. В целом проверка обратимости сжатия нами была выполнена. Эта обратимость наблюдается, но, к сожалению, в текст диссертации данный рисунок и данная проверка не вошла. В целом, если говорить о методологии выбора скорости сжатия, то она опирается на предварительные исследования сходимости наблюдаемых величин от

скорости сжатия, то есть на некоторые предварительные расчеты.

(**Четвертое замечание**). И касательно отпечаток, да, я согласен в тексте они присутствуют.

### **Председатель**

Спасибо. Отзыв второго оппонента Игнатова Александра Михайловича в письменном виде представлен, и Михаил Михайлович нас ознакомит.

### **Ученый секретарь**

Уважаемые коллеги, я хотел вас ознакомить с отзывом второго оппонента. Оппонентом у нас был Игнатов Александр Михайлович, доктор физ.-мат. наук, профессор, главный научный сотрудник теоретического отдела ИОФ РАН. Диссертация Лавриненко посвящена развитию применения метода численного автоматического моделирования неидеальной электрон-ионной плазмы. Работа объемом 127 страниц. Первая глава диссертации представляет собой обзор по экспериментальным и теоретическим исследованиям разогретого плотного вещества и неидеальной плазмы. Во второй главе диссертации описаны предлагаемый соискателем метод молекулярной динамики волновых пакетов с включением положения теории функционала плотности. Третья глава содержит техническую информацию, необходимую для программной реализации предлагаемого метода. Четвертая глава описывает результаты применения данного метода для моделирования водородной дейтериевой плазмы. Указано, что предложенный метод позволяет повысить точность представлением молекулярных соединений водорода в сравнении с исходным методом. Наконец, в пятой главе представлены результаты расчета изоэнтропы сжатия дейтерия и времени температурной электрон-ионной релаксации. Для построения изоэнтроп были использованы два метода, традиционный, связанный с решением уравнения Ферми-Зельдовича и новый, предложенный соискателем метод медленного сжатия. В заключение сформулированы основные результаты работы. В отзыве отмечается актуальность работы, которая обоснована необходимостью теоретического описания большого объема экспериментальных данных по исследованию свойств разогретого плотного вещества и неидеальной плазмы. Научная новизна представленной работы заключается в создании нового метода численного моделирования как объединение хорошо известных методов функционала теории плотности и динамики волновых пакетов. Отмечается, что предложенный метод обладает рядом уникальных особенностей, такие как высокая производительность, возможность моделирования совместной динамики электронов и ионов, повышение точности учета квантовых эффектов. Вместе с тем, несмотря на то, что диссертация написана ясным, грамотным русским языком в ней присутствует некоторое количество неточностей, отпечаток, как это типично для любой серьезной научно-квалифицированной работы. Итак, есть ряд замечаний:

- Во второй главе диссертационной работы подробно описывается метод ограничения ширины волновых пакетов путем задания отражающих граничных условий. Проводится подробный разбор эффектов, вносимых граничными условиями, и способов их устранения, но, к сожалению, не приводится никаких количественных данных по размеру приграничного слоя, минимально необходимому для получения статистически достоверных результатов, количеству частиц и другим параметрам. Было бы полезным предоставить эти данные и сформулировать критерии их получения.

- В текущей работе метод МДВП-ФП применялся только для моделирования водородоподобных атомов, но ничего не говорится об элементах с более сложной электронной структурой. Подразумевает ли это, что предложенный метод может быть использован только для моделирования водородной плазмы?

Отмеченные замечания не снижают общего положительного впечатления о работе Лавриненко Я.С. Предложенная к защите диссертация Лавриненко Я. представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013г., а ее автор Лавриненко Ярослав заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

Отзыв заверен ученым секретарем ИОФ РАН Глушковым.

### **Председатель**

Спасибо, Михаил Михайлович. Ярослав, пожалуйста, ответьте на замечания.

### **Лавриненко Я.**

Касательно **первого вопроса** о размере приграничного слоя, минимально необходимого количества частиц, и так далее: размеры приграничных слоев можно оценить из некоторых рисунков, представленных в работе, это рисунок 2.4 и 3.1. Он составляет порядка нескольких ангстрем для систем, состоящих из десятка ангстрем. Касательно количества частиц, необходимых для получения статистически достоверных результатов и критериев их получения, то здесь можно ориентироваться, во-первых, на наши исследования методом классической молекулярной динамики по сходимости наблюдаемых результатов от количества частиц или же проводить некоторые предварительные вычисления. В целом, ориентируясь на предыдущие наши результаты для систем, состоящих из 256 электронов, у нас расхождение с предельным значением энергии, которое может быть достигнуто при увеличении системы, составляет менее 2 процентов. Поэтому мы считаем, что систему из 256 электронов уже можно использовать для моделирования.

Касательно **второго замечания**, что в работе метод применялся только для моделирования водородоподобных атомов и есть ли возможность моделирования элементов с более сложной электронной структурой. Вопрос перекрывается с уже заданным здесь, и я повторю, что водородные атомы были выбраны нами для валидации нашего метода, на данный момент мы считаем гелий в процессе квазиэнтропического сжатия, а также опыт использования родственного нам метода electron force field для моделирования атомов с более сложной электронной структурой, говорит нам о том, что никаких особых препятствий для этого нет.

### **Председатель**

Спасибо. Уважаемые члены совета, у нас время пришло для дискуссии и, может быть, я бы предложил сначала онлайн присутствующим, если у них есть вопросы, дать им приоритет. Как, Ольга Александровна, у нас там есть желающие поучаствовать в дискуссии?

### **Панова О.А.**

Молчат.

### **Председатель**

Ну тогда давайте начнем дискусию здесь, среди присутствующих. Кто хотел бы высказаться?

### **Дячков Л.Г.**

Все очевидно, по-моему.



### **Председатель**

Вот как, ни снаружи, ни внутри. Но я поддерживаю сказанную с места точку зрения, что мне представляется работа действительно важной и интересной и вполне законченной для того, чтобы представлять из себя полноценную диссертацию на соискание степени кандидата наук. Поэтому, если вопросов и предложений нет, то мы можем переходить уже к заключительному слову соискателю. Пожалуйста.

### **Лавриненко Я.**

В заключительном слове я бы хотел выразить благодарность своему научному руководителю, в первую очередь, Морозову Игорю Владимировичу за ценные наставления и руководство в процессе написания как бакалаврской и магистерской работ, так и диссертационной. Также хотел бы выразить благодарность Стегайлову Владимиру Владимировичу и Норману Генри Эдгаровичу за ценные наставления в процессе обучения на соответствующей кафедре в Московском физико-техническом институте, а также за рекомендации по составлению презентаций и прочего. Также хотел бы выразить благодарность Валугеву Илье Александровичу за ценные советы по разработке метода и активное участие в его развитии, а также многим коллегам, на семинарах которых я присутствовал, на которых проводились продуктивные обсуждения получаемых результатов и высказывались критические замечания. Особая благодарность оппонентам Виктору Витальевичу и Александру Михайловичу за предоставленные отзывы и обсуждения данной работы.

### **Председатель**

Мы переходим к заключительной стадии работы совета по этому пункту – голосование. Предоставляем Михаилу Михайловичу собрать и обработать результаты, а также огласить решение совета. И прошу во время этой процедуры ознакомиться с заключением.

### **Ученый секретарь**

*(проводится процедура тайного голосования)*. Итак, коллеги, сегодня на заседании диссертационного совета присутствовал 21 человек, из них по специальности 11, очно присутствовало 10 человек, в зум-конференции 11 человек. Все члены совета проголосовали, все проголосовали "за". Это решение мы должны утвердить.

### **Председатель**

Прошу утвердить протокол голосования. *(Протокол счетной комиссии утвержден единогласно)*. Спасибо. Мы поздравляем Ярослава и желаем успехов.

### **Лавриненко Я.**

Спасибо.

### **Ученый секретарь**

Теперь соискателю просьба внимательно послушать замечания и рекомендации по проекту заключения Диссовета. *(Члены диссертационного совета обсуждают проект заключения)*. Если есть замечания и пожелания? Если нет, тогда предлагаю принять с указанными замечаниями за основу. *(Проект заключения принят единогласно)*.

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

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 лаборатории № 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 //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 nano-plasmas //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 завышенными 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 замечаниями:

- 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 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 распыливания 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<sup>-3</sup>, расчет ударной адиабаты дейтерия до давлений 350 ГПа и, на основе разработанного алгоритма для моделирования изоэнтروпического сжатия с использованием метода МДВП-ФП, рассчитана изоэнтропа сжатия дейтерия до плотностей 15 г/см<sup>3</sup>.

– 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.