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 06.12.2023г. № 16

О присуждении Парамонову Михаилу Анатольевичу, гражданину Российской Федерации ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Исследование термодинамических свойств плотной плазмы W, Mo и Zr методом квантовой молекулярной динамики» по специальности 1.3.9 – физика плазмы принята к защите 06.10.2023г., (протокол заседания № 8) 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 11.04.2012.

Соискатель Парамонов Михаил Анатольевич 1995 года рождения, в 2019 году окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)».

Работает в должности научного сотрудника лаборатории № 7.1 – моделирования свойств материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

В 2023 году окончил очную аспирантуру Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)».

Диссертация выполнена в лаборатории № 7.1 – моделирования свойств материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук.

Научный руководитель кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник лаборатории № 7.1 – моделирования свойств материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук Минаков Дмитрий Вячеславович.

Официальные оппоненты:

– доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой химической физики ФГАОУ ВО Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ» Губин Сергей Александрович;

– кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией высоких динамических давлений ФГБУН Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук Николаев Дмитрий Николаевич.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук в своем положительном заключении, составленном заместителем директора по науке ИФВД РАН, д.ф.-м.н. Рыжовым Валентином Николаевичем (утвержденном 26.10.2023 г. ученым секретарем совета ИФВД РАН к.ф.-м.н. Валянской Т.В.) указала, что научная значимость работы заключается, в первую очередь, в том, что полученные результаты для плотной плазмы W, Mo и Zr, охватывающие широкий диапазон параметров,

предоставляют возможность создания таблиц теплофизических свойств, которые могут быть использованы для анализа и интерпретации результатов экспериментов, а также для калибровки полуэмпирических уравнений состояния. А предложенный метод расчета параметров критической точки на основе квантового молекулярно-динамического моделирования также может быть применен для определения критических параметров различных веществ.

Результаты, полученные в диссертации, представляют существенную значимость для развития теплофизики, демонстрируя возможности квантового молекулярно-динамического моделирования термодинамических свойств веществ при высоких температурах и давлениях. Это позволяет осуществлять интерпретацию экспериментальных данных для плотной плазмы веществ, а в некоторых случаях полностью заменять эксперимент численным моделированием. Таким образом, современные подходы, основанные на функционале плотности, вносят существенный вклад в разработку широкодиапазонных моделей термодинамических свойств веществ, что убедительно продемонстрировано в диссертации.

Полученные в диссертационной работе новые результаты в области физики плазмы представляют несомненный интерес для специалистов в области науки о материалах и конденсированных средах. С полученными результатами целесообразно ознакомить следующие организации: ФИЦ ПХФ и МХ РАН, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ», АО «ГНЦ РФ – ФЭИ», РФЯЦ-ВНИИЭФ, РФЯЦ-ВНИИТФ им. Е.И. Забабахина, ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН и др.

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

1. *Minakov D.V., Paramonov M.A., Demyanov G.S., Fokin V.B., Levashov P.R.* Ab initio calculation of hafnium and zirconium melting curves via the Lindemann criterion // Physical Review B. 2022. Vol. 106, no. 21. P. 214105.

2. *Minakov D.V., Paramonov M.A., Levashov P.R.* Thermophysical properties of liquid molybdenum in the near-critical region using quantum molecular dynamics // Physical Review B. 2021. Vol. 103, no. 18. P. 184204.

3. *Minakov D. V., Paramonov M. A., Levashov P. R.* Consistent interpretation of experimental data for expanded liquid tungsten near the liquid-gas coexistence curve // Physical Review B. 2018. Vol. 97. P. 024205.

4. *Paramonov M.A., Minakov D.V., Fokin V.B., Knyazev D.V., Demyanov G.S., Levashov P.R.* Ab initio inspection of thermophysical experiments for zirconium near melting // Journal of Applied Physics. 2022. Vol. 132, no. 6. P. 065102.

5. *Minakov D.V., Paramonov M.A., Levashov P.R.* Ab initio inspection of thermophysical experiments for molybdenum near melting // AIP Advances. 2018. Vol. 8, no. 12. P. 125012.

6. *Paramonov M.A., Minakov D.V., Levashov P.R.* Reconstruction of release isentropes based on first-principle simulations // Journal of Physics: Conference Series. 2018. Vol. 946, no. 1. P. 012089.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. **Федеральное государственное унитарное предприятие Российский федеральный ядерный центр Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики (РФЯЦ–ВНИИЭФ)** (заместитель директора ИФВ, ученый секретарь РФЯЦ ВНИИЭФ, к.ф.-м.н. Бликов А.О.) – отзыв положительный, без замечаний.

2. **Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет (МФТИ)»** (профессор департамента молекулярной и биологической физики МФТИ, д.ф.-м.н. Ткаченко С.И.) – отзыв положительный, с замечаниями:

– В автореферате было бы полезно обсудить причины значительного разброса экспериментальных данных по изобарическому расширению для жидких тугоплавких металлов.

– В автореферате не приведены полные подписи к рис. 4, это затрудняет анализ приведенных данных и понимание того, наличествует ли асимптотика при увеличении количества атомов в суперячейке.

3. **Федеральное государственное унитарного предприятия «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики имени Н.Л. Духова» (ФГУП «ВНИИА»)** (ведущий научный сотрудник отдела математического моделирования, к.ф.-м.н. Жаховский В.В.) – отзыв положительный, с замечанием:

– Из текста автореферата остается неясен ответ на вопрос, возможно ли в ходе квантового молекулярно-динамического расчета достоверно определить, что моделируемое состояние является метастабильным, и, таким образом, обозначить границы метастабильной области на фазовой диаграмме.

– Почему точность рассчитанных критических параметров вольфрама примерно в 2 раза хуже, чем для молибдена и циркония?

4. **Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук (ИФВД РАН)** (научный сотрудник лаборатории фазовых переходов в сильно коррелированных и неупорядоченных системах ИФВД РАН, к.ф.-м.н., Данилов И.В.) отзыв положительный, без замечаний.

5. **Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН)»** (заведующий отделом, доцент, д.ф.-м.н. Стегайлов В.В; старший научный сотрудник, к.ф.-м.н. Саитов И.М.) отзыв положительный, без замечаний.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается:

– д.ф.-м.н., профессор Губин Сергей Александрович является ведущим ученым в областях термодинамического моделирования сложных химических систем и газодинамических расчетов ударных волн.

1. Губин С.А., Козлова С.А., Маклашова И.В. Получение изотермических характеристик, параметров уравнения состояния для PETN методами реакционной молекулярной динамики и термодинамики // Горение и взрыв. 2022. Т. 15. № 2. С. 117-124;

2. Bogdanova Y.A., Gubin S.A., Maklashova I.V. Calculation of thermodynamic properties of metals and their binary alloys by the perturbation theory // Metals. 2021. Vol. 11. № 10. P. 1548;

3. Губин С.А., Сверчков А.М., Сумской С.И. Моделирование генерации и распространения ударных волн и волн сжатия в пузырьковых средах // Горение и взрыв. 2021. Т. 14. № 1. С. 47-58.

– к.ф.-м.н., заведующий лабораторией Николаев Дмитрий Николаевич является ведущим ученым в области динамических ударно-волновых экспериментов.

1. Mochalova V.M., Utkin A.V., Nikolaev D.N. Shock response of unidirectional carbon polymer composite up to pressures of 200 GPa // Journal of Applied Physics, 2023. V. 133, no 24, P. 245902;

2. Ostrik A.V, Nikolaev D.N. Shock induced melting of sapphire // J. Phys.: Conf. Ser. 2022. Vol. 2154. №1., P. 012010;

3. Ostrik A.V., Bakulin V.N., Nikolaev D.N. The strength tests of thin walled composite shells under non-stationary loads of different physical nature // IOP Conf. Ser.: MSE, 2020. V. 927. № 1. P. 012068.

– Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук является профильной организацией, специализирующейся на изучении фундаментальных и прикладных аспектах физики сильно сжатого вещества, в том числе исследования структурных, упругих и электронных свойств твердого тела при высоких давления.

1. Фомин Ю.Д., Циок Е.Н., Бобков С.А., Рыжов В.Н. Молекулярное моделирование структуры воды в узких щелевых порах // Коллоидный журнал. 2023. Т. 85. № 4. С. 526-548;

2. Каракозов А.Е., Магницкая М.В. О фазовой диаграмме ферропниктидов // Поверхность. Рентген. синхротр. и нейтрон. исслед. 2022. № 4. С. 39-43;

3. Tsiok E.N., Fomin Yu.D., Gaiduk E.A., Tareyeva E.E., Ryzhov V.N., Libet P.A., Dmitryuk N.A., Kryuchkov N.P., Yurchenko S.O. The role of attraction in the phase diagrams and melting scenarios of generalized 2D Lennard-Jones systems // Journal of Chemical Physics. 2022. V. 256. P. 114703.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– Изучено влияние параметров моделирования на результаты и точность расчета термодинамических свойств W, Mo и Zr методом квантовой молекулярной динамики.

– Выполнена теоретическая интерпретация экспериментов по изоэнтропическому расширению ударно-сжатых сплошных и пористых образцов W и Mo методом квантовой молекулярной динамики.

– Выполнена теоретическая интерпретация экспериментов по изобарическому расширению для W, Mo и Zr методом квантовой молекулярной динамики.

– Построены температурные зависимости удельной энтальпии вдоль изобары нормального давления в окрестности точки плавления для W, Mo и Zr.

– Рассчитаны зависимости изохорной и изобарной теплоемкости, параметра Грюнайзена и скорости звука от температуры и плотности для плотной плазмы Mo и Zr на основе аппроксимаций данных квантовых молекулярно-динамических расчетов.

– Предложен метод оценки критических параметров и их погрешностей последовательным приближением сверхкритическими изотермами на основе результатов квантовых молекулярно-динамических расчетов.

– Получены оценки критических параметров для W, Mo и Zr на основе результатов расчетов методом квантовой молекулярной динамики.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что знание высокотемпературных теплофизических свойств материалов атомной энергетики и их уравнений состояния крайне необходимо для анализа ядерной безопасности и моделирования поведения атомных реакторов при критических воздействиях. Вольфрам, молибден и цирконий имеют большое значение из-за их уникальных свойств: высокой механической прочности, высокой температуры плавления, исключительной стойкости к нагреву и коррозии, а также хорошей электропроводности. Полученные новые данные помогут улучшить существующие определяющие соотношения для этих металлов, исключив неопределенность в их теплофизических свойствах при высоких температурах и давлениях. Результаты, изложенные в диссертации, могут быть использованы для фундаментальных исследований в области физики плазмы, с ними целесообразно ознакомить следующие организации: ФИЦ ПХФ и МХ РАН, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ», АО «ГНЦ РФ – ФЭИ», РФЯЦ-ВНИИЭФ, РФЯЦ-ВНИИТФ им. Е.И. Забабахина, ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН и др.

Оценка достоверности результатов. Степень достоверности полученных результатов является высокой, что подтверждается, с одной стороны, публикацией материалов диссертационной работы в научных журналах и сборниках конференций, которые входят в международную базу цитирования и приравнены к перечню ВАК, а с другой стороны, применением современных методов математического моделирования, основанных на принципах квантовой статистической физики и методе функционала

плотности. Результаты численного моделирования исследовались на сходимость и сравнивались с экспериментальными данными, в той области где имеются результаты измерений.

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 18 российских и международных конференциях. Основные публикации по выполненной работе также подготовлены при определяющем участии автора. В ходе защиты диссертации критических замечаний высказано не было.

Соискатель Парамонов Михаил Анатольевич ответил на задаваемые ему в ходе заседания вопросы, согласился с рядом технических замечаний и привел собственную аргументацию.

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 (ред. 07.06.2021 г.).

На заседании от 06.12.2023г. диссертационный совет постановил: за исследование научной задачи, имеющей большое значение для развития физики плазмы, присудить Парамонову Михаилу Анатольевичу ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

При проведении тайного голосования Диссертационный совет 24.1.193.01 (Д 002.110.02) в количестве 22 человек, из них очно: 7 докторов наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 6 докторов наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника,

дистанционно: 3 доктора наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 4 докторов наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника, участвовавших в заседании, из 31 человека, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за 22, против 0, недействительных бюллетеней - 0.

Председатель диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02)
академик РАН, д.ф.-м.н., профессор

Петров О.Ф.

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

Тимофеев А.В.

06.12.2023 г.