

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

СТЕНОГРАММА

заседания 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
(125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2)
от 6 декабря 2023 г. (протокол № 16)

Защита диссертации Парамонова Михаила Анатольевича
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
«Исследование термодинамических свойств плотной плазмы
W, Mo и Zr методом квантовой молекулярной динамики»
Специальность 1.3.9 – физика плазмы

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 № 16 от 6 декабря 2023 г.

Диссертационный совет 24.1.193.01 (Д 002.110.02) утвержден Приказом Министерства образования и науки РФ от 26.01.2022 г. № 86/нк в составе 31 человека. На заседании присутствуют 22 человека, из них 10 докторов наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 12 докторов наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника. Дополнительно введены на разовую защиту 0 человек. Кворум имеется.

Председатель – председатель диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02) д.ф.-м.н., профессор, академик РАН, Петров Олег Федорович

Ученый секретарь – ученый секретарь диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02) к.ф.-м.н. Тимофеев Алексей Владимирович

1.	Петров О.Ф.	академик РАН, д.ф.-м.н, проф.	1.3.9	Присутствует
2.	Андреев Н.Е.	д.ф.-м.н., проф.	1.3.9	Присутствует
3.	Храпак А.Г.	д.ф.-м.н., проф.	1.3.14	Присутствует
4.	Тимофеев А.В.	к.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	Подключен
7.	Баженова Т.В.	д.ф.-м.н., проф.	1.3.9	Отсутствует
8.	Вараксин А.Ю.	чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., проф.	1.3.14	Присутствует
9.	Васильев М.М.	д.ф.-м.н.	1.3.9	Присутствует
10.	Васильев М.Н.	д.т.н., проф.	1.3.14	Отсутствует
11.	Василяк Л.М.	д.ф.-м.н., проф.	1.3.9	Присутствует
12.	Воробьев В.С.	д.ф.-м.н., проф.	1.3.9	Отсутствует
13.	Гавриков А.В.	д.ф.-м.н., доцент	1.3.9	Отсутствует
14.	Голуб В.В.	д.ф.-м.н., проф.	1.3.14	Присутствует
15.	Грязнов В.К.	д.ф.-м.н.	1.3.14	Подключен
16.	Дьячков Л.Г.	д.ф.-м.н.	1.3.9	Присутствует
17.	Еремин А.В.	д.ф.-м.н., проф.	1.3.14	Присутствует
18.	Зейгарник Ю.А.	д.т.н., с.н.с.	1.3.14	Отсутствует
19.	Зеленер Б.Б.	д.ф.-м.н.	1.3.9	Присутствует
20.	Иосилевский И.Л.	д.ф.-м.н., проф.	1.3.9	Подключен
21.	Киверин А.Д.	д.ф.-м.н.	1.3.14	Присутствует
22.	Кириллин А.В.	д.ф.-м.н.	1.3.14	Отсутствует
23.	Лагарьков А.Н.	академик РАН, д.ф.-м.н., проф.	1.3.9	Отсутствует
24.	Левашов П.Р.	д.ф.-м.н.	1.3.14	Присутствует
25.	Ломоносов И.В.	чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н., проф.	1.3.14	Отсутствует
26.	Медин С.А.	д.т.н., проф.	1.3.14	Подключен

27.	Норман Г.Э.	д.ф.-м.н., проф.	1.3.9	Подключен
28.	Пикуз С.А.	к.ф.-м.н.	1.3.9	Подключен
29.	Савватимский А.И.	д.т.н.	1.3.14	Подключен
30.	Филиппов А.В.	д.ф.-м.н., проф.	1.3.9	Присутствует
31.	Яньков Г.Г.	д.т.н., с.н.с.	1.3.14	Подключен

ПОВЕСТКА ДНЯ

На повестке дня защита диссертации научного сотрудника лаборатории № 7.1 – моделирования свойств материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН) **Парамонова Михаила Анатольевича** на тему «Исследование термодинамических свойств плотной плазмы W, Mo и Zr методом квантовой молекулярной динамики». Диссертация впервые представлена на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы. Диссертация выполнена в лаборатории № 7.1 - моделирования свойств материалов ОИВТ РАН (125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, jiht.ru).

Научный руководитель:

Минаков Дмитрий Вячеславович – к.ф.-м.н., старший научный сотрудник лаборатории № 7.1 – моделирования свойств материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук, г. Москва.

Официальные оппоненты:

Губин Сергей Александрович – гражданин РФ, д.ф.-м.н., профессор, заведующий кафедрой Химической физики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» (МИФИ, Россия, 115409, г. Москва, Каширское шоссе, д. 31, тел.: +7 (495) 788 56 99, e-mail: sagubin@mephi.ru).

Николаев Дмитрий Николаевич – гражданин РФ, к.ф.-м.н., заведующий лабораторией Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук (ФИЦ ПХФ и МХ РАН; Россия, 142432, Московская область, г. Черноголовка, г.о. Черноголовка, Проспект академика Семенова, 1, тел: +7 (49652) 2-13-93, icp.ac.ru, e-mail: nik@fcp.ac.ru).

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук (142190, г. Москва, г. Троицк,

Калужское шоссе, стр. 14, +7(495)851-05-82, сайт: <http://www.hppi.troitsk.ru/>, e-mail: hpp@hppi.troitsk.ru)

На заседании присутствуют официальный оппонент к.ф.-м.н., заведующий лабораторией Николаев Д.Н., научный руководитель Парамонова М.А. к.ф.-м.н. Минаков Д.В.

СТЕНОГРАММА

Председатель

Представленная к защите диссертация, - это работа Парамонова Михаила Анатольевича на тему «Исследование термодинамических свойств плотной плазмы вольфрама, молибдена и циркония методом квантовой молекулярной динамики». Слово, Алексею Владимировичу, пожалуйста.

Ученый секретарь

(Информирует членов совета об особенностях работы в смешанном очно-дистанционном формате, зачитывает данные о соискателе по материалам личного дела и сообщает о соответствии представленных документов требованиям ВАК Министерства науки и высшего образования РФ.)

Председатель

Слово предоставляется Михаилу Анатольевичу Парамонову для изложения основных результатов своей работы. Пожалуйста.

Парамонов М.А.

Выступает с докладом по диссертационной работе (выступление не стенографируется, доклад Парамонова М.А. прилагается).

Председатель

Михаил Анатольевич, спасибо Вам. Мы можем перейти теперь к обсуждению результатов. Кто хотел бы задать вопрос?

Амиров Р.Х.

Олег Федорович, можно задать один вопрос?

Председатель

Да-да, пожалуйста.

Амиров Р.Х.

Я по последнему результату по теплоемкости. Вы можете дать физическую интерпретацию увеличения закона теплоемкости? Сначала увеличивалась, затем при высоких температурах намечается еще более быстрый рост. Какие физические процессы, собственно говоря? Какие степени свободы при этом задействуются? Ну и заодно объясните увеличение теплоемкости. Какая физика? Это ионизация или что это?

Парамонов М.А.

Так, смотрите, для теплоемкости, в принципе, при приближении к критической точке, к критическим значениям, у нас растет энтальпия. В принципе, там происходит увеличение энергии. Насчет ионизации я не уверен. По-моему, такого не видно. Для изохорной теплоемкости, есть мнение, что она должна стремиться к бесконечности в критической точке. Как видно, у нас такого не происходит. Есть различные мнения на этот счет. Пока что я затрудняюсь объяснить этот эффект, но, по крайней мере, у нас такого не отмечается.

Амиров Р.Х.

Все-таки непонятно, какие степени свободы задействуются? Для жидких металлов, это что, неизвестно при таких температурах? Что отвечает за теплоемкость? Какие степени свободы?

Парамонов М.А.

Вы знаете, я пока затрудняюсь ответить на этот вопрос, у нас не поднимались в принципе в работе такие вопросы, поэтому, к сожалению, пока не могу ответить.

Амиров Р.Х.

Спасибо, спасибо.

Председатель

Так, еще вопросы, пожалуйста. Михаил Михайлович, пожалуйста.

Васильев М.М.

У меня такой вопрос. Вы в самом начале своего доклада сказали, что КМД расчёты имеют ценность и полезны для расчётов, связанных со свойствами веществ, например, для атомных установок. И вы на трёх веществах показали хорошее совпадение ваших результатов расчёта с тем, что было известно до этого, с предыдущими расчетами и некоторыми экспериментами. Вопрос, к каким веществам теперь, и при каких условиях можно применить эти расчеты, к каким реальным веществам для того, чтобы вот эту актуальность и значимость подтвердить? То есть, где теперь есть потребность этих расчетов?

Парамонов М.А.

Да, спасибо большое за вопрос. Он, конечно, является актуальным. То есть, какая практическая значимость, и можно ли использовать для каких-то еще веществ. Конечно, такая процедура оценки экспериментов по изобарическому расширению, изоэнтальпическому расширению или по оценке критической точки может быть

использована для ряда веществ, для металлов сто процентов. В принципе, мы такую процедуру проводили и для железа, и для гафния, и для урана. Как эти результаты могут повлиять на практике? Если говорить про критическую область, такие параметры могут быть достигнуты в экспериментах по лазерному излучению, то есть, в принципе, они уже достижимы и при аварийном режиме работы атомных установок. Поэтому необходимо проводить такие исследования для ряда веществ, особенно для металлов.

Председатель

Хорошо, еще вопросы, пожалуйста. Пожалуйста, Лев Гаврилович.

Дьячков Л.Г.

У вас были приведены параметры критических точек по общему расчету с погрешностями. Я не являюсь специалистом в области, в которой вы занимаетесь, но я пропустил как определяется погрешность критических точек?

Парамонов М.А.

Да, я вам сейчас постараюсь подробно рассказать процедуру определения в том числе этих ошибок. Как я уже говорил для оценки ошибок критических параметров используется процедура Монте-Карло, то есть каждой расчетной точке, каждой точке на этом графике, присваивается нормальное распределение. Затем случайным образом выбираются точки вокруг этих рассчитанных значений. Для них производится полиномиальная подгонка и определение точки перегиба. Потом опять точки двигаются, случайным образом выбираясь. Опять подгонка, определение точки перегиба. И так две тысячи раз. После чего мы усредняем полученные значения этих точек по давлению, по плотности, по температуре и получаем погрешности для указанных параметров. Можно еще сказать, что, например, для вольфрама здесь (*указывает на график на слайде*) более пологая область по плотности, чем у других рассчитанных металлов. Поэтому здесь ошибка больше, чем для молибдена и циркония. Потому что, в принципе, плотность здесь выше для вольфрама, чем для молибдена и циркония.

Дьячков Л.Г.

Вот от чего зависит? Вы сказали, что вы выбираете какие-то распределения, от чего конкретно? Если на простом языке, например, от времени счета или от чего-то еще? От чего зависят эти погрешности в расчете?

Парамонов М.А.

В самом расчёте мы получаем усреднённое значение по давлению и энергии. Получаем при конкретных плотностях и температурах. Получаем такую сетку этих точек. А затем, случайным образом, согласно нормальному распределению, мы их просто двигаем. Вот как здесь показано на рисунке (*указывает на график на слайде*). Согласно нормальному распределению. И эти значения усредняем.

Дьячков Л.Г.

Понятно, но двигать можно разным образом. Можно отодвигать далеко, можно не очень. Вот как эти сдвиги выбираются?

Парамонов М.А.

Согласно нормальному распределению.

Дьячков Л.Г.

Здесь надо быть специалистом в этой области, чтобы лучше понять. Спасибо.

Парамонов М.А.

Пожалуйста. Спасибо Вам за вопрос.

Председатель

Еще вопросы, пожалуйста. У меня такой вопрос возник по основным положениям, выносимым на защиту. Первое положение звучит так: «Результаты описания экспериментов». Когда есть слово «описание», я как экспериментатор могу сразу сказать, какая тут ассоциация возникает: что вы излагаете в статье процедуру описания экспериментов, что делали, какие методы использовали, какая аппаратура была, и это все необходимо для того, чтобы объяснить читателю, что же вы такого необычного, интересного сделали. Здесь дальше, правда, идёт сочетание слов: «методом квантовой молекулярной динамики». Описывать эксперименты какими-то методами, ну, как-то немножко странно. Вот всё-таки, что за слово «описание»? Это интерпретация? И, если это интерпретация, тогда почему это слово здесь не появилось, а осталось вот это слово «описание»?

Парамонов М.А.

Да, спасибо за вопрос. Я вопрос понял. Чтобы не вдаваться в подробности, я даже смотрел некоторые работы, причем так получилось, что по гуманитарным наукам, для объяснения слова интерпретации. Под ним понимается несколько выражений, несколько понятий, в том числе и описание экспериментов, и возможность как-то их объяснить, как-то их описать, в том числе, и чтобы возможно было повторить. Поэтому здесь под интерпретацией понимается описание экспериментов и возможность объяснить с помощью расчетного метода. То есть, как-то дать объяснение почему они находятся в той области.

Председатель

Хорошо, еще вопросы, пожалуйста. Есть ли вопросы от тех, кто присутствует в режиме видеоконференцсвязи? Вопросов нет. Тогда мы перейдем к следующему пункту. Слово предоставляется научному руководителю, Дмитрию Вячеславовичу Минакову. Пожалуйста.

Ученый секретарь

Дмитрий Вячеславович, на трибуну, пожалуйста, чтобы вас хорошо видели дистанционные участники.

Минаков Д.В.

(выступление не стенографируется. Положительный отзыв содержится в аттестационном деле)

Председатель

Дмитрий Вячеславович, спасибо. Так, есть ли вопросы к Дмитрию Вячеславовичу? Вопросов нет. Спасибо. Алексей Владимирович, дальше. Вам слово.

Ученый секретарь

Дорогие коллеги, в деле имеется заключение организации, где выполнена диссертация – это объединенный институт высоких температур российской академии наук. Заключение положительное, рекомендуется к защите. Здесь подробно описана диссертация. Если позволите, я зачитывать не буду, так как мы уже внимательно ее прослушали. Рекомендуется к защите. Подписано заключение председателем семинара и директором института, Олегом Фёдоровичем Петровым, академиком РАН. Кроме того, в деле имеется заключение ведущей организации, института физики высоких давлений имени Верещагина. В заключении, опять же, подробно описывается диссертация и содержание, и некоторые плюсы, а также есть замечания. На замечаниях, если позволите, я остановлюсь поподробнее, пропустив части, которые мы уже завершили. Диссертационное исследование имеет следующие недостатки.

На рисунках 3.21, 3.22, 3.31 автор помимо сверхкритических изотерм изобразил несколько кривых для докритических температур. Однако возможность воспроизвести в расчете «петлю Ван-дер-Ваальса» и, таким образом, оценить границы метастабильной области и спинодали в дальнейшем не обсуждается.

Второе замечание. В диссертации много расчетов выполнено в окрестности плавления. Однако само равновесное плавление в работе не моделировалось, и температура плавления на основе КМД расчета не оценивалась. Между тем в недавно вышедших работах (здесь приводятся работы 20-ого и 17-ого года в PRB) было продемонстрировано, что выбор обменно-корреляционного функционала серьезным образом влияет на воспроизведение в расчете методом функционала плотности экспериментальной температуры плавления и может давать ошибку до 10%, в том числе используемый автором функционал GGA-PBE. В работе этот факт не упоминается, а также не приводится анализ того, как могут измениться некоторые полученные результаты, например, скачок энтальпии и объема при плавлении, если использовать не справочную температуру плавления, а полученную в рамках той же теоретической модели.

Отмеченные недостатки не являются принципиальными и не снижают значимости полученных результатов. Также здесь отмечено и про достоверность результатов и отмечено, что диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным пунктом 9 в положении о порядке присуждения ученых статей, а ее автор, Парамонов Михаил Анатольевич, заслуживает присвоение ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 - физика плазмы. Отзыв подписан главным научным сотрудником, доктором физ.-мат. наук, Валентином Николаевичем Рыжовым, заверен ученым секретарем и утвержден директором.

Кроме того, на автореферат получено 5 отзывов, некоторые из них с замечаниями. Если позволите, часть про описание диссертации, а также последнюю часть про соответствие положения порядка присуждения ученых степеней, я буду пропускать и сразу скажу, что все отзывы положительные, и эти части там присутствуют.

Первый отзыв на автореферат получен от кандидата физ.-мат. наук, научного сотрудника лаборатории фазовых переходом в сильно коррелированных и неупорядоченных системах, Игоря Владимировича Данилова. Это институт физики высоких давлений РАН. Отзыв положительный, без замечаний.

Второй отзыв получен от профессора департамента молекулярной и биологической физики МФТИ, доктора физ.-мат. наук, Светланы Ивановны Ткаченко. Отзыв положительный, с замечаниями.

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

Второе замечание В автореферате не приведены полные подписи к рисунку 4. Это затрудняет анализ приведенных данных и понимание того, наличествует ли асимптотика при увеличении количества атомов в суперъячейке.

Второй отзыв на автореферат был получен от Жаховского Василия Викторовича, кандидата физ.-мат. наук, ведущего научного сотрудника отдела математического моделирования ФГУП ВНИИА имени Духова. Отзыв положительный. Замечания есть.

Первое замечание. 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.

Второе замечание. Почему точность рассчитанных критических параметров вольфрама примерно в 2 раза хуже, чем для молибдена и циркония? Данные замечания не снижают положительные оценки, и все остальное тоже присутствует.

Следующий отзыв на автореферат получен от заместителя директора института экспериментальной физики РФЯЦ-ВНИИЭФ, кандидата физ.-мат. наук, Антона Олеговича Бликова. Отзыв положительный, без замечаний.

Следующий отзыв получен от доктора физ.-мат. наук, заведующего отделом №14 многомасштабного суперкомпьютерного моделирования ОИВТ РАН Стегайлова Владимира Владимировича и старшего научного сотрудника лаборатории № 14.1 теории неидеальной плазмы Сайтова Ильнура Миннигазыевича, кандидата физ.-мат. наук. Отзыв положительный, без замечаний.

Все отзывы положительные, и основные моменты по соответствию критериям положения присуждения ученых степеней там обозначены. На этом мы с отзывами закончили.

Председатель

Михаил Анатольевич, Вам слово для ответа на высказанные замечания.

Парамонов М.А.

Да, спасибо большое. Насчет первого вопроса от ведущей организации, по поводу возможности воспроизвести «петлю Ван-дер-Ваальса» и оценить границы метастабильной области и спинодали. Действительно, в работе воспроизвести это невозможно, потому что система должна оставаться в расчете однородной, а расчет докритических изотерм осложняется из-за появления пустот. К примеру, если рассмотреть левый график (*указывает на график на слайде*), здесь действительно рассчитаны докритические изотермы 10 500 и 10 800 К. И как можно видеть, ниже плотности 2.5 грамма на сантиметр в кубе расчетных точек нет. Мы их не учитываем в оценке критических параметров и в принципе подобные точки не берем в учет. Это связано с тем, что, как

можно видеть на правом графике (*указывает на график на слайде*), который получен для расчета, например, для 10 200 К по температуре и 3.5 грамма на сантиметр в кубе по плотности, примерно на трехсотом шаге система у нас остается однородной, это также еще заметно по внутренней энергии, но допустим по шагу 1500 можно видеть, что в нашей суперъячейке появляются пустоты и энергия тоже падает. Из-за этого, из-за такой неоднородности мы не можем учитывать такие точки, и, в принципе, мы их выкидываем. Поэтому ответ на вопрос – воспроизвести «петлю Ван-дер-Ваальса» довольно сложно и, скорее, даже невозможно. Потому что такие пустоты образуются случайным образом и в начале расчета или же в конце.

По поводу второго вопроса насчет отсутствия моделирования равновесного плавления и оценки температуры плавления. Действительно, в диссертационной работе не проводится такая оценка. Такой задачи не было. Мы считаем, что использование экспериментальной температуры плавления достаточно для дальнейших расчетов. В то же время, в указанных работах, здесь представлена работа 2017 года, приводится метод по оценке температуры плавления путем подбора потенциала для молекулярной динамики на основе обменно-корреляционного функционала и указано, что различные обменно-корреляционные функционалы дают отличающиеся на 10 % по температуре значения, отличающиеся от экспериментального. Вот здесь (*указывает на слайд*) представлены результаты из работы для меди. Однако в более ранней работе Белоношко проводятся подобные расчеты, конкретно для молибдена по другой методике, но температура плавления была получена схожая на экспериментальное значение. По просьбе ведущей организации мы сделали некоторую оценку, если взять, как у первой указанной статьи, и изменить температуру плавления на 10 %. Получаем, что скачок по энтальпии изменяется также примерно на 10 %. То есть, уменьшаем температуру на 10 %, а скачок по энтальпии увеличивается на 10 %. И примерно то же самое при увеличении температуры плавления. Скачок по энтальпии уменьшается на примерно те же 10 %.

Далее я хотел бы перейти к ответам на замечания Ткаченко Светланы Ивановны, которая написала отзыв на автореферат. Первое замечание по поводу причин значительного разброса экспериментальных данных по изобарическому расширению. Действительно, в работе, возможно, недостаточно было уделено внимания к этому вопросу, и хотел бы добавить, что разброс данных может быть связан со скоростью и сложностью происходящих физических явлений. Как мне кажется, в первую очередь это связано с наличием примесей в образцах, также влияют форма, метод подготовки экспериментального образца, различные неустойчивости. Поэтому, конечно, это надо учитывать. Возможно, в работе мало уделено этому внимания.

По поводу второго замечания. В автореферате не приведены полные подписи к рисунку 4. Действительно, это так. Вот здесь я представил график (*указывает на слайд*) из самой диссертации, на котором не указаны подписи насчет количества атомов, для которых проведено сравнение, вот на этом графике. Подписи были выведены вниз в диссертации, но в автореферате этих подписей не оказалось в связи с ограничением места в тексте. Поэтому здесь, возможно, в автореферате действительно не была заметна асимптотика при увеличении количества атомов, особенно при низких плотностях по давлению. Различные расчеты по различному количеству атомов сходятся.

Далее замечания Жаховского Василия Викторовича. Вопрос состоял в том, можно ли в ходе КМД-расчета достоверно определить, что моделируемое состояние является метастабильным? К сожалению, достоверно определить, что состояние является метастабильным, не представляется возможным из-за малого числа частиц и

ограниченного времени моделирования. Ну и ранее я уже говорил по поводу условия однородности системы и появления нежелательных пустот.

Второй вопрос: почему точность расчетных критических параметров вольфрама примерно в два раза хуже, чем для молибдена и циркония? В первую очередь это связано с тем, что методика оценки критических параметров для вольфрама применялась впервые, и далее для других веществ она только совершенствовалась.

И второй момент, о котором я уже говорил ранее, отвечая на вопросы из зала, было то, что у вольфрама есть некоторые особенности поведения критической изотермы. И вот полагая область в области критической точки, она шире, чем для молибдена и циркония, и в принципе, плотности у вольфрама больше.

Больше замечаний не было.

Председатель

Михаил Анатольевич, спасибо. Так, теперь слово предоставляется официальному оппоненту, доктору физ.-мат. наук, Сергею Александровичу Губину, в эфире. Пожалуйста.

Губин С.А.

(выступление не стенографируется, положительный отзыв официального оппонента Губина С.А. имеется в аттестационном деле)

Председатель

Сергей Александрович, спасибо вам за подготовленный отзыв. Слово предоставляется Михаилу Анатольевичу для ответа на замечания. Пожалуйста.

Парамонов М.А.

Сергей Александрович, спасибо большое за ваши весомые замечания. Я постараюсь сейчас на них ответить. Первый вопрос касался шага интегрирования в моделировании. Действительно, КМД позволяет выбирать шаг интегрирования больше, чем в молекулярной динамике. Это связано с тем, что система является сильно скоррелированной и гораздо быстрее выходит на равновесие. В окрестностях критической точки был выбран шаг в одну фемтосекунду для сходимости расчета. Для легких элементов необходимо выбирать шаг меньше. Поэтому мы считаем, что в диссертации выбран оптимальный шаг интегрирования.

Второй вопрос насчет важности и необходимости учета в расчетах КМД теплового возбуждения электронов. Вопрос необходимости учета теплового возбуждения электронов поднимался в работе Павла Ремировича Левашова в 2010 году, где он указал отличие давления и занижение теплоемкости при выходе за границу применимости псевдопотенциала из-за отсутствия возбуждения электронов кора. И я хотел бы продемонстрировать графики из этих работ. Здесь представлена зависимость изохорной теплоемкости и теплового давления электронов в зависимости от температуры электронов для вольфрама (*указывает на слайд*). И как можно видеть, полноэлектронный расчет - это сплошная линия, полностью совпадает с псевдопотенциальным подходом до температур примерно 3 электронвольта, что соответствует примерно 35 000 Кельвинов. Поэтому, я считаю, что, во-первых, во всех расчетах проводились предварительные расчеты, и мы находимся в границе применимости псевдопотенциалов. Это подтверждается еще и графиками из самой работы.

Следующий вопрос касался псевдопотенциалов и обменно-корреляционных функционалов. Точность КМД находится из сопоставления с полноэлектронными расчетами, которые не проводились. Здесь необходимо сказать, что псевдопотенциал строится таким образом, чтобы соответствовать полноэлектронным расчетам. Поэтому можно просто проводить сравнение с более точными псевдопотенциалами. Необходимо определять границы применимости, что было продемонстрировано для молибдена в работе 21 года. Вклад в псевдопотенциал в области применимости, однако, значительно меньше, чем вклад обменно-корреляционного функционала. И также полноэлектронным расчетом можно рассчитать только элементарные ячейки. Поэтому в работе было проведено достаточное сравнение с более точными псевдопотенциалами. Я привожу график из работы 21 года для молибдена (*указывает на слайд*). Здесь показана зависимость изохорной теплоемкости электронов от температуры электронов. И одинаковое поведение C_V при температурах меньше 1.2 электронвольт. И отличие всего 3 % и меньше при температуре вдвое больше.

Следующий вопрос по поводу особого значения знания параметров при фазовом переходе, таком как изменение кристаллической решетки, плавлении, испарение. Однако плавление металлов в работе не рассчитывалось. Действительно, я уже упоминал, что плавление в работе не исследовалось, однако фраза такая во введении имеется. Я считаю это некоторым упущением. Однако в работе приведен ряд важных и уникальных результатов, позволяющих значительно улучшить наше знание о фазовой диаграмме вольфрама, молибдена и циркония.

Пятое замечание. Ошибок и опечаток в диссертации мало, но они есть. Здесь указана некоторая ошибка. Действительно, она присутствует в работе. Вот здесь я пояснил, в чем она заключалась (*указывает на слайд*). Еще раз спасибо, Сергей Александрович, за замечания. Надеюсь, я смог полным образом ответить на них. На этом все.

Губин С.А.

Да, спасибо вам большое. Я удовлетворен, только я хотел отметить по второму замечанию, что я, конечно, понимаю, что необходимо учитывать электронное возбуждение. Но вопрос был не в том, что нужно учитывать, а в том, что у вас нет сравнений. Я просто считал, что можно было бы один график посвятить именно вопросу, который демонстрирует важность учета электронного возбуждения. А так, всё, спасибо, всё хорошо.

Председатель

Хорошо, спасибо, Сергей Александрович, за уточнение. Переходим к следующему отзыву официального оппонента, кандидата физ.-мат. наук, Дмитрия Николаевича Николаева. Пожалуйста, Дмитрий Николаевич.

Николаев Д.Н.

(выступление не стенографируется, положительный отзыв официального оппонента Николаева Д.Н. имеется в аттестационном деле)

Председатель

Дмитрий Николаевич, спасибо за отзыв. Слово предоставляется Михаилу Анатольевичу для ответа оппоненту. Пожалуйста.

Парамонов М.А.

Да, спасибо за приятные слова, Дмитрий Николаевич. Давайте я отвечу на ваши вопросы и замечания. Действительно, по поводу первого вопроса насчет плазмы, я, как Вы уже сказали, постарался в начале доклада сделать объяснение этому вопросу.

По второму вопросу, действительно, в диссертации нет объяснения этого термина. К-точки - это точки в зоне Бриллюэна, которые используются в расчетах электронной структуры для представления поведения электронов в кристаллической решетке. Отсутствие этого понятия является ошибкой.

Следующий вопрос по поводу значительного расхождения по температуре результатов описания ударно-волновых экспериментов методом КМД и с помощью уравнения состояния Ломоносова. Расхождение по температуре наблюдается в основном только для изоэнтроп разгрузки и может быть связано с тем, что управление состояния не калибровалось на экспериментальные температурные данные в этой области просто из-за отсутствия таких экспериментальных данных именно в этой области. Также, возможно, это связано с тем, что КМД предсказывает значительный рост изохорной теплоемкости при приближении к критической точке. И, возможно, это не учтено в уравнении состояния. Мне кажется, можно привести такое объяснение.

Следующий вопрос. Можно ли из КМД расчета получить кривую кипения и насколько ее положение будет отличаться от критической изобары? В работе, действительно, выполнить прямой расчет кривой испарения не представляется возможным, однако в работе 2018 года мы привели некоторую простую оценку кривой испарения для вольфрама в координатах давление - обратная температура с использованием экспериментальных данных, которые потом аппроксимировались в критическую точку, оцененную методом КМД.

И последнее замечание. Рецензент попросил пояснить причину возникновения загиба на кривых изоэнтропического расширения по уравнению состояния и для экспериментальных данных при, предположительно, переходе в двухфазную область жидкость-газ, а также дать объяснение отсутствия загиба на рассчитанных мной изоэнтропах. По поводу экспериментов. Скорее всего, загиб связан с возможным образованием струй, что подтверждается гидродинамическим моделированием. В уравнении состояния загибы определяются входом в двухфазную область и изменением скорости звука. У нас, как я уже говорил, есть некоторые трудности для получения расчетных точек в этой области. Поэтому мы просто аппроксимировали расчетную сетку в область низких давлений. Трудности, связанные с малым числом частиц и проблемами со сходимостью. Я надеюсь, Дмитрий Николаевич, что ответил на Ваши вопросы. Спасибо еще за замечания. Особенно хотел бы отметить Ваши комментарии по поводу экспериментальной методики и некоторых ошибок в моей работе. Спасибо.

Председатель

Спасибо, Михаил Анатольевич. Теперь мы переходим к дискуссии по материалам, представленным Михаилом Анатольевичем. Пожалуйста, кто хотел бы высказаться, сделать комментарии? Пожалуйста.

Иосилевский И.Л.

Олег Фёдорович, можно мне сказать?

Председатель

Да, Игорь Львович, пожалуйста.

Иосилевский И.Л.

Уважаемые коллеги, я знаю Михаила Парамонова достаточно давно, еще со времен, когда он как студент слушал лекции на нашей базовой кафедре, физики высоких плотностей энергий. И все эти годы на наших глазах диссертант рос, повышал свою квалификацию, повышал уровень получаемых результатов. И вот закономерный итог - это сегодняшняя диссертация. Я призываю высокое собрание поддержать эту работу и хочу отметить, на чем основан этот призыв. Во-первых, работа достаточно добротная по труду в неё вложенному. Используются очень современные и очень авторитетные методы, которые стремительно развиваются по своим возможностям и, подчеркну, по своим амбициям. И я хочу подчеркнуть, что диссертант все эти годы не в пустоте рос, а образно выражаясь, на плечах, не буду говорить «гигантов» - своих опытных коллег и руководителей, во главе с Павлом Ремировичем Левашовым. Поэтому, этот труд в значительной мере отражает уровень всех работ этого коллектива. Одним из достоинств этой работы, которое даёт мне возможность призывать вас её поддержать, является то, что автор представил результаты совпадения достаточно хорошего результата первопринципного расчёта с экспериментами, проведенными в нашем же институте, в группе Михаила Александровича Шейндлина. И это, мне кажется, очень весомо. Одним из достоинств или, я бы сказал, подтверждений уровня этой самой работы является то, я обращаю ваше внимание, я думаю, вы сами заметили, что большинство результатов опубликовано в очень авторитетных журналах, что является таким ярлыком признания их уровня. Вместе с тем, эта работа не столько подчеркивают недостатки работы, сколько ставит некий общий нам всем вопрос. Вот дело в том, красиво выражаясь, что мы живем все вместе с вами в эпоху смены парадигмы. Что означают эти красивые слова? Это понятно на примере сравнения результатов расчетов для вольфрама. В течение долгого времени мы жили в системе координат, когда было противостояние эксперимента и аналитической теории. Сейчас появляется третий участник, который стремительно набирает силу и стремительно набирает амбиции, и, вообще говоря, претендует, я думаю, вы согласитесь со мной, претендует на роль тоже эксперимента, но численного. И получается у нас уже теперь мир, который состоит из трех составляющих в разные стороны: аналитическая теория, эксперимент традиционный и эксперимент численный. И со всей остротой встает вопрос, когда эти результаты хорошо совпадают, то это большой плюс и теории, которые их предсказывала, и первопринципным расчетам, которые их подтверждают. Но когда они расходятся, что было видно в замечаниях, например, расхождение с результатами широкодиапазонного полуэмпирического уравнения состояния по температуре на изоэнтропах расширения, потому что полуэмпирическое уравнение состояния - это не просто интерполяция, это интерполяция, опирающаяся на всю совокупность экспериментальных данных. Это своего рода экспериментальные данные. А вот особенно это отчетливо видно на сравнении результатов диссертанта для вольфрама. Вы заметили, там чрезвычайно широкое, я бы сказал, скандальное расхождение разных экспериментальных данных по наклону кривых, и среди них проходит кривая, полученная диссертантом и его коллегами. И перед нами всеми стоит вопрос. Что? Да, и эта проблема большая, давняя, и для многих металлов, я напому, прежде всего про уран, у которого ситуация еще более одиозная, и вопрос возникает. Что, после этих расчетов можно считать проблему закрытой? Те, кто совпал с первопринципными расчетами, могут радоваться? А те, кто не совпал, увы, пусть идут работают и улучшают свою методику. И этот вопрос открыт. На самом деле ответа на него нет. И последние только два, пожалуй,

замечания, которые скорее являются пожеланием для дальнейшего развития, и в работе это было видно - есть два места, которые очень просят более подробного исследования. Первое. Это зависимость. Ведь, смотрите, эти методы *ab initio*, они подчеркивают, что они не используют никакой эмпирической информации и, вообще говоря, претендуют на то, что они такой верховный судья. На самом деле есть два источника неопределенности в этих расчетах - они прозвучали, и они, конечно, вызывают у нас желание узнать это гораздо подробнее. Первое - это зависимость полученных результатов от произвола или, точнее, неопределенности в выборе псевдопотенциала, ведь это же не совсем из первого принципа. Нет, в этом методе не считаются системы ядер и электронов, а считаются ионы с кором и псевдопотенциалом. И второе, еще более болезненное - это насколько неопределёнными являются результаты, полученные не только в диссертации, а вообще во всём этом направлении, от произвола в выборе обменно- корреляционного функционала. И по этим обоим пунктам нам бы хотелось узнать больше результатов исследований. И я думаю, что и диссертант, и его коллеги, и товарищи именно на это обратят внимание в дальнейшей работе. Ну, пожалуй, этого достаточно. Еще раз я призываю высокое собрание поддержать эту работу и диссертанта. Спасибо за внимание.

Председатель

Игорь Львович, спасибо Вам за очень такое обширное и красочное описание и комментарии, спасибо. Я хотел бы один сделать комментарий Игорю Львовичу. Слово «гиганты» или «не гиганты» – это действительно такой вопрос вкусовой, но есть другое слово – «классик». И сегодня мы как раз с вами обсуждаем классическую работу. Пожалуйста, Павел Ремирович.

Левашов П.Р.

Дорогие коллеги, я бы хотел усилить впечатление о работе и сказать, что эта работа без ложной скромности мирового уровня. Такие расчеты в мире никто не проводит. Здесь у ИВТАНа есть приоритет. Я вас уверяю, что на все эти работы будут ссылаться в будущем те, кто будет работать в этой области. Это действительно первый расчет такого рода. А второе, что я хотел бы сказать, это по духу очень ИВТАНовская работа, потому что эта область в ИВТАНе традиционная. Я несколько имен хотел бы назвать, кто в этой области работал, начиная там от Владимира Евгеньевича Фортова, Александра Айзиковича Ликальтера, Александра Львовича Хомкина, Владимира Сергеевича Воробьева, Игоря Владимировича Ломоносова, о котором здесь упоминалось. Это только те, кто занимался теорией. Есть еще очень большое количество теоретиков, включая тех, кто делал систему ИВТАНТЕРМО, на нее сегодня ссылались. Я упомяну обязательно Александра Ивановича Саватимского, Владимира Николаевича Коробенко, Михаила Александровича Шейндлина и Анатолия Дмитриевича Рахеля из тех, кто делает импульсные эксперименты, например. Все эти работы использовались диссертантом, на них есть ссылки и это действительно серьезный шаг вперед в этой области, потому что использованы методы, не привлекающие эксперименты. Поэтому я призываю всех голосовать за эту работу и сам ее очень поддерживаю. Спасибо.

Председатель

Спасибо, Павел Ремирович. Хотел бы еще кто-то высказаться? Пожалуйста. В том числе в режиме видеоконференцсвязи. В принципе, все было достаточно полно рассмотрено, а в обсуждении, по-моему, всё однозначно сформулировано, и выводы тоже однозначны.

Поэтому мы можем перейти к заключительному слову соискателя, потом голосованию. Пожалуйста, Михаил Антонович, вам слово.

Парамонов М.А.

Да, спасибо. Я хотел бы, наверное, сначала ответить на комментарии и замечания Игоря Львовича Иосилевского по поводу того, что же нам выбрать: теорию, эксперимент или численный эксперимент - расчет. Я думаю, вместо того, чтобы выбирать одну, так скажем, координатную ось, лучше работать сразу в трех: и в теории, и в эксперименте, и в численном эксперименте. А там, может быть, подойдет и четвертая ось по аналогии со временем. Поэтому лучше не выбирать, а пользоваться всеми способами и методами совместно, в кооперации. Далее, хотел бы поблагодарить в первую очередь, конечно, научного руководителя Дмитрия Вячеславовича и Павла Ремировича, под чутким надзором которых эта работа была, в принципе, сделана, диссертация многократно проверена и обсуждена. Хотел бы сказать большую благодарность и остальным своим коллегам по лаборатории. Кто-то косвенно, а кто-то напрямую повлиял на нее. Помогали многие мне с оформлением документов, что оказалось самым тяжелым при подготовке. Спасибо большое и оппонентам, Сергею Александровичу, по поводу его замечаний, Дмитрию Николаевичу по поводу комментариев насчет экспериментальных данных, и что сегодня присутствует здесь на защите. Далее, благодарность самому диссертационному совету. Во время подачи документов пришло очень много замечаний от диссертационного совета. Над некоторыми пришлось даже подумать некоторое время. Спасибо вам огромное. Далее спасибо рецензентам на авторитет, особенно людям, которые неожиданно прислали свои отзывы. И спасибо нашей кафедре.

Председатель

Спасибо, Михаил Анатольевич. Кафедру вспомнили – тоже хорошо, с нее все и начиналось, по крайней мере ваша здесь активная деятельность в институте. Спасибо. Мы сейчас переходим к голосованию. Я хочу передать микрофон Алексею Владимировичу для комментариев.

Ученый секретарь

Дорогие коллеги, наше заседание проводится в комбинированном очно-дистанционном режиме, поэтому голосование проводится с использованием телекоммуникационных систем, то есть на сайте нашего института. Таким образом прошу всех присутствующих членов диссертационного совета войти под своим логином и паролем на сайт ОИВТ РАН и в разделе диссовет проголосовать по вопросу утверждения диссертации. Если у вас с собой нет устройства, можно воспользоваться комплектом диссертационного совета, который стоит на трибуне.

(Проводится процедура голосования)

Председатель

Уважаемые коллеги, голосование завершилось! Алексей Владимирович объявит его результаты.

Ученый секретарь

Дорогие коллеги, всего присутствовало на заседании 22 члена диссертационного совета, в том числе докторов наук по профилю рассматриваемой диссертации - 10. Очно присутствовало 14 членов диссертационного совета, в том числе докторов наук по профилю рассматриваемой диссертации - 7. Дистанционно присутствовало 8 членов диссертационного совета, в том числе докторов наук по профилю рассматриваемой диссертации - 3. Всего получено 22 голоса, 22 «за», «против» - 0 и «недействительно» - 0.

Председатель

Уважаемые коллеги, нужно утвердить протокол голосования. Открыто голосование. Кто «за»? Прошу поднять руки. Так, спасибо. Есть ли «против»? Воздержавшиеся? В видеоконференцсвязи? Спасибо, теперь можно поздравить Михаила Анатольевича.

(Протокол счетной комиссии утвержден единогласно)

Теперь переходим к проекту заключения. Кто хотел бы высказаться по этому вопросу? Замечания, рекомендации по проекту заключения? Пожалуйста.

(Члены диссертационного совета обсуждают проект заключения)

Если замечаний нет, то можем принять подготовленный проект заключения. Есть? К микрофону, Лев Гаврилович.

Дьячков Л.Г.

Есть одна маленькая неточность. Не хватает одной точки. В разделе теоретической значимости исследования в конце первого предложения не хватает точки. Больше никаких замечаний нет.

Председатель

Хорошо, с учетом этого замечания, есть ли ещё другие замечания по проекту заключения? Если нет, то мы должны его утвердить. Прошу голосовать. Так, кто «за»? Есть ли «против»? Воздержавшиеся? Все, спасибо.

(Проект заключения принят единогласно)

На этом завершаем защиту.

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

3. Ostriuk 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 давлениях.

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», РЯЦ-ВНИИЭФ, РЯЦ-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.