

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 27.05.2026г. № 3

О присуждении Демьянову Георгию Сергеевичу, гражданину
Российской Федерации ученой степени кандидата физико-математических
наук.

Диссертация «Эффективный учет дальнего действия в
моделировании классических и квантовых кулоновских систем с помощью
усредненного по углам потенциала Эвальда» по специальности 1.3.9 –
физика плазмы принята к защите 18.03.2026г., (протокол заседания № 2)
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.

Соискатель Демьянов Георгий Сергеевич 1998 года рождения, в 2022
году окончил Федеральное государственное автономное образовательное
учреждение высшего образования «Московский физико-технический
институт (национальный исследовательский университет)».

Работает в должности младшего научного сотрудника лаборатории №
7.1 – моделирования свойств материалов Теоретического отдела № 7 им.
Л.М. Бибермана Федерального государственного бюджетного учреждения
науки Объединенного института высоких температур Российской академии
наук.

Диссертация выполнена в лаборатории № 7.1 Теоретического отдела № 7 им. Л.М. Бибермана – моделирования свойств материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

Научный руководитель доктор физико-математических наук, заведующий лабораторией № 7.1 Теоретического отдела № 7 им. Л.М. Бибермана Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Объединенный институт высоких температур Российской академии наук» Левашов Павел Ремирович.

Официальные оппоненты:

- доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник сектора теоретической астрофизики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук Потехин Александр Юрьевич;

- доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник сектора плазмы и лазеров Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук Петров Юрий Васильевич

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук» (г. Москва) в своем положительном заключении, составленном ведущими научными сотрудниками ИПМ им. М.В. Келдыша РАН д.ф.-м.н. Веденяпиным В.В., д.ф.-м.н. Сакбаевым В.Ж. и научным сотрудником к.ф.-м.н. Вичевым И.Ю. (утвержденном 23.04.2026 г. директором членом-корреспондентом РАН М.В. Якобовским), указала, что диссертация представляет собой законченное научное исследование на актуальную тему, содержит новые важные результаты, которые могут применяться для решения различных теоретических и прикладных задач физики плазмы. Отдельно отмечена

полученная в работе матрица плотности с учетом дальнего действия, которая позволяет учесть дальнедействующие взаимодействия квантовой двухкомпонентной системы.

Результаты работы могут быть использованы в научных и научно-образовательных центрах, а также в организациях, занимающихся моделированием неидеальной плазмы, кулоновских систем и экстремальных состояний вещества, в частности, в ФИЦ ПХФ и МХ РАН, ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ», АО «ГНЦ РФ – ФЭИ», РФЯЦ-ВНИИЭФ, РФЯЦ-ВНИИТФ им. Е.И. Забабахина, ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, ОИВТ РАН и МФТИ.

Соискатель имеет 20 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 9 работ в рецензируемых научных изданиях:

1. Demyanov G. S., Levashov P. R. Systematic derivation of angular-averaged Ewald potential // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. — 2022. — Т. 55, № 38. — С. 385202.
2. Demyanov G. S., Levashov P. R. One-component plasma of a million particles via angular-averaged Ewald potential: A Monte Carlo study // *Physical Review E*. — 2022. — Т. 106, № 1. — С. 015204.
3. Demyanov G. S., Levashov P. R. Accounting for long-range interaction in the Kelbg pseudopotential // *Contributions to Plasma Physics*. — 2022. — Т. 62, № 10. — e202200100.
4. Demyanov G. S., Onegin A. S., Levashov P. R. N-convergence in one-component plasma: Comparison of Coulomb, Ewald, and angular-averaged Ewald potentials // *Contributions to Plasma Physics*. — 2024. — Т. 64, № 6. — e202300164.
5. Onegin A. S., Demyanov G. S., Levashov P. R. Pressure of Coulomb systems with volume-dependent long-range potentials // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. — 2024. — Т. 57, № 20. — С. 205002.
6. Demyanov G. S., Levashov P. R. KelbgLIP: Program implementation of the high-temperature Kelbg density matrix for path integral and molecular dynamics

simulations with long-range Coulomb interaction // Computer Physics Communications. — 2024. — Т. 305. — С. 109326.

7. Demyanov G. S., Onegin A. S., Levashov P. R. Reply to Comment on ‘Pressure of Coulomb systems with volume-dependent long-range potentials’ // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. — 2025. — Т. 58, № 8. — С. 088002.

8. Demyanov G. S., Onegin A. S., Levashov P. R. Comment on “A random batch Ewald method for charged particles in the isothermal–isobaric ensemble” [J. Chem. Phys. 157, 144102 (2022)] // The Journal of Chemical Physics. — 2025. — Т. 162, № 17. — С. 177101.

9. Demyanov G. S., Levashov P. R. Molecular dynamics of nondegenerate hydrogen plasma using improved Kelbg pseudopotential with electron thermal de Broglie wavelength correction // Physics of Plasmas. — 2025. — Т. 32, №12. — С. 123901.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. **Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Казанский (Приволжский) федеральный университет»** (доцент кафедры вычислительной физики и моделирования физических процессов к.т.н. Файрушин И. И.) - отзыв положительный, с замечаниями:

- Может ли УУПЭ быть использован для получения траекторий частиц (ионов) жидкой ОКП методом МД с последующим корректным расчетом динамического структурного фактора?

2. **Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт космических исследований Российской академии наук** (старший научный сотрудник к.ф.-м.н. Думин Ю.В.) - отзыв положительный, с замечаниями:

- В автореферате широко используются различные аббревиатуры, при этом некоторые из них расшифровываются при первом употреблении (например, МК – метод Монте-Карло), а другие – нет (например, МД – молекулярная

динамика). В то же время далеко не очевидно, что термин “молекулярная динамика” хорошо известен каждому специалисту по физике плазмы. То же самое относится и к употреблению диссертантом своеобразного научного жаргона. Например, на протяжении всего автореферата многократно используется фраза “учёт дальнего действия”, но при этом её точный смысл не всегда достаточно понятен (так как, в принципе, все рассматриваемые в работе системы являются дальнедействующими).

- Включённые в автореферат рисунки, в принципе, очень хорошо иллюстрируют основные положения работы; однако оформление рисунков не всегда является достаточно аккуратным. В ряде случаев отсутствуют необходимые пояснения к обозначениям (например, на Рис. 10 и 11 не мешало бы пояснить, что такое r_s и r_a). По-видимому, это связано с тем, что при переносе из диссертации в автореферат были потеряны некоторые необходимые комментарии.

3. Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)» (старший преподаватель, заместитель заведующего кафедрой теоретической физики им. Ландау к.ф.-м.н. Черноусов И. В.) - отзыв положительный, с замечаниями:

- В работе используется метод квазиклассической молекулярной динамики для описания водородной плазмы. При этом в моделировании явно участвуют электроны, квантовая природа которых проявляется несмотря на малое вырождение. Стоит отметить, что даже в этом случае динамика системы не соответствует реальной динамике квантовой системы, описываемой оператором эволюции. Таким образом, этот метод не позволит получать истинные квантовые динамические свойства системы (например, динамический структурный фактор).

- В работе представлен улучшенный псевдопотенциал Кельбга с учетом дальнего действия. Однако в его выводе присутствует некоторое приближение,

поскольку улучшенный псевдопотенциал Кельбга был получен из расчета матрицы плотности при конечной температуре, тогда как дополнительный вклад, отвечающий за дальное действие, берется из высокотемпературного решения.

4. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук (старший научный сотрудник сектора теоретической астрофизики к.ф.-м.н. Чугунов А.И.) - отзыв положительный, с замечаниями:
- В качестве замечания, носящего скорее характер пожелания на будущее, могу отметить, что сходимость расчетов с использованием усредненного по углам потенциала Эвальда к термодинамическому пределу можно было бы исследовать более детально, уделив еще большее внимание сравнению со сходимостью при расчете методом Эвальда. В частности, было бы интересно понять, насколько меньшее отклонение рассчитанного значения энергии от термодинамического предела будет достигаться при использовании усредненного потенциала Эвальда, по сравнению с расчетом по методу Эвальда при том же расчетном времени и разном, но большем, N . Отмечу также, что для оценки зависимости энергии ОКП от числа частиц я бы использовал скорее разложение в ряд по $(1/N)$, чем примененную в диссертации аппроксимацию $\sim(1/N)^{\gamma}$, но это замечание носит дискуссионный характер и требует проверки.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается:

- д.ф.-м.н. Потехин Александр Юрьевич является признанным специалистом в области физики плотной и неидеальной плазмы, кулоновских систем, физики нейтронных звезд и астрофизики. Опыт научной работы Потехина А.Ю. в области физики плотной и неидеальной плазмы, кулоновских систем, уравнений состояния и астрофизических приложений позволяет ему объективно и критично оценивать научную новизну и

обоснованность представленных результатов. Потехин А.Ю. ранее успешно выступал в роли официального оппонента по смежным научным проблемам и обладает глубоким пониманием специфики теоретических и численных методов, применяемых при исследовании кулоновских систем. Его независимость и высокий авторитет в научном сообществе обеспечивают объективную и справедливую оценку диссертационной работы.

1. Potekhin A. Y., Yakovlev D. G. Urca cooling of the neutron star in the Cassiopeia A supernova remnant //Journal of High Energy Astrophysics. – 2025. – С. 100441.

2. Potekhin A. Y., Gusakov M. E., Chugunov A. I. Thermal evolution of neutron stars in soft X-ray transients with thermodynamically consistent models of the accreted crust //Monthly Notices of the Royal Astronomical Society. – 2023. – Т. 522. – №. 4. – С. 4830-4840.

3. Potekhin A. Y., Chugunov A. I., Shchepochin N. N., Gusakov M. E. Cooling of neutron stars in soft X-ray transients with realistic crust composition //Journal of High Energy Astrophysics. – 2025. – Т. 45. – С. 116-124.

- д.ф.-м.н. Петров Юрий Васильевич является признанным специалистом в области физики экстремальных состояний вещества, неидеальной плазмы, уравнений состояния, физики высоких плотностей энергии и процессов взаимодействия ультракоротких лазерных импульсов с веществом. Опыт научной работы Петрова Ю.В. в области уравнений состояния, неидеальной водородной плазмы, физики конденсированного состояния и численного моделирования сильнонеравновесных систем позволяет ему объективно и критично оценивать научную новизну и обоснованность представленных результатов. Петров Ю.В. ранее успешно выступал в роли официального оппонента по смежным научным проблемам и обладает глубоким пониманием специфики теоретических и численных методов, применяемых при исследовании плазменных и кулоновских систем. Его участие как оппонента способствует всесторонней и критической оценке представленной диссертации.

1. Петров Ю. В., Ромашевский С.А., Дышлюк А.В., Хохлов В.А., Еганова Е.М., Поляков М.В., Евлашин С.А., Ашитков С.И., Витрик О.Б., Иногамов Н.А. Аномальное пропускание света оптически толстыми пленками никеля, являющимися оптоакустическими трансдьюсерами //Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2025. – Т. 167. – №. 5. – С. 645-671.
2. Дышлюк А. В., Ромашевский С. А., Петров Ю. В., Хохлов В. А., Витрик О. Б., Иногамов Н. А. Моделирование бриллюэновских осцилляций, порожденных метаматериалом на основе наноструктурированной пленки никеля // Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2026. – Т. 123. – № 3. – С. 177–186.
3. Неласов И. В., Манохин С. С., Колобов Ю. Р., Жаховский В. В., Перов Е. А., Петров Ю. В., Хомич Ю. В., Малинский Т. В., Иногамов Н. А., Рогалин В. Е. Эволюция микроструктуры приповерхностного слоя меди при термоциклировании лазерными импульсами наносекундной длительности // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2025. – Т. 167. – № 6. – С. 782–797.

- Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук» является ведущей научной организацией в области математического моделирования сложных физических систем, включая плазменные и кулоновские системы. Тематика работ сотрудников организации охватывает кинетические модели, задачи математической физики, численные методы и моделирование плазменных процессов, а также проведение расчетов различных свойств сильно взаимодействующих кулоновских систем. Высокая научная репутация организации и опыт проведения исследований по смежным задачам обеспечивают квалифицированную и критическую оценку диссертационной работы.

1. Теплухин А. В. Расчет термодинамических и структурных характеристик

жидких углеводородов методом Монте-Карло //Журнал структурной химии. – 2021. – Т. 62. – №. 1. – С. 73-85.

2. Орлов Ю. Н., Сакбаев В. Ж. Формулы Фейнмана–Каца для решений нестационарно возмущенных эволюционных уравнений //Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2025. – Т. 65. – №. 1. – С. 69-87.

3. Ovechkin A. A., Loboda P. A., Korolev A. S., Kolchugin S. V., Vichev I. Yu., Solomyannaya A. D., Kim D. A., Grushin A. S. Ionization balance of non-LTE plasmas from an average-atom collisional-radiative model //Matter and Radiation at Extremes. – 2022. – Т. 7. – №. 6.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– Разработан и аналитически обоснован усредненный по углам потенциал Эвальда для одно- и двухкомпонентных кулоновских систем, позволяющий эффективно учитывать дальнодействующие взаимодействия при периодических граничных условиях;

– Получены выражения для потенциальной энергии и давления кулоновских систем с учетом дальнодействия, включая поправки к вириальному давлению для потенциалов, зависящих от объема, что обеспечивает термодинамическую согласованность расчетов;

– Проведено моделирование однокомпонентной плазмы методом Монте-Карло с числом частиц до одного миллиона и построено уравнение состояния ОКП в широком диапазоне параметра неидеальности;

– Получена высокотемпературная кулоновская матрица плотности и обобщенный псевдопотенциал Кельбга с учетом дальнодействия, реализованные в программном комплексе KelbgLIP; проведено моделирование невырожденной водородной плазмы, рассчитаны ее радиальные функции распределения, степень ионизации, состав, энергия, давление и табличное уравнение состояния, а также предложено решение проблемы нефизической кластеризации при низких температурах.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

– В работе последовательно построен математически обоснованный и эффективный подход к учету дальнедействующего кулоновского взаимодействия в классических и квантовых системах, получены новые аналитические выражения для энергии, давления, матрицы плотности и псевдопотенциала;

– Исследовано влияние дальнедействия на сходимость термодинамических характеристик к термодинамическому пределу, а также показана возможность эффективного использования усредненного по углам потенциала Эвальда в крупномасштабном численном моделировании кулоновских систем.

– Развито квантово-статистическое описание невырожденной водородной плазмы с учетом кулоновского дальнедействия: получены термодинамические и структурные характеристики, включая уравнение состояния, радиальные функции распределения, степень ионизации и состав плазмы, а также предложен способ устранения нефизической кластеризации при моделировании с улучшенным псевдопотенциалом Кельбга.

Значение полученных соискателем результатов **исследования для практики** подтверждается тем, что:

– Разработанный подход на основе УУПЭ повышает вычислительную эффективность моделирования кулоновских систем и позволяет проводить расчеты с существенно большим числом частиц;

– Полученные данные для однокомпонентной плазмы и невырожденной водородной плазмы могут использоваться при построении и уточнении уравнений состояния в термодинамическом пределе;

– Выведенные выражения для матрицы плотности, псевдопотенциала Кельбга, энергии и давления с учетом дальнедействия могут быть применены в квантово-статистическом моделировании плазмы;

– Реализованный программный комплекс KelbgLIP может использоваться и развиваться для расчетов методом Монте-Карло с интегралами по траекториям и методом молекулярной динамики;

– Предложенный способ учета конечного значения тепловой длины волны де Бройля электронов расширяет возможности квазиклассического моделирования невырожденной водородной плазмы при низких температурах.

Результаты работы могут быть использованы при построении и уточнении широкодиапазонных моделей плазмы, интерпретации расчетных и экспериментальных данных, моделировании неидеальных кулоновских систем и разработке специализированных вычислительных комплексов для классического и квантово-статистического описания плазмы, в частности, в ФИЦ ПХФ и МХ РАН, ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ», АО «ГНЦ РФ – ФЭИ», РФЯЦ-ВНИИЭФ, РФЯЦ-ВНИИТФ им. Е.И. Забабахина, ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, ОИВТ РАН и МФТИ.

Достоверность полученных результатов обеспечивается последовательным аналитическим выводом используемых выражений, проверкой их предельных случаев и сопоставлением численных расчетов с независимыми известными результатами. Корректность учета дальнедействующего кулоновского взаимодействия с помощью усредненного по углам потенциала Эвальда подтверждается сравнением с обычным потенциалом Эвальда, расчетом постоянных Маделунга, анализом радиальных функций распределения и исследованием сходимости термодинамических величин по числу частиц. Для однокомпонентной плазмы полученные значения энергии и построенное уравнение состояния согласуются с аналитическими результатами в области слабого взаимодействия, теоретическими оценками и литературными численными данными. Для невырожденной водородной плазмы достоверность расчетов подтверждается использованием матрицы плотности и псевдопотенциала

Кельбга, проверкой термодинамического предела, сравнением с результатом теории Дебая–Хюккеля при малом параметре неидеальности, литературными данными расчетов по химической модели плазмы и расчетами методом Монте-Карло с интегралами по траекториям, а также анализом состава плазмы, степени ионизации и радиальных функций распределения. Автор стал победителем конкурса для аспирантов и молодых ученых «PhD Student», получив индивидуальный грант Фонда развития теоретической физики и математики «Базис». Также автор получил первую премию конкурса научных работ студентов и молодых ученых ОИВТ РАН в номинации "Работы аспирантов и молодых ученых без степени в возрасте до 30 лет" за результаты, представленные в диссертационной работе.

Результаты работы опубликованы в высокорейтинговых научных журналах по тематике физики плазмы и статистической физики, а также представлены на международных и всероссийских конференциях, что дополнительно подтверждает их достоверность.

Личный вклад соискателя состоит в проведении численных расчетов, выполнении аналитических преобразований, обработке и анализе результатов, написании программного обеспечения, сравнении полученных данных с литературными результатами и подготовке публикаций по теме диссертации. Все результаты, включенные в диссертацию, получены автором лично под научным руководством доктора физико-математических наук Левашова П.Р. Выводы и положения, выносимые на защиту, сформулированы лично автором.

Апробация результатов исследования проводилась на 11 российских и международных конференциях при личном выступлении соискателя. Публикации по выполненной работе также подготовлены при определяющем участии автора.

В ходе защиты диссертации критических замечаний высказано не было.

Соискатель Демьянов Георгий Сергеевич ответил на задаваемые ему в

ходе заседания вопросы, согласился с замечаниями, привел собственную аргументацию.

На заседании от 27.05.2026 г. диссертационный совет принял решение за решение научной задачи, имеющей значение для развития физики плазмы, а именно за разработку, аналитическое обоснование, программную реализацию и применение вычислительно эффективных методов моделирования классических и квантовых невырожденных кулоновских систем с корректным учетом дальнодействующих взаимодействий на основе усредненного по углам потенциала Эвальда присудить Демьянову Георгию Сергеевичу 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 28 человек, из них очно: 11 докторов наук по специальности 1.3.9. – физика плазмы и 8 докторов наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника; дистанционно: 1 доктор наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 5 докторов науки 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 27, против 1, 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.

27.05.2026г.