

**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 2 ноября 2022 г. (протокол № 28)

**Защита диссертации Левашова Павла Ремировича  
на соискание ученой степени доктора физико-математических наук  
«Квантово–статистический расчет теплофизических свойств веществ  
для интерпретации ударно-волновых экспериментов и численного  
моделирования воздействия лазерных импульсов на вещество»**

Специальность 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника

Москва – 2022

## 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)

Протокол № 28 от 2 ноября 2022 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 25 человек, из них очно: 8 докторов наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 6 докторов наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника, дистанционно: 2 доктора наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 6 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 О.Ф.

**Ученый секретарь** – ученый секретарь диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02) к.ф.-м.н. Тимофеев А.В.

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

## ПОВЕСТКА ДНЯ

На повестке дня защита диссертации заведующего лабораторией 7.1 – моделирования свойств материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН) **Левашова Павла Ремировича** на тему «Квантово–статистический расчет теплофизических свойств веществ для интерпретации ударно-волновых экспериментов и численного моделирования воздействия лазерных импульсов на вещество». Диссертация впервые представлена на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника. Диссертация выполнена в лаборатории 7.1 – моделирования свойств материалов ОИВТ РАН (125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, [jih.ru](http://jih.ru)).

### 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» (НИЯУ МИФИ; 115409, г. Москва, Каширское ш., д. 31).

**Змитренко Николай Васильевич** – гражданин РФ, д.ф.-м.н., с.н.с., главный научный сотрудник Федерального исследовательского центра Института прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук (ИПМ РАН; 125047, г. Москва, Миусская пл., д. 4).

**Рыжков Сергей Витальевич** – гражданин РФ, д.ф.-м.н., профессор, профессор кафедры Э6 «Теплофизика» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)» (МГТУ им. Н. Э. Баумана; 105005, г. Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1).

### Ведущая организация:

**Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук (ИФВД РАН; 108840, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, стр. 14).**

На заседании присутствуют официальные оппоненты д.ф.-м.н., профессор Губин С.А., д.ф.-м.н., с.н.с. Змитренко Н.В. и д.ф.-м.н., профессор Рыжков С.В.

## СТЕНОГРАММА

### **Председатель**

Уважаемые коллеги! Начинаем сегодняшнее заседание нашего диссертационного совета. Сегодня у нас, без всякого преувеличения, знаковое событие, которое научная общественность нашего Института, и не только нашего, ждала очень долго. И это событие сегодня состоится. Это защита диссертации Павла Ремировича Левашова на тему: «Квантово–статистический расчет теплофизических свойств веществ для интерпретации ударно-волновых экспериментов и численного моделирования воздействия лазерных импульсов на вещество». Диссертация представлена на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника. Итак, работа началась, слово ученому секретарю.

### **Ученый секретарь**

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

### **Председатель**

Уважаемые коллеги! Вопросов не оказалось, поэтому предоставляется слово Павлу Ремировичу Левашову для изложения основных положений его работы.

### **Левашов П.Р.**

*Выступает с докладом по диссертационной работе (выступление не стенографируется, доклад Левашова П.Р. прилагается).*

### **Председатель**

Павел Ремирович, спасибо за подробное изложение основных положений своей диссертации. Сейчас мы переходим к обсуждению. Кто хотел бы задать вопросы? Пожалуйста.

### **Ломоносов И.В.**

Павел Ремирович, у меня вопрос относится к Вашим расчетам кривых плавления при высоких давлениях и температурах. Как мы с Вами знаем, есть подогреваемые алмазные наковальни, резистивные либо лазерным излучением, и есть хорошие результаты, где имеется полное согласие с ударно-волновыми измерениями, это, прежде всего, алюминий, медь и уран, и большое количество остальных элементов, в основном это переходные металлы, начиная от железа и дальше, где отличия достигают сотни процентов. Я имею в виду температурные данные. Как Вы полагаете, в данной ситуации на что следует опираться при разработке уравнений состояния и, соответственно, с Вашей точки зрения, какие экспериментальные данные, не то, чтобы являются более корректными, а, скажем так, являются более непротиворечивыми. Кому следует в данной ситуации отдавать предпочтение?

### **Левашов П.Р.**

Спасибо за вопрос. Я покажу еще раз график для кривой плавления никеля. Как раз никель хороший пример металла, в котором экспериментальные данные, получаемые в течение длительного времени различными группами, оказались занижены. Это как раз экспериментальные данные, полученные в лазерно-подогреваемых алмазных наковальнях. Я считаю, что плавление в ударных волнах надежно регистрируется, и в первую очередь нужно ориентироваться на данные по плавлению в ударных волнах. Собственно, все наши

расчеты, которые мы проводили и для других металлов, показывают, что соответствие с ударно-волновыми регистрациями получается хорошее, и этим данным надо отдавать предпочтение. Что касается данных, получаемых в алмазных наковальнях, то существует очень много ситуаций, когда эти данные оказываются неправильными. Таких примеров очень много. Поэтому к любым новым появляющимся данным в лазерно-подогреваемых алмазных наковальнях нужно относиться с осторожностью, и пока их не проверят перекрестно разные группы исследователей, я считаю, что верить им не стоит.

**Председатель**

Спасибо. Еще вопросы. Пожалуйста.

**Долгобородов А.Ю.**

Павел Ремирович, я продолжу эту часть с никелем, которая меня очень интересует. Дело в том, что экспериментаторы имеют дело с поликристаллическими образцами. Поэтому кривая плавления представляет собой некоторую область плавления. Начинается она в одном месте, а потом распространяется как кинетический процесс. А Вы в своих расчетах считаете для монокристалла?

**Левашов П.Р.**

Да, конечно.

**Долгобородов А.Ю.**

Может быть, отличие по сравнению с экспериментом, завышенная кривая связана с тем, что Вы не учитываете реальную структуру реального материала?

**Левашов П.Р.**

Экспериментаторы также работают с монокристаллами. Насколько я знаю, экспериментаторы стремятся брать образцы как можно ближе к монокристаллам. А можно ли рассчитать поликристалл? Да, можно, просто это потребует значительно больше усилий. Мы такую задачу перед собой не ставили, но, если она возникнет, будем решать.

**Долгобородов А.Ю.**

В реальной жизни нужен реальный материал, а не монокристалл.

**Левашов П.Р.**

Согласен.

**Председатель**

Еще вопросы, пожалуйста.

**Васильев М.М.**

Павел Ремирович, я хотел бы продолжить, этот график меня впечатлил. Вы сказали, что все, что было в экспериментах, которые с нами не совпадают, неправильно, а потом появился вдруг эксперимент, который совпал с нами, и он корректный. Что позволяет делать такое уверенное замечание, что точки, которые получали 20 лет и они совпадали друг с другом, они вдруг оказываются некорректными?

**Левашов П.Р.**

Мне кажется, что такие вопросы надо задавать экспериментаторам. Те люди, которые занимаются этим методом, они между собой решили, что вот эти точки оказались неправильными в силу каких-то определенных экспериментальных причин. На самом деле наша кривая не единственная здесь, есть еще кривая, которая была получена Поццо, также

методом квантовой молекулярной динамики из других соображений. И самое главное, что эти результаты совпадают с ударно-волновыми регистрациями, которые считаются очень надежными. Это показывает, что статические и динамические экспериментальные данные между собой согласуются. Вот этот вопрос очень важный, он много и долго дискутировался, но, тем не менее, сейчас расчеты и эксперимент показывают, что динамические и статические эксперименты должны давать одно и то же. Современные экспериментаторы руководствуются, в основном, этими соображениями.

#### **Председатель**

Хорошо, спасибо. Еще вопросы, пожалуйста.

#### **Вараксин А.Ю.**

У меня вопрос получается в продолжение первых двух вопросов. Он связан с тем, что, когда мы говорим «пористый материал», мы подразумеваем некоторое значение пористости. Но кроме пористости, играет роль и размер пор. Поясните пожалуйста, как делается эксперимент и как производится расчет.

#### **Левашов П.Р.**

Естественно, мы не моделируем саму ситуацию схлопывания пор и не рассматриваем форму частиц, которые составляют вещество. Мы используем довольно хорошо себя оправдавшую модель Зельдовича, которая работает следующим образом. Считается, что в начальный момент поры схлопываются, и дальше происходит сжатие сплошного образца, но нагретого. То есть за счет схлопывания пор температура образца повысилась, он уже нагретый, но нормальной плотности. И если такой метод использовать, то при достаточно высоких давлениях экспериментальные данные хорошо описываются, а при низких давлениях, где поры еще не схлопнулись и где есть кинетика схлопывания пор, такие данные, естественно, такой простой моделью описать нельзя.

#### **Председатель**

Спасибо. Игорь Львович.

#### **Иосилевский И.Л.**

Павел Ремирович, как Вы можете прокомментировать возможности того расчетно-теоретического аппарата, достижения по которому Вы выносите на защиту, для описания не чистых металлов, а металлических сплавов? Каково положение дел?

#### **Левашов П.Р.**

Я приводил результаты для LiD, это не сплав, конечно, но мы пытались и такие вещества считать и экспериментальные данные здесь, как видно, описываются довольно хорошо, в том числе и температурные данные, соответствующая картинка есть в диссертации. Таким образом, для сплавов с числом компонентов до четырех такие расчеты существуют и довольно хорошие результаты показывают. Так что это можно делать, и если такие задачи будут, то можно этим заняться.

#### **Председатель**

Алексей Дмитриевич.

#### **Киверин А.Д.**

Павел Ремирович, можно вернуться к слайду с пористостью. Вы говорили о некотором критерии снизу, где Ваша модель работает, а для высокой пористости, такое ощущение, что есть какой-то критерий сверху.

**Левашов П.Р.**

Нужно учитывать, что здесь еще довольно большая погрешность экспериментальных точек. Здесь хорошо видно, что при низких давлениях наша модель не работает. Вот эти экспериментальные точки она не описывает. При более высоких давлениях ситуация, возможно, выглядит не очень хорошо, но здесь погрешность, я Вас уверяю, довольно высокая, просто я ее здесь не поставил.

**Киверин А.Д.**

Я имею в виду расчеты по другой модели, которая показана сплошными кривыми.

**Левашов П.Р.**

Сплошная кривая – это модель многофазного уравнения состояния Игоря Владимировича Ломоносова.

**Киверин А.Д.**

Второй вопрос по задаче с пленкой. Вы, наверное, при постановке задачи как-то оценивали трехмерный разлет или все-таки остановились на одномерной задаче?

**Левашов П.Р.**

Естественно, моделировать эту задачу в одномерном приближении не совсем корректно просто потому, что здесь довольно большие расстояния. Проблема состоит в том, что такой двумерный расчет с переносом излучения произвести на сегодняшний день практически не реально.

**Киверин А.Д.**

А какие-то оценки делались?

**Левашов П.Р.**

Был запрос на получение оценки сверху. Одномерное моделирование дает эту оценку, так как в этом случае нет ухода излучения вбок. Поэтому все, что попало на пленку и на мишень, там же и осталось. Такой результат устроил экспериментаторов.

**Киверин А.Д.**

Эксперимент подтвердил эту оценку?

**Левашов П.Р.**

Эксперимент, к сожалению, так и не был проведен, но планировался.

**Председатель**

Уважаемые коллеги, поскольку у нас есть сейчас вопрос в режиме онлайн, я хотел бы предоставить слово Станиславу Александровичу, а потом Вам, Алексей Георгиевич.

**Ученый секретарь**

Станислав Александрович, мы Вас слушаем. У Вас пока выключен микрофон, из-за этого мы Вас не слышим. Чтобы мы Вас услышали, нужно включить микрофон.

**Председатель**

Алексей Георгиевич, пожалуйста, Вам слово.

**Храпак А.Г.**

Павел Ремирович, плавление, вообще говоря, это переход из кристаллического или твердого состояния в жидкое, то есть между двумя фазами. Ваша модель, так сказать,

посвящена одной из фаз, твердой фазе, и эта проблема имеется у многих полуэмпирических теорий плавления, я думаю, что она и у Вас присутствует. А как Вы думаете, можно было бы обобщить Ваши результаты в будущем, если бы Вы посчитали свободную энергию жидкого состояния? И из этих соображений, когда свободные энергии сравниваются, тогда и происходит плавление?

#### **Левашов П.Р.**

Мы стремимся к тому, чтобы так сделать. Более того, у нас была работа, где мы оценивали плавление алюминия таким способом. Проблема состоит в том, чтобы правильно оценить энтропию жидкой фазы, и эта проблема на сегодняшний день не решена полностью. Конечно, есть еще способ двухфазного моделирования, который часто используется: в одной ячейке приводят в равновесие твердое состояние и жидкое состояние. Можно и из таких соображений считать плавление. Так что здесь работы еще много, и я надеюсь, что мы этим будем дальше заниматься.

#### **Председатель**

Хорошо, есть ли еще вопросы? Если в очном формате нет, тогда попробуем в онлайн-режиме, если вопросы еще остались. Кто хотел бы в режиме онлайн задать вопросы? Пожалуйста.

#### **Куриленков Ю.К. - онлайн**

Павел Ремирович, помимо всего интересного и сложного из того, что Вы изложили, мне представляется важной частью, связанная с формулой Кубо-Гринвуда. На семинарах какие-то вещи обсуждались, хотелось бы, если можно, попросить Вас резюмировать, какие перспективы у этого подхода и что мешает продвинуть использование подхода Кубо-Гринвуда для описания оптических свойств неидеальной плазмы? Есть ли у Вашей группы в ближайших планах на будущее работать в этом направлении? Спасибо.

#### **Левашов П.Р.**

Принципиальных ограничений нет, есть ограничения, связанные с самим подходом, с методом функционала плотности. Я хотел показать график, на котором видно, что при описании статической электропроводности наклон экспериментальный и теоретический совпадают, но есть некий систематический сдвиг, связанный с тем, что уровни энергии в методе функционала плотности являются в некотором смысле фиктивными, и этот сдвиг присутствует во всех расчетах. Пока с этим сдвигом что-либо сделать не удастся. Кроме того, для сильнонеидеальной плазмы подразумевается, что необходимо будет моделировать плотности существенно меньше нормальной, в этом случае возникают технические проблемы, связанные со сходимостью, а при высоких температурах также нужно учитывать большое число уровней. Все это технические проблемы, с которыми мы успешно или не всегда успешно пытаемся бороться, и, естественно, планы вычисления транспортных и оптических свойств сильнонеидеальной плазмы у нас есть. И мы хотим для этого использовать не только метод функционала плотности, но и другие методы.

#### **Куриленков Ю.К. - онлайн**

Спасибо.

#### **Председатель**

Уважаемые коллеги, кто хотел бы еще задать вопрос? Пожалуйста.

#### **Дьячков Л.Г.**

Павел Ремирович, у меня вопрос простой. В полуэмпирическом уравнении состояния сколько параметров задействовано?

**Левашов П.Р.**

Здесь довольно большое число параметров. В данном случае больше 10. В некоторых уравнениях состояния может быть и 50.

**Дьячков Л.Г.**

Во всем диапазоне, в котором они используются, они фиксированы или все же в разных условиях могут меняться?

**Левашов П.Р.**

Обычно их фиксируют и они везде одинаковые. Есть параметры отдельно для твердой фазы, для жидкой фазы, отдельно для холодной кривой, но они фиксированы. И главная задача, как раз, уменьшить число этих параметров. В рассматриваемом уравнении состояния, например, для электронного вклада никаких параметров вообще нет, потому что используется модель Томаса-Ферми, а в большинстве уравнений состояния в электронном вкладе есть еще какие-то параметры.

**Дьячков Л.Г.**

Вы говорите, что число параметров может доходить до 50. Есть ли какие-то возможности уменьшить это число?

**Левашов П.Р.**

Возможность, например, состоит в том, что холодную кривую можно сейчас моделировать с довольно высокой точностью, и ее можно просто взять из расчета, аппроксимировать, и можно сказать, что это уже не подгоночные параметры, а просто аппроксимация. Для электронного вклада тоже можно использовать модели типа метода функционала плотности. Основную проблему составляет тепловой вклад ионов и атомов, и здесь, конечно, тоже есть подходы, типа метода квантовой молекулярной динамики, но этот подход очень трудоемкий, и рассчитать огромную таблицу этим методом довольно сложно. Можно рассчитать только отдельные точки.

**Дьячков Л.Г.**

Спасибо. Еще один вопрос. Если пройти по периодической таблице Менделеева, где меньше этих параметров, а где больше? Наверное, в самом начале меньше?

**Левашов П.Р.**

Это сложный вопрос. Он связан, скорее, с тем, какова фазовая диаграмма конкретного вещества. Если не учитывать фазы, как сделано в диссертации, то количество параметров будет одинаково. Можно использовать одну и ту же модель использовать, как это сделано, например, в уравнении состояния ван-дер-Ваальса, в ней два параметра, и они всегда используются. А если нужно описать фазовую диаграмму, то количество параметров может различаться очень сильно.

**Дьячков Л.Г.**

Спасибо.

**Председатель**

Уважаемые коллеги, есть ли еще вопросы или достаточное количество вопросов задано? Судя по их числу и содержанию, по-моему, очень все обстоятельно получилось. Если вопросов нет, тогда мы двигаемся дальше по нашему расписанию. И сейчас слово снова предоставляется ученому секретарю. Пожалуйста.

### **Ученый секретарь.**

Дорогие коллеги, в деле имеется заключение организации, где была выполнена работа. Это Объединенный институт высоких температур, диссертация рекомендована к защите. Кроме того, в деле имеется отзыв **ведущей организации**, это **Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики высоких давлений**. Отзыв составил заместитель директора по науке д.ф.-м.н. Валентин Николаевич Рыжов, заверил отзыв ученый секретарь Татьяна Валентиновна Валянская и утвердил директор института академик РАН Вадим Вениаминович Бражкин. Отзыв положительный, есть **замечания**. Если позволите, я зачитаю замечания и пропущу основную часть, в ней достаточно объемно описана сама работа, ее особенности, актуальность и т.д. Перехожу к замечаниям.

1. В главе 4 диссертации приведены результаты расчетов давления и энергии водородно-гелиевой плазмы методом Монте-Карло с интегралами по траекториям. На некоторых графиках (например, рисунки 4.3 и 4.4) наблюдаются осцилляции расчетных зависимостей, связанные, по-видимому, с большой статистической погрешностью. В работе отсутствует обсуждение этого эффекта, а также учета влияния параметров моделирования и «проблемы знаков» на результаты расчетов.

2. На рисунке 5.2 главы 5 диссертации приведены расчетные кривые зависимости давления от степени сжатия для калия до давлений 20 Мбар. Все кривые рассчитаны для объемно-центрированной кубической решетки калия. Известно, однако, что в диапазоне давлений до 1 Мбар калий испытывает ряд полиморфных фазовых превращений, которые оказывают существенное влияние на кривую холодного сжатия. По-видимому, для иллюстрации погрешностей псевдопотенциалов в методе функционала плотности автору следовало бы выбрать другой металл, например, золото или платину.

3. В главе 5 диссертации приведены расчеты кривых плавления алюминия, меди и никеля на основе квазигармонического приближения и критерия Линдемана. Между тем, вблизи кривой плавления сильное влияние на результаты могут оказывать эффекты ангармонизма, как это имеет место, например, для циркония. В работе этот эффект не анализируется и не обсуждается.

4. В диссертации анализируются экспериментальные данные, полученные как в статических, так и динамических условиях, в частности, в главе 6 для алюминия и дейтерида лития. При этом подразумевается, что в ударно-волновых экспериментах устанавливается термодинамическое равновесие, однако в диссертации отсутствуют оценки времени термализации за фронтом ударной волны.

5. В главе 6 диссертации на рисунках 6.6 и 6.7 обсуждаются ударные адиабаты пористых образцов алюминия, однако в тексте диссертации понятие пористости не определяется и не обсуждается. Автору следовало бы более подробно остановиться на этом вопросе, а также кратко изложить модель Я.Б. Зельдовича, используемую для интерпретации ударно-волновых экспериментов с пористыми веществами.

Указанные замечания, однако, не снижают общей положительной оценки, которую заслуживает диссертационная работа. Диссертация одобрена, соответствует всем критериям.

Далее. Получено **пять отзывов на автореферат**. Отзывы **положительные**, давайте я последовательно их зачитаю.

**(Первый отзыв).** Первый отзыв получен от профессора **МФТИ**, д.ф.-м.н. **Светланы Ивановны Ткаченко**, заверен секретарем ученого совета **МФТИ** Евгением Григорьевичем Евсеевым. Отзыв положительный, есть одно замечание по тексту автореферата.

1. Воздействие лазерного импульса на металлическую мишень с установленной перед

ней тонкой пленкой моделируется в одномерной постановке. Эффекты неоднородности, безусловно оказывающие влияние на результаты моделирования, в автореферате не упоминаются и не обсуждаются.

Это замечание носит рекомендательный характер и не снижает общей значимости диссертационной работы. Диссертация соответствует всем требованиям, подчеркнута в отзыве.

**(Второй отзыв).** Следующий отзыв получен от д.ф.-м.н., с.н.с. лаборатории нелинейной динамики **Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института электрофизики Уральского отделения Российской академии наук Николая Борисовича Волкова**. Заверен ученым секретарем института Еленой Евгеньевной Кокориной. Отзыв положительный, замечаний нет.

**(Третий отзыв).** Следующий отзыв получен от г.н.с. **Федерального исследовательского центра проблем химической физики и медицинской физики Виктора Борисовича Минцева**, чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. Подпись Виктора Борисовича заверена ученым секретарем института Борисом Львовичем Психа. Отзыв положительный, замечаний нет.

**(Четвертый отзыв).** Следующий отзыв от г.н.с. **Института теоретической физики им. Ландау**, д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН **Наиля Алимовича Иногамова**. Подпись Наиля Алимовича заверена ученым секретарем института Сергеем Александровичем Крашаковым. Отзыв положительный, есть замечание.

1. На рис. 3 (справа) автореферата приведены результаты сравнения метода Монте-Карло с интегралами по траекториям с химической моделью плазмы для смеси водорода с гелием. Заметно, что изотермы 200 кК, рассчитанные по этим двум моделям, отличаются по наклону, хотя согласие для изотерм при более низких температурах значительно лучше. В автореферате не обсуждаются причины такого поведения.

Сделанные замечания не снижают научной ценности работы. Автор отзыва считает, что работа удовлетворяет всем требованиям о порядке присуждения ученых степеней.

**(Пятый отзыв).** Следующий отзыв пришел от научного руководителя отделения Центр теоретической физики и вычислительной математики **АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ»**, д.ф.-м.н. **Анатолия Васильевича Филиппова**. Подпись Анатолия Васильевича заверена ученым секретарем института Александром Александровичем Ежовым. Отзыв положительный, есть одно замечание.

1. На рис. 8 (слева) автореферата приведены результаты расчета кривой квазиизоэнтропического сжатия дейтерия в сравнении с экспериментальными данными, полученными в РФЯЦ-ВНИИЭФ, Саров. На рисунке показаны экспериментальные точки до давления около 18 Мбар, хотя за последние 10 лет в эксперименте были получены точки при давлениях свыше 100 Мбар. Было бы крайне желательно провести теоретическую интерпретацию новых экспериментальных данных, если используемый для этого подход позволяет это сделать.

Высказанное замечание не ставит под сомнение высокую научную ценность работы и не снижает ее общей положительной оценки. Отзыв положительный. На этом отзывы и замечания закончены. Олег Федорович, передаю слово.

### **Председатель**

Спасибо, Алексей Владимирович. Итак, переходим к следующему пункту. Павел Ремирович, Вам предоставляется слово для ответа на поступившие замечания. Пожалуйста.

## Левашов П.Р.

Спасибо. Я сейчас проиллюстрирую замечания. По замечаниям 1 и 2 **ведущей организации** я согласен. Первое замечание касалось осцилляций в методе Монте-Карло с интегралами по траекториям, действительно, это проблема статистической погрешности, метод очень трудоемкий. И, конечно, нынешние суперкомпьютеры, по-видимому, позволят значительно улучшить те результаты, которые были получены уже достаточно давно. Кроме того, и улучшения, сделанные в методе Path Integral Monte Carlo, также, по всей видимости, должны привести к улучшению качества описания тех моделей, которые справедливы в условиях моделирования. По поводу холодных кривых для калия, да, действительно, калий был выбран по различным соображениям. В первую очередь, были сделаны расчеты в Снежинске с помощью полноэлектронного метода функционала плотности, поэтому мы провели моделирование для калия. Конечно, лучше было использовать другой металл, чтобы дополнительные вопросы о полиморфных фазовых переходах не возникали.

Замечание 3 касается эффектов ангармонизма при расчете плавления. Это важный вопрос, и действительно эффекты ангармонизма могут влиять на результаты довольно серьезно. Здесь я показываю результаты расчетов коэффициента теплового расширения для алюминия вплоть до плавления. Черная кривая – это эксперимент, а две кривые здесь показанные – это расчет методом функционала плотности с различными обменно-корреляционными функционалами. Видно, что здесь описание эксперимента неплохое, и для алюминия, соответственно, эффекты ангармонизма невелики. Однако если посмотреть на другие металлы, то там эффекты ангармонизма могут существенно влиять на результат. Мы такие металлы не рассматривали. Замечание 4 касается оценок времени термализации за фронтом ударной волны для описания экспериментальных данных по ударному сжатию алюминия. Здесь можно привести совсем простые оценки: просто оценить время между столкновениями, которое будет меньше пикосекунды в нормальных условиях для алюминия. И оценить время прохождения ударной волны со скоростью 10 км/с по образцу толщиной 1 мм. Здесь разница в шесть порядков, это говорит о том, что будет достаточно столкновений для того, чтобы установилось термодинамическое равновесие. При сжатии время между столкновениями будет еще меньше в силу того, что температура при сжатии возрастает.

Замечание на автореферат **Наиля Алимовича Иногамова**, касающееся параметров моделирования в методе Монте-Карло с интегралами по траекториям. Речь идет об этих двух изотермах, наклоны которых отличаются, а при более низких температурах наклон согласуется лучше. Здесь, по-видимому, качество данных не очень хорошее, это связано с тем, что не была достигнута сходимость по числу высокотемпературных разбиений. Эти данные нуждаются в дополнительной проверке. При более низких температурах моделирование проводилось более тщательно как раз для того, чтобы описать ионизационный минимум. Так что с этим замечанием я согласен, и здесь результаты можно улучшить.

Замечание **Светланы Ивановны Ткаченко** по поводу неоднородных эффектов, я уже про это вкратце говорил. Действительно, эффекты неоднородности здесь есть, учесть их сложно, то есть провести неоднородное моделирование — это очень трудоемкая задача. Мы хотели сделать оценку сверху для этой задачи для того, чтобы некие параметры сообщить экспериментаторам.

И замечание **Анатолия Васильевича Филиппова** по поводу данных по квазиизоэнтропическому сжатию дейтерия. Вот эта картинка приведена в диссертации, данные приведены до давлений примерно 18 Мбар. Здесь наш расчет. Естественно, с тех пор появились данные при более высоких давлениях, свыше 100 Мбар, как было указано,

и в совсем недавней нашей работе 2021 года мы эти данные попытались проинтерпретировать. Вот эти данные, полученные с помощью метода квантовой молекулярной динамики. Эта работа проводилась совместно с группой Игоря Владимировича Морозова. Здесь согласие получилось хорошее. Это дополнительная проверка метода. Эти результаты в диссертацию не вошли. На этом все.

### Председатель

Спасибо, Павел Ремирович. Теперь мы переходим к заслушиванию оппонентов. Слово предоставляется Сергею Александровичу Губину, д.ф.-м.н., Московский инженерно-физический институт. Пожалуйста.

### Губин С.А.

Отзыв на диссертационную работ Павла Ремировича Левашова. Работа Павла Ремировича и его диссертация посвящена развитию теоретических подходов, в основном это квантово-статистические первопринципные методы, с помощью которых был решен целый ряд задач по расчету теплофизических свойств веществ. В диссертации имеется много интересных результатов. Я коротко скажу, что очень интересным, на мой взгляд, является метод расчета вторых производных для термодинамического потенциала модели Томаса-Ферми. Или моделирование ударно-волновых экспериментов, которое вызвало большой интерес и обсуждение на сегодняшней защите. Или, например, моделирование плавления с учетом влияния электронов на основе квазигармонического приближения и критерия Линдемана. Дальше я хотел бы сказать, что научная новизна работы определяется применением квантово-статистических подходов для решения новых задач теплофизики, в частности, разработан метод расчета вторых производных, о котором я уже говорил, получено теоретическое описание ударно-волновых экспериментов для алюминия и так далее. Павел Ремирович очень хорошо рассказал доклад, было также подробное обсуждение, я бы хотел продолжить в таком кратком режиме рассказ о его диссертации и отметить, что в диссертации представлен полный цикл многомасштабного моделирования, практически от квантовых расчетов с участием сотен атомов и до макроскопического моделирования методами механики сплошной среды. Кроме того, мне кажется, не вызвал обсуждения тот факт, что в диссертации разработано два компьютерных кода. Первый компьютерный код для расчета электронных состояний методом Томаса-Ферми и второй для расчетов методом Кубо-Гринвуда. Коды работающие, они внедрены и могут быть использованы. Еще я хотел отметить, что диссертация написана прекрасным русским языком, я пытался найти грамматические ошибки и опечатки, и нашел, может быть, всего пару. К изложению материала диссертации имеется ряд замечаний.

1. В конце разделов 3.2 и 3.3 указано, что пять неизвестных коэффициентов моделей уравнений состояния определялись из условия наилучшего соответствия ударно-волновым экспериментальным данным. Однако процедура определения параметров в тексте диссертации не описана. Также ничего не сказано о погрешности коэффициентов уравнения состояния.
2. В главе 7 приводятся результаты расчетов статической электропроводности для плотной плазмы алюминия и пластика эффективного состава  $\text{CH}_2$ . Важной характеристикой таких расчетов является средний заряд плазмы, фигурирующий во многих кинетических моделях транспортных свойств. Автору диссертации следовало бы обсудить вопрос о среднем заряде плазмы хотя бы для целей сравнения результатов моделирования с менее совершенными моделями.
3. Отметим, что в книге В.П. Копышева «Теория уравнений состояния», Саров, 2009 год дано описание моделей уравнений состояния (УРС) «с целью иллюстрации

конфигурирования УРС», включая модель Томаса-Ферми, параграф 4.9, с выводом термодинамических свойств вещества, с использованием выражений для большого потенциала и гамильтониана.

Однако указанные замечания не снижают положительной оценки работы. Автореферат соответствует содержанию диссертации. Таким образом, можно констатировать, что диссертация Павла Ремировича представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным в п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», а ее автор, Левашов Павел Ремирович, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника за разработку на основе первопринципных методик квантово-статистических моделей и применение квантовой молекулярной динамики, а также создание компьютерных кодов для решения целого ряда фундаментальных и прикладных задач. Спасибо, я закончил.

### **Председатель**

Сергей Александрович, спасибо Вам. Переходим теперь к ответу соискателя. Павел Ремирович, пожалуйста, Вам слово.

### **Левашов П.Р.**

Спасибо. Первое замечание касается определения неизвестных коэффициентов в модели уравнения состояния. Это старая и серьезная проблема. Неизвестные параметры уравнения состояния подбираются вручную из условия описания экспериментальных данных в пределах погрешности. Такая процедура не является однозначной. Более строгий подход основан на использовании некоей целевой функции и последующей ее минимизации. Соответственно, ничего нельзя сказать и о погрешности коэффициентов уравнения состояния. В данном случае уравнения состояния строились для целей, скорее, иллюстративных, хотя они использовались в реальных расчетах. В дальнейшем процедуру подбора параметров уравнения состояния, конечно, нужно совершенствовать.

Замечание 2 касается оценки среднего заряда в моделировании методом квантовой молекулярной динамики. Это тоже старая и сложная проблема. Понятия среднего заряда в моделировании методом квантовой молекулярной динамики нет, его нужно вводить отдельно, вводить критерий для его использования, и, мало того, это можно сделать несколькими способами, то есть это неоднозначное определение. Конечно, хотелось бы такой, более-менее разумный критерий найти, чтобы можно было его использовать для извлечения среднего заряда из моделирования. Пока такой критерий не найден, поэтому этот вопрос остается открытым.

И третье замечание по поводу книги Копышева. Да, я согласен, на книжку нужно было сослаться. Спасибо.

### **Председатель**

Спасибо, Павел Ремирович. Сейчас слово предоставляется Николаю Васильевичу Змитренко, д.ф.-м.н., Институт прикладной математики им. Келдыша. Пожалуйста.

### **Змитренко Н.В.**

Во-первых, спасибо за предоставленную возможность поучаствовать в этой интереснейшей дискуссии, которая здесь развернулась. Прежде всего, я хотел бы сказать, что я согласен с уже сказанным ранее, что Павел Ремирович мог бы защититься и гораздо раньше. Можно сказать, что эти годы, в которые Павел Ремирович не защищался, они не прошли впустую. То есть диссертация собрала богатейший материал. В некотором смысле я назвал бы ее довольно универсальной, потому что есть очень много разноплановых исследований, за что, конечно, большая благодарность Павлу Ремировичу. По существу,

можно сказать, что исследования теоретического плана построения свойств вещества – теплофизических и других, из первых принципов – задача необъятно сложная, и я думаю, неисчерпаемая. И когда она будет решена до конца – непонятно, но Павлом Ремировичем сделан очень серьезный шаг в этом направлении. С другой стороны, есть и вторая проблема, которая здесь рассматривается, это построение широкодиапазонных уравнений состояния. Здесь уже используется некий эмпирический материал, без него никуда не денешься, но и в этом плане у соискателя вполне определенные достижения. Что хотелось бы выделить, давайте я не буду весь отзыв зачитывать. Что произвело впечатление. Два результата, полученные в диссертации, хотелось бы выделить. Первый – это способ расчета теплового вклада в термодинамические функции конечно-температурной модели Томаса-Ферми, который, на мой взгляд, впервые может включать вторые производные термодинамического потенциала с заданной точностью. Это позволяет рассчитывать таблицы термодинамических функций электронов и использовать их для построения широкодиапазонных уравнений состояния. Что и было продемонстрировано: некая эмпирика в холодной кривой плюс свободная энергия для электронов, которая точно была рассчитана. А второй результат, который хотелось бы отметить, это расчеты транспортных и оптических свойств плотной плазмы. В диссертации Павла Ремировича не только уравнения состояния рассматриваются, но и транспортные и оптические коэффициенты. Традиционный кинетический подход для расчетов транспортных свойств применим лишь для вещества достаточно низкой плотности. Формула Кубо-Гринвуда, по которой, кстати, были вопросы, позволяет обойти это ограничение и учесть вырождение электронной подсистемы, а преобразование Крамерса-Кронига дает возможность вычислить и оптические свойства плотной плазмы. В диссертации получены интересные результаты для динамической электропроводности и теплопроводности плотной плазмы алюминия и пластика (полиэтилена). По поводу изложения самой работы я, наверное, не буду это делать, потому что это все уже прозвучало, и мы все это обсудили. Сделаю замечания.

1. По главе 2. При описании расчетов по модели Томаса-Ферми для смеси элементов упоминается возможность расчета среднего заряда ионов, однако модель и формулы для расчета среднего заряда не приводятся.
2. По главе 3. На рис. 3.11 показаны ударные адиабаты образцов вольфрама различной начальной плотности. В тексте упоминается, что рассчитанные по уравнению состояния ударные адиабаты отклоняются от экспериментальных данных в сторону больших плотностей, однако объяснения этому эффекту не приводится.
3. По главе 5. При обсуждении рисунков 5.9-5.11 упоминаются факторы, которые могут повлиять на результаты расчетов кривых плавления металлов, в частности, эффекты ангармонизма, однако величина этих эффектов для рассматриваемых металлов не оценивалась. Следует отметить, что для металлов с сильными эффектами ангармонизма рассмотренный в диссертации подход, скорее всего, работать не будет.
4. На рис. 7.2 показано сравнение рассчитанной в диссертации статической электропроводности в зависимости от температуры для жидкого алюминия со справочными данными при атмосферном давлении. Из графика видно, что экспериментальные данные не описываются в пределах оценки погрешности. Обсуждение этого факта в работе отсутствует.
5. В главе 8 обсуждается моделирование воздействия мощного ультракороткого лазерного импульса на конденсированные мишени. Для моделирования используется двухтемпературное одножидкостное приближение. Однако для рассмотренных в работе интенсивностей лазерного импульса (порядка  $10^{19}$  Вт/см<sup>2</sup>) могут наблюдаться эффекты разделения зарядов, и одножидкостное приближение становится неприменимым. Оценки этого эффекта и его возможное влияние на результаты в работе отсутствуют.

Мое мнение состоит в том, что обозначенные замечания ни в коей мере не снижают

положительной оценки диссертационной работы Павла Ремировича. В диссертационной работе соискателя получен значительный ряд результатов как общезначимого, теплофизического свойства, так и есть множество полезных прикладных расчетов. Сделаны также выводы теоретического и прикладного характера. Автор заслуживает самой высокой оценки за развитие методов квантово-статистического моделирования свойств вещества, включая оригинальный метод подсчета интегралов по траекториям. Это то, что Павел Ремирович сделал даже много лет назад, и это даже тогда могло быть предметом защиты – это метод Монте-Карло с квантово-механическим расчетом интегралов по траекториям. Это существенный результат, заслуживающий высокой оценки. Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации, Результаты диссертационной работы опубликованы в 25 рекомендованных ВАК статьях в ведущих российских и зарубежных журналах, многократно докладывались на российских и международных конференциях. Постановка всех задач, анализ результатов и выводы были сделаны непосредственно автором работы. Можно с уверенностью говорить, что докторская диссертация Левашова Павла Ремировича представляет собой законченную высокосодежательную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным пунктом 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» № 842 от 24 сентября 2012 года, а ее автор, Павел Ремирович Левашов, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника. Спасибо.

#### **Председатель**

Николай Васильевич, спасибо Вам большое за подробный отзыв. Сейчас слово предоставляется Павлу Ремировичу для ответа на замечания.

#### **Левашов П.Р.**

Спасибо. Замечание 1 касается формул для расчета среднего заряда. Действительно, в главе 2 они не приведены, а приведены в главе 3. Средний заряд рассчитывается традиционно как произведение электронной плотности на границе сферической ячейки на ее объем. С этим замечанием я согласен.

Замечание 2 касается описания ударно-волновых экспериментов для вольфрама, в основном, для пористых образцов. Видно, что ударные адиабаты здесь относительно экспериментальных данных отклонены вправо. Это связано с тем, что использовалась довольно простая модель для расчета теплового вклада атомов и ионов в уравнение состояния, а именно квазигармоническая модель, и плавление ни в каком виде не учитывалось в этом уравнении состояния. В результате для жидкости используется та же самая квазигармоническая модель, которая в этом случае может работать значительно хуже, чем в твердой фазе. И наблюдаемое отклонение связано как раз с этим. Эта часть уравнения состояния может быть улучшена.

Третье замечание связано с эффектами ангармонизма. Я здесь еще раз покажу кривую плавления для алюминия, которая рассчитана и показана в диссертации. Здесь видно соответствие всем экспериментальным данным, и эффекты ангармонизма действительно малы. Однако, например, для циркония и гафния эти эффекты велики даже при очень низких температурах, фактически даже и на холодной кривой эти эффекты довольно сильны. Здесь нужно использовать другие подходы. Недавно мы подобную работу попытались сделать, и, возможно, скоро она будет опубликована.

Этот график касается замечания по поводу расчета статической электропроводности алюминия и описания справочных данных, которые здесь показаны и которые не описываются в пределах погрешности. Проблема здесь связана с тем, и я это уже говорил, что в методе функционала плотности уровни энергии имеют, в некотором смысле, фиктивный характер, кроме самого верхнего уровня энергии. Из-за этого возникает систематический сдвиг, при этом наклон описывается. Этот сдвиг оценить можно только

из экспериментальных данных. А погрешность оценивалась исходя из параметров расчета, из статистической погрешности, и т.д. Систематическая погрешность в эту погрешность не входит, видимо, поэтому возникает впечатление, что данные не описываются в пределах погрешности. Этот вопрос на сегодняшний день не решен, это работа для будущих исследований.

Последнее замечание касается моделирования воздействия ультракороткого импульса на конденсированные мишени. Почему используется одножидкостное приближение. Да, действительно, двухжидкостные эффекты могут влиять, когда основной импульс придет на мишень, и влияние будет существенным. Однако мы, в основном, рассматривали влияние предимпульса на мишень с довольно низкой интенсивностью. Для предимпульса одножидкостное приближение можно использовать. Если моделировать всю задачу целиком, то эти эффекты надо учитывать. Спасибо.

### **Председатель**

Павел Ремирович, спасибо. Сейчас слово предоставляется официальному оппоненту Сергею Витальевичу Рыжкову, д.ф.-м.н., МГТУ им. Баумана. Пожалуйста.

### **Рыжков С.В.**

Уважаемый председатель и члены диссертационного совета. Во-первых, хотел бы сказать, что актуальность и научная новизна работы соискателя не вызывает никаких сомнений, я вот сейчас буквально только что перепроверил индекс Хирша Павла Ремировича в базе данных Scopus, он равен 30, это говорит о большой научной значимости всех работ лаборатории под руководством Левашова. Что бы хотелось еще отметить из того, что не сказали. На мой взгляд, существенным является то, что соискателем показаны и приведены области применимости нескольких моделей и методов, например, область применимости модели Томаса-Ферми, функционала плотности и также критерии применимости псевдопотенциалов в квантовой молекулярно-динамической модели. Перейду к зачитываемой части, некоторые замечания пересекаются, но я зачитаю по положению.

1. В главе 2 диссертации приведено подробное описание конечно-температурной модели Томаса-Ферми, а в главе 3 результаты главы 2 используются для построения широкодиапазонных полуэмпирических уравнений состояния металлов. Тем не менее, в главе 2 отсутствует обсуждение области применимости модели Томаса-Ферми, что, безусловно, важно для разработанных уравнений состояния.
2. В главе 3 при формулировке модели уравнения состояния в качестве выражения для теплового вклада ядерной компоненты использовалось квазигармоническое приближение с некоторой характеристической температурой (формулы (3.9) и (3.10)). В то время как квазигармоническое приближение неплохо работает для кристаллического состояния, его применимость для жидкой фазы вызывает сомнения.
3. На рис. 6.5-6.7 показаны ударные адиабаты сплошных и пористых образцов алюминия, рассчитанные методом квантовой молекулярной динамики до давлений примерно 10 Мбар. Известно, однако, что для алюминия есть экспериментальные данные по ударной сжимаемости при значительно более высоких давлениях, свыше 100 Мбар. Однако в шестой главе диссертации эти данные не интерпретируются и даже не упоминаются.
4. В главе 7 упоминается закон Видемана-Франца (формула 7.17). Автором получены данные по электропроводности и теплопроводности, которые позволяют проверить этот закон в области плотной плазмы, однако соответствующие графики не приведены в диссертации. Это было бы полезно сделать для приложений, так как закон Видемана-Франца часто используется при моделировании процессов при высоких плотностях энергии ввиду отсутствия данных по теплопроводности.

Естественно, эти замечания носят непринципиальный характер, в целом диссертация Левашова Павла Ремировича является законченной научно-квалификационной работой, в которой получены результаты, совокупность которых можно квалифицировать как решение важной научной проблемы, связанной с разработкой и применением квантово-статистических методов для расчета теплофизических свойств веществ. Диссертация соответствует всем критериям, предъявляемым к докторским диссертациям, а ее автор Левашов Павел Ремирович, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника.

### **Председатель**

Спасибо, Сергей Витальевич. Переходим теперь к ответам. Пожалуйста, Павел Ремирович, Вам слово.

### **Левашов П.Р.**

Замечание 1 касается области применимости модели Томаса-Ферми. Мы исследовали область применимости вот в этих двух работах, но в диссертацию эти результаты не вошли. Соответственно, можно констатировать, что модель Томаса-Ферми применима для слабонеидеальной плазмы. В области же сильной неидеальности ситуацию спасает то, что тепловой вклад электронов сравнительно мал, что позволяет использовать модель Томаса-Ферми для построения широкодиапазонных уравнений состояния. Это действительно было продемонстрировано: данные по ударной сжимаемости вблизи нормальных условий описываются хорошо.

Замечание 2 связано с квазигармоническим приближением в области жидкой фазы. Действительно, в области жидкой фазы справедливость квазигармонического приближения вызывает сомнения. Это было сделано из соображений простоты.

Замечание 3 касается экспериментальных данных для алюминия при давлениях до 100 Мбар. Соответственно, эти данные мы действительно не использовали, потому что это потребовало бы существенно больших вычислительных ресурсов и существенно более длинных расчетов. Поэтому мы ограничивались величиной 10 Мбар, и выше этого давления на данные не смотрели. В принципе, можно провести интерпретацию этих данных, если такая задача будет поставлена.

И четвертое замечание по поводу закона Видемана–Франца. Да, я согласен, что его нужно было бы обсудить более подробно. В качестве примера я приведу число Лоренца, то есть число, выражающее закон Видемана–Франца, для плазмы эффективного состава  $\text{CH}_2$ . Вот так должно себя вести идеальное значение числа Лоренца, а вот так ведут себя данные, которые были рассчитаны в диссертации. Для пластика  $\text{CH}_2$  этот закон выполняется довольно посредственно.

### **Председатель**

Спасибо, Павел Ремирович. Сейчас у нас есть время для дискуссии по диссертации. Пожалуйста.

### **Ломоносов И.В.**

Спасибо. Глубокоуважаемый Олег Федорович, глубокоуважаемые коллеги! Сегодня перед тем, как началась защита, были сказаны весомые слова, что событие это долгожданное и эпохальное. И я целиком с этим согласен. Сейчас мне хотелось бы данную позицию обосновать и объяснить, почему работа Павла Ремировича заслуживает того, что в математике называется «точная верхняя грань», и почему у нас, мне представляется, в будущем в совете будут вопросы к другим соискателям, поскольку Павел Ремирович поставил очень высокую планку. Здесь присутствует Игорь Львович Иосилевский, который в 1990 году, если я правильно помню, на конференции в Эльбрусе, когда

подводилось резюме, чего мы добились в области изучения уравнений состояния, в том числе из первых принципов, подчеркнул, что сейчас более-менее понятно, как учитывать граничные условия в ячеечных моделях. Дальше, по-видимому, развитие будет происходить скрещиванием разных моделей, например, Синько с идеальным газом, а Копышева с твердыми сферами, что вызвало некоторое оживление в зале. И в работе Павла Ремировича мы видим, что ему удалось очень хорошо продвинуться в теории Томаса-Ферми, разработан метод расчета вторых производных потенциала. Но, по сути, я бы хотел обратить внимание на то, что сегодня, мне кажется, прозвучало недостаточно ярко. Это использование первопринципных методов, это метод функционала плотности в своей области применимости и метод квантовой молекулярной динамики для расчета тех областей фазовой диаграммы, где имеется сложная неупорядоченная система, это жидкость, это неидеальная плазма. И где Павел Ремирович, мне кажется, на примере алюминия эпохально продвинулся, показав, что метод квантовой молекулярной динамики может замечательно быть использован для описания этой сложной области. Он получил очень убедительное согласие с экспериментальными данными, и уже одного этого факта было бы, в принципе, достаточно, чтобы рассматривать работу по квантовой молекулярной динамике в качестве докторской диссертации. Потому что это дает основания, естественно, при дальнейшем проведении моделирования для элементов с большими  $Z$ , рассмотреть все эти вопросы, сопоставиться с экспериментом, и я считаю, что такие расчеты дают нам новую важную реперную информацию там, где раньше у нас не было экспериментальных данных, были какие-то достаточно упрощенные модельные теории, например, Томаса-Ферми, и сегодня весь комплекс этих результатов это сильная хорошая основа для дальнейшего развития как эксперимента в данной области, так и более технических приложений. Я бы здесь хотел обратить ваше внимание на то, что если мы говорим о специалистах в области первопринципных расчетов, то мы не так часто, а практически никогда не видим то, что относится к грубому механическому эксперименту, к ударным волнам. Вообще, как посчитать ударную адиабату это отдельный вопрос, никто из иностранцев, мне известных, не приводит расчеты изоэнтроп разгрузки, по-моему, они просто не знают, как это делать и не умеют. И здесь, конечно, чувствуется сильное влияние нашего отца-основателя Владимира Евгеньевича Фортова, который постоянно обращал внимание на то, чтобы данные подходы – ударное сжатие, ударное сжатие пористого вещества, изоэнтропическое расширение – чтобы эти эксперименты обязательно присутствовали в модельных расчетах. И Павел Ремирович, мне кажется, блестяще это все продемонстрировал. Я полагаю, что здесь стоит поставить в заслугу и результат, и в целом развитие всего теоретического подхода, и использование этого аппарата на самых мощных компьютерах. Получены результаты для водорода и его изотопов. Я говорю, в первую очередь, о первопринципных методах, наиболее тяжелых, QMD, где расчеты занимают огромное количество времени на самых мощных машинах. Сегодня это можно делать у нас только на одном суперкомпьютере в Сарове. Я думаю, что вы со мной здесь все согласитесь, работа, безусловно, выдающаяся, безусловно, это гордость института, в котором была выполнена такая работа, и я призываю всех безоговорочно поддержать соискателя и данную работу. Спасибо.

### **Председатель**

Игорь Владимирович, спасибо. Генри Эдгарович, пожалуйста.

### **Норман Г.Э.**

Дорогой Олег Федорович! Дорогие коллеги! Я был, в некотором роде, крестником Павла Ремировича, оппонентом на его кандидатской диссертации. И я очень доволен, что Павел Ремирович вышел на следующий уровень. Конечно, я буду голосовать «за» и вас призываю тоже. Я, собственно, не сомневаюсь, что вы тоже проголосуете «за».

### Председатель

Генри Эдгарович, спасибо. Пожалуйста.

### Долгобородов А.Ю.

Я очень рад, что, наконец, состоялось это событие. Я познакомился с Павлом Ремировичем, тогда Пашей, когда он был еще дипломником, в поезде, который отправлялся на конференцию на Эльбрус. Когда вся молодая компания шумела, общалась, Паша сидел в сторонке. Я спросил его: «Что ты делаешь?» Он сказал: «Изучаю немецкий язык». Меня сразу это поразило и вызвало внимание. А дальше Паша закончил, взял в руки гитару и все вокруг него собрались. Такой человек, естественно, вызывает повышенное внимание, и я следил за его работой, естественно поражаюсь его работоспособности и вообще работой во многих направлениях, не только в науке, но и в организаторской деятельности. Единственное, что я хотел бы ему пожелать со стороны экспериментаторов, это то, что мы, экспериментаторы, не работаем с таблицей Менделеева, у нас нет атомов алюминия, у нас есть кусок металла с соответствующими свойствами. Также меня поражает  $\text{CH}_2$ , ну нет такого полимера  $\text{CH}_2$ . Есть плексиглас, полиэтилен, атом углерода всегда связан с другим атомом углерода. Конечно, я понимаю, что все сложно, все это реальные системы, но сейчас мощность компьютеров возрастает, и можно уже приступить к моделированию реальных систем. Вот это пожелание я хотел бы высказать. А так, конечно, он давно достоин, и вообще, вместо диссертации ему уже пора писать книги. Призываю членов ученого совета проголосовать за эту работу.

### Председатель

Спасибо. Первый шаг к написанию книги уже сделан. Игорь Львович, пожалуйста.

### Иосилевский И.Л.

Уважаемые коллеги, прежде всего, уважаемые члены диссертационного совета. Мне кажется, что достоинства самой работы и достоинства диссертанта настолько очевидны, что мой призыв поддержать работу он для вас тоже является очевидным. Я, пользуясь случаем, хочу одну историческую страничку вам рассказать. Она состоит в том, что в 1990 году ректор МФТИ Карлов подписал приказ об организации кафедры по физике высоких плотностей энергии с заведующим кафедрой Владимиром Евгеньевичем Фортовым. И Владимир Евгеньевич Фортов, царство ему небесное, позвал тогда меня на помощь для организации учебного процесса, а поскольку я был сотрудником МФТИ, то я имел определенные преимущества и удобства. И, в частности, дело в том, что первые годы у нас не было плановой группы, которая приходила к нам с первого курса. Поэтому в порядке исключения ректорат разрешил нам расклеивать агитационные листочки и приглашать студентов к нам на кафедру с других факультетов. Вот таким образом к нам приходили лучшие студенты. Вот так к нам пришел в свое время тогда не Павел Ремирович, а просто Паша Левашов, и поскольку он был одним из очень хороших студентов, то это конечно не нравилось декану факультета ФАКИ Борису Константиновичу Ткаченко, с которым мы все, я должен сказать, были в давних и дружеских отношениях, и Фортов, и Сон, и я, и Виктор Грязнов еще со времен НИИТП. Я лично был отдан ему в ученики, чтобы он на ударной трубе учил нас, неразумных, как ударной волной получать неидеальную плазму. Поэтому в его дружеском отношении мы не имели оснований сомневаться, но у него был своеобразный грубоватый юмор. И поскольку я был сотрудником МФТИ, то когда он меня встречал в коридорах МФТИ, то он своим громовым голосом со свойственным ему юмором кричал на весь коридор: «Я вас с Фортовым убью, потому что вы как хорьки в курятнике крадете у меня лучших студентов». Что касается «убью», то это был своеобразный юмор, конечно, но что касается «лучших студентов», то это была правда. И я рад, что мы все имели возможность за многие годы убедиться, что действительно Павел Ремирович Левашов как человек,

прошедший через кафедру физики высоких плотностей энергии и оставшийся в институте, является, как здесь уже говорилось, важным «приобретением» для института высоких температур и важным украшением этого института. Поэтому очевидно, что мы должны поддержать саму работу и диссертанта. Спасибо.

#### **Председатель**

Николай Евгеньевич.

#### **Андреев Н.Е.**

Уважаемые коллеги, я хотел бы сказать буквально пару слов. По научной части много сказано, и все достаточно очевидно. Мне удалось поработать с Павлом Ремировичем, и я могу сказать, что он скромно упомянул только одну маленькую задачку по взаимодействию мощного излучения с веществом, а мы давно и успешно используем уравнение состояния и модели высокочастотной проводимости. Поэтому я хотел бы сказать, что применение достижений Павла Ремировича достаточно широко и не ограничивается теми задачами, о которых он, в основном, здесь рассказывал. Мое отношение, наверное, понятно. Поскольку мне удалось поработать с ним во многих проектах, я могу сказать, что как человек и организатор работ он действительно успешно это выполняет, хорошо относясь, по дружески, к сотрудникам разного уровня и возраста, поэтому я хотел бы ему пожелать не только расширять научный кругозор, но оставить свое дружелюбное отношение в коллективе, в котором он работает, на будущее. Я думаю, нам всем это поможет. Спасибо.

#### **Председатель**

Пожалуйста, Анатолий Васильевич.

#### **Филиппов А.В.**

Павла Ремировича я давно знаю, и всегда меня поражало его умение четко, ясно и очень интересно рассказывать о своих исследованиях. Последние несколько лет мы с ним тесно сотрудничаем, выполняя комплексную программу развития техники, технологии и науки в Госкорпорации «Росатом», и его интересные рассказы и квалификация проявляются на всех приемах и всех совещаниях. Поэтому, я думаю, Павел Ремирович уже давно перерос докторскую диссертацию, действительно, надо было давно защитить диссертацию, и я думаю, то, что он получит доктора физико-математических наук ему, в некотором смысле, поможет, потому что приходится пересекаться с чиновниками, для которых это слишком много значит. Поэтому я призываю поддержать эту диссертацию и проголосовать «за». Спасибо.

#### **Председатель**

Уважаемые коллеги, я бы тоже хотел сказать, не могу удержаться. Попытаюсь не то, что суммарное, а консолидированное мнение высказать. Павел Ремирович в нашем институте оказался как студент базовой кафедры московского Физтеха. Этот путь для многих теперь уже сотрудников института является характерным, даже традиционным. Но я хотел бы вот на что обратить внимание. Та тематика физики высоких плотностей энергий, в которой Павел Ремирович эти годы работал, она оказалась принесена и стартовала как раз в 90-е годы, когда Павел Ремирович оказался на кафедре. Принесена она была Владимиром Евгеньевичем Фортовым, и активная научная деятельность Павла Ремировича точно совпала со становлением и развитием этой тематики. Тогда это был НИЦ ТИВ, научно-исследовательский центр теплофизики импульсных воздействий, потом институт теплофизики экстремальных состояний, а потом уже объединенный ИВТАН после 2007 года. За это время Павел Ремирович из студента стал научным лидером крупного направления, одного из крупнейших в нашем институте по всем параметрам. И конечно

то, что он пришел сегодня с диссертацией, будучи руководителем научного подразделения, это является, конечно, закономерным итогом этих лет очень напряженной работы. Конечно, я буду поддерживать работу и могу только пожелать дальнейшего движения, как здесь было уже сказано, до монографии. Спасибо. Есть ли еще у кого-нибудь желание высказаться? Если нет, тогда по нашему регламенту мы предоставляем слово Павлу Ремировичу. Пожалуйста.

#### **Левашов П.Р.**

Спасибо за теплые слова. Я в своем заключительном слове хотел бы поблагодарить своего учителя, Владимира Евгеньевича Фортва, который оказал очень большое влияние на меня и на эту работу, и неизменно проявлял к ней интерес. Также я хочу поблагодарить также своего учителя и научного руководителя моей кандидатской диссертации Игоря Владимировича Ломоносова. Он во многом определил направление моей научной деятельности, принимал участие в постановке задач, и часть этих задач нашли решение в диссертации. Огромное спасибо всем членам диссертационного совета и персонально председателю за то, что Вы нашли время на обсуждение работы, которое было для меня очень полезно. Также я хотел бы поблагодарить своих коллег по Объединенному институту высоких температур, в первую очередь, коллег из своей лаборатории, шестеро из которых защитили кандидатские диссертации под моим руководством, трое из них здесь присутствуют. Большое спасибо сотрудникам теор. отдела ОИВТ РАН и всем сотрудникам ОИВТ, с которыми мне приходилось работать. Отдельное спасибо я хотел бы сказать Ольге Александровне Пановой за неизменный профессионализм. И, наконец, спасибо всем моим друзьям и родственникам, без которых эта диссертация, безусловно, не была бы написана. Спасибо.

#### **Председатель**

Спасибо, Павел Ремирович. Слово предоставляется Алексею Владимировичу.

#### **Ученый секретарь**

Дорогие коллеги! Так как заседание проводится в комбинированном очно-дистанционном режиме, голосование у нас проводится с помощью телекоммуникационной автоматизированной системы на сайте нашего института. Таким образом, сейчас всех присутствующих я прошу войти под своими логином и паролем на сайт ОИВТ РАН и проголосовать по разосланной ссылке. Это можно сделать с мобильного телефона или с установленного компьютера. Как только все проголосуют, объявим результаты.

#### **Председатель**

Уважаемые коллеги, продолжаем наше заседание. Голосование прошло, есть его результаты. Прошу всех занять свои места. Алексей Владимирович нам все сообщит.

#### **Ученый секретарь**

Дорогие коллеги! На заседании у нас присутствует 25 членов диссертационного совета. Из них 17 очно, в том числе докторов по профилю рассматриваемой диссертации 6, онлайн присутствует 8, в том числе докторов по профилю рассматриваемой диссертации 6, имеет право проголосовать 24 из 25 присутствующих, проголосовало 24 члена диссертационного совета, за 24, против 0, воздержались 0. Прошу утвердить результаты голосования поднятием рук. Есть ли кто-то против в дистанционном режиме? Прошу высказаться. Есть ли воздержавшиеся? Воздержавшихся нет, против нет. (*Протокол голосования утвержден единогласно*).

#### **Председатель**

Давайте поздравим соискателя. Переходим к проекту заключения. Кто хотел бы высказать

здесь свои замечания, предложения? *(Члены диссертационного совета обсуждают проект заключения)*. Мы должны проголосовать за проект заключения. Кто «за» с теми поправками, которые были озвучены? Кто против? Воздержался? Дистанционно есть кто-нибудь против? По-видимому, нет. Хорошо. *(Проект заключения принят единогласно)*. Спасибо!

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 ДОКТОРА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 02.11.2022 г. № 28

О присуждении Левашову Павлу Ремировичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Квантово–статистический расчет теплофизических свойств веществ для интерпретации ударно-волновых экспериментов и численного моделирования воздействия лазерных импульсов на вещество» по специальности 1.3.14 - теплофизика и теоретическая теплотехника принята к защите 28.06.2022 (протокол заседания № 11) экспертной комиссией Диссертационного совета 24.1.193.01 (Д 002.110.02), созданном 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](http://jiht.ru)), утвержденного Приказом Министерства образования и науки Российской Федерации № 86/нк от 26.01.2022г.

Соискатель Левашов Павел Ремирович, 1973 года рождения, в 1996 году окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)».

Диссертацию на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук на тему: «Уравнения состояния жидкой фазы металлов при высоких давлениях и температурах», по специальности 01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника защитил в 2000 году в диссертационном совете Д 002.53.03, созданном на базе Института высоких температур АН СССР.

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

В 1999 году окончил очную аспирантуру Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)».

Диссертация выполнена в лаборатории 7.1 моделирования свойств материалов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой химической физики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» Губин Сергей Александрович,

доктор физико-математических наук, доцент, главный научный сотрудник Федерального государственного учреждения «Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН» Змитренко Николай Васильевич,

доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры Э6 «Теплофизика» Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный технический университет имени

Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)» Рыжков Сергей Витальевич

дали положительные отзывы на диссертацию.

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 7.09.2022 г. директором академиком Бражкиным В.В.) указала, что научная значимость работы определяется, в первую очередь, потребностями разработки широкодиапазонных моделей термодинамических, транспортных и оптических свойств веществ для решения разнообразных практических задач, в том числе связанных с взаимодействием лазерных импульсов с веществом. Отмечается, что работе получен ряд важных результатов, определяющих научную новизну. Так, в диссертации разработан метод расчета тепловой части термодинамических функций конечно-температурной модели Томаса–Ферми для смеси элементов, включая вторые производные термодинамического потенциала, выполнен расчет кривых плавления металлов различной плотности с нагретой электронной подсистемой, продемонстрирована возможность описания всех типов ударно-волновых экспериментов для алюминия с помощью метода квантовой молекулярной динамики, выявлены особенности электронных транспортных свойств для плотной плазмы эффективного состава  $\text{CH}_2$  в диапазоне температур от 5 до 100 кК.

Соискатель имеет 150 опубликованных работ, в том числе по теме диссертации опубликовано 25 работ, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 25 работ. Список основных публикаций соискателя:

2. Shemyakin O. P., Levashov P. R., Obruchkova L. R., Khishchenko K. V. Thermal contribution to thermodynamic functions in the Thomas–Fermi model // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. — 2010. — Vol. 43, no. 33. — P. 335003.
3. Shemyakin O. P., Levashov P. R., Krasnova P. A. TFmix: A high-precision implementation of the finite-temperature Thomas–Fermi model for a mixture of atoms // *Computer Physics Communications*. — 2019. — Vol. 235. — P. 378–387.
4. Filinov V. S., Fehske H., Bonitz M., Fortov V. E., Levashov P. R. Correlation effects in partially ionized mass asymmetric electron-hole plasmas // *Phys. Rev. E*. — 2007. — Vol. 75, no. 3. — P. 036401.
5. Levashov P. R., Sin'ko G. V., Smirnov N. A., Minakov D. V., Shemyakin O. P., Khishchenko K. V. Pseudopotential and full-electron DFT calculations of thermodynamic properties of electrons in metals and semiempirical equations of state // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2010. — Vol. 22, no. 50. — P. 505501.
6. Minakov D. V., Levashov P. R. Melting curves of metals with excited electrons in the quasiharmonic approximation // *Phys. Rev. B*. — 2015. — Vol. 92, no. 22. — P. 224102.
7. Minakov D. V., Levashov P. R., Khishchenko K. V., Fortov V. E. Quantum molecular dynamics simulation of shock-wave experiments in aluminum // *J. Appl. Phys.* — 2014. — Vol. 115, no. 22. — P. 223512.
8. Minakov D., Levashov P. Thermodynamic properties of LiD under compression with different pseudopotentials for lithium // *Computational Materials Science*. — 2016. — Vol. 114. — P. 128–134.
9. Knyazev D. V., Levashov P. R. Transport and optical properties of warm dense aluminum in the two-temperature regime: Ab initio calculation and semiempirical approximation // *Phys. Plasmas*. — 2014. — Vol. 21. — P. 073302.
10. Krasnova P. A., Levashov P. R. Two-phase isochoric Stefan problem for ultrafast processes // *Int. J. Heat Mass Transfer*. — 2015. — Vol. 83. — P. 311–316.
11. Filinov V. S., Larkin A. S., Levashov P. R. Uniform electron gas at finite temperature by fermionic-path-integral Monte Carlo simulations // *Phys. Rev. E*. — 2020. — Vol. 102, no. 3. — P. 033203.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук (г.н.с. лаборатории нелинейной динамики, д.ф.-м.н. Волков Николай Борисович) – отзыв положительный, без замечаний.

2. Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии (г.н.с., чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н. Минцев Виктор Борисович) – отзыв положительный, без замечаний.

3. Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт» (национальный исследовательский университет) (профессор МФТИ, д.ф.-м.н. Ткаченко Светлана Ивановна) – отзыв положительный, с замечанием:

- воздействие лазерного импульса на металлическую мишень с установленной перед ней тонкой пленкой моделируется в одномерной постановке. Эффекты неоднородности, безусловно, оказывающие влияние на результаты моделирования, в автореферате не упоминаются и не обсуждаются.

4. Акционерное общество «Государственный научный центр Российской Федерации Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований» (научный руководитель отделения Центр теоретической физики и вычислительной математики, д.ф.-м.н. Филиппов Анатолий Васильевич) - отзыв положительный, с замечанием:

- на рис. 8 (слева) автореферата приведены результаты расчета кривой квазиизоэнтропического сжатия дейтерия в сравнении с экспериментальными данными, полученными в РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров. На рисунке показаны экспериментальные точки до давления около 18 Мбар, хотя за последние 10 лет в эксперименте были получены точки при давлениях свыше 100 Мбар. Было бы крайне желательно провести теоретическую интерпретацию новых экспериментальных данных, если используемый для этого подход позволяет это сделать.

5. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук (г.н.с., д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН Иногамов Наиль Алимович) - отзыв положительный, с замечанием:

- на рис. 3 (справа) автореферата приведены результаты сравнения метода Монте-Карло с интегралами по траекториям с химической моделью плазмы для смеси водорода с гелием. Заметно, что изотермы 200 кК, рассчитанные по этим двум моделям, отличаются по наклону, хотя согласие для изотерм при более низких температурах значительно лучше. В автореферате не обсуждаются причины такого поведения.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается:

- д.ф.-м.н., профессор Губин С.А. является ведущим ученым в области разработки моделей уравнения состояния для расчетов ударной сжимаемости инертных и взрывчатых веществ, а также термодинамических свойств продуктов детонации.

1. Кудинов А.В., Богданова Ю.А., Губин С.А., Мамедов З.И. Молекулярно-динамическое моделирование теплофизических свойств метана при статическом и ударно-волновом сжатии // Горение и взрыв. — 2018. — Т. 11, № 1. — С. 118-124.

2. Bogdanova Y.A., Gubin S.A., Maklashova I.V. Radial distribution functions for molecules in the universal equation of state model for gaseous/fluid/condensed systems // Physics of Atomic Nuclei. — 2019. — Т. 82, № 11. — С. 1481-1485.

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.

- д.ф.-м.н., с.н.с. Змитренко Николай Васильевич является признанным специалистом в области моделирования воздействия лазерного излучения на различные мишени с учетом переноса излучения, в том числе для задач инерциального термоядерного синтеза.

1. Змитренко Н.В., Кучугов П.А., Розанов В.Б., Степанов Р.В., Яхин Р.А. Исследование возможностей моделирования процессов несимметричного взрыва и разлета сверхновых

звезд в условиях лазерного эксперимента // Письма в ЖЭТФ. — 2018. — Т. 107, № 7-8. — С. 411-417.

2. Gus'kov S.Y., Rozanov V.B., Il'in D.V., Sherman V.E., Perlado J.M., Zmitrenko N.V. Spectral composition of thermonuclear particle and recoil nuclear emissions from laser fusion targets intended for modern ignition experiments // Plasma Physics and Controlled Fusion. — 2018. — Т. 60, № 8. — С. 085004.

3. Гуськов С.Ю., Демченко Н.Н., Змитренко Н.В., Кучугов П.А., Яхин Р.А. Сжатие и горение термоядерной мишени при зажигании фокусирующейся ударной волной в условиях нарушения симметрии облучения лазерными пучками // ЖЭТФ. — 2020. — Т. 157, № 5. — С. 889-900.

- д.ф.-м.н., профессор Рыжков Сергей Витальевич является известным специалистом в области высокотемпературной теплофизики, а также в области магнито-плазменного и магнитогидродинамического моделирования процессов, возникающих в задачах управляемого и инерциального термоядерного синтеза.

1. Kuzenov V.V., Ryzhkov S.V. Numerical modeling of laser target compression in an external magnetic field // Mathematical Models and Computer Simulations. — 2018. — Т. 10, № 2. — С. 255-264.

2. Kuzenov V.V., Ryzhkov S.V. Simulation of processes on a target induced by a jet system and laser radiation // Physics of Atomic Nuclei. — 2019. — Т. 82, № 10. — С. 1341-1347.

3. Кузенов В.В., Рыжков С.В. Численное моделирование взаимодействия мишени магнитно-инерциального термоядерного синтеза с плазменным и лазерным драйверами // Теплофизика высоких температур. — 2021. — Т. 59, № 4. — С. 492-501.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук является профильной организацией, специализирующейся на проведении исследований в области физики высоких давлений для экспериментального и теоретического изучения уравнений состояния, механических, структурных и транспортных свойств, а также фазовых переходов. В последние десятилетия в организации активно используются методы численного моделирования, в том числе классический метод молекулярной динамики и метод функционала электронной плотности.

1. Бражкин В.В. Почему статистическая механика "работает" в конденсированных средах? // УФН. — 2021. — Т. 191. — С. 1107–1116.

2. Brazhkin V.V., Fomin Yu.D., Ryzhov V.N., Tsiok E.N., Trachenko K. Liquid-like and gas-like features of a simple fluid: An insight from theory and simulation // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. — 2018. — V. 509. — P. 690-702.

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:

- разработана методика вычисления тепловой части термодинамических функций с заданной точностью по моделям Томаса–Ферми при конечной температуре и Томаса–Ферми для смеси элементов, в том числе для вторых производных термодинамического потенциала;

- разработан программный код для вычисления тепловой части термодинамических функций для моделей Томаса–Ферми при конечной температуре и Томаса–Ферми для смеси элементов, разработан графический интерфейс для вычисления таблиц термодинамических функций;

- разработаны полуэмпирические широкодиапазонные уравнения состояния для ряда металлов, в которых в качестве теплового вклада электронов используется модель Томаса–Ферми при конечной температуре;

- проведены расчёты термодинамических функций смеси водорода с гелием при температурах выше 10 кК с помощью метода Монте-Карло с интегралами по траекториям; проведены расчёты кривых плавления алюминия, меди и никеля с помощью метода функционала плотности, квазигармонического приближения и критерия Линдемана;
- с помощью метода функционала плотности, квазигармонического приближения и критерия Линдемана проведены расчёты температуры плавления в зависимости от электронной температуры для металлических кристаллов различной плотности с нагретыми электронами;
- проведено сравнение результатов вычисления холодных кривых, теплового давления и электронной теплоёмкости для металлов с помощью псевдопотенциального и полноэлектронного методов функционала плотности;
- проведено моделирование ударно-волновых экспериментов для алюминия, дейтерия и LiD;
- проведены расчёты транспортных и оптических свойств плотной плазмы алюминия и пластика эффективного состава CH<sub>2</sub> с помощью метода квантовой молекулярной динамики и формулы Кубо–Гринвуда, в том числе в двухтемпературном приближении;
- проведено одномерное гидродинамическое моделирование воздействия мощного лазерного импульса на тонкую плёнку, установленную перед мишенью, с учётом переноса излучения.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

- разработаны новые теоретические подходы для вычисления теплового вклада в термодинамические функции конечно-температурной модели Томаса–Ферми для смеси веществ, включая вторые производные термодинамического потенциала;
- предложен метод исследования области применимости псевдопотенциалов для метода функционала плотности;
- разработан метод расчёта кривых плавления кристаллов с нагретыми электронами;
- разработаны методы расчёта изоэнтроп сжатия и разгрузки по результатам атомистического моделирования;
- выполнена теоретическая интерпретация всех типов ударно-волновых экспериментов.

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

- разработан компьютерный код с графическим интерфейсом для расчёта теплового вклада электронов для смеси веществ по конечно-температурной модели Томаса–Ферми, а также параллельный код для вычисления транспортных свойств по формуле Кубо–Гринвуда;
- рассчитаны подробные таблицы термодинамических свойств электронов и создан новый класс широкодиапазонных полуэмпирических уравнений состояния металлов без коррекции электронного вклада;
- рассчитаны кривые плавления металлов в широком диапазоне давлений;
- рассчитана температура и другие термодинамические параметры при моделировании ударно-волновых экспериментов для ряда веществ;
- рассчитаны электронные транспортные свойства для плотной плазмы алюминия и пластика эффективного состава CH<sub>2</sub>;
- численно изучена проблема подавления лазерного предимпульса с помощью тонкой плёнки, устанавливаемой перед мишенью.

Результаты работы могут быть использованы в научных и научно-образовательных центрах, а также в организациях, в которых создаются и применяются широкодиапазонные модели теплофизических свойств веществ, в частности, в ОИВТ РАН, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, ФИЦ ПХФ и МХ РАН, ФИЦ ХФ РАН, ИЭФ УрО РАН, ИСЭ СО РАН, ИГиЛ СО РАН, РФЯЦ-ВНИИЭФ, РФЯЦ-ВНИИТФ, АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ», ФГУП «ВНИИА», МФТИ, НИЯУ МИФИ, МГТУ им. Баумана.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что достоверность полученных результатов подтверждается использованием теоретических подходов,

основанных на квантовой статистической физике и имеющих строгое теоретическое обоснование. Все квантово-статистические модели, рассмотренные в диссертации, были проанализированы на сходимость по параметрам моделирования, а результаты расчетов сравнивались с альтернативными моделями и экспериментальными данными.

Личный вклад соискателя является определяющим и состоит в постановке задач, разработке моделей, проведении численного моделирования, анализе и интерпретации полученных результатов, а также в подготовке публикаций.

Апробация результатов исследования проводилась на 88 российских и международных конференциях и симпозиумах. Основные публикации по выполненной работе также подготовлены при определяющем участии автора.

В ходе защиты критических замечаний высказано не было.

Соискатель Левашов Павел Ремирович в ходе заседания ответил на задаваемые ему вопросы, привел собственную аргументацию и согласился с замечаниями.

На заседании от 02.11.2022 г. диссертационный совет принял решение: за решение ряда научных проблем, внедрение которых вносит значительный вклад в развитие страны, присудить Левашову Павлу Ремировичу ученую степень доктора физико-математических наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника.

Всего присутствовало 25 членов совета, из них 12 докторов по профилю, очно – 17, из них докторов по профилю – 6, онлайн – 8, из них докторов по профилю – 6.

При проведении тайного голосования Диссертационный совет в количестве 25 человек, из них очно: 8 докторов наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 6 докторов наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника, дистанционно: 2 доктора наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 6 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 24, против 0, недействительных бюллетеней – 0.

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

Петров О.Ф.

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

Гимомеев А.В.  
02.11.2022 г.

