

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

СТЕНОГРАММА

заседания диссертационного совета 24.1.193.01 на базе Федерального государственного
бюджетного учреждения науки

Объединенного института высоких температур Российской академии наук
(125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2)
от 28 декабря 2022 г. (протокол № 36)

Защита диссертации **Сартана Романа Александровича**
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
«Метастабильные состояния разогретого плотного водорода»

Специальность 1.3.9 – физика плазмы

Москва – 2022

СТЕНОГРАММА

заседания диссертационного совета 24.1.193.01 на базе
Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Объединенного института высоких температур Российской академии наук
(125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2)
Протокол № 36 от 28 декабря 2022 г.

Диссертационный совет 24.1.193.01 утвержден приказом Министерства науки и высшего образования РФ № 86/нк от 26 января 2022г. составе 31 человека. На заседании присутствуют 23 человека, из них __ докторов наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и __ 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.ф.-м.н., профессор, академик РАН Петров О.Ф.

Ученый секретарь – ученый секретарь диссертационного совета 24.1.193.01 к.ф.-м.н. Тимофеев А.В.

1	Петров О.Ф.	Академик	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	Присутствует
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, д.ф.-м.н., 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	Присутствует
14	Голуб В.В.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.14	Присутствует
15	Грязнов В.К.	Д.ф.-м.н.	1.3.14	Присутствует
16	Дьячков Л.Г.	Д.ф.-м.н.	1.3.9	Присутствует
17	Еремин А.В.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.14	Присутствует
18	Зейгарник Ю.А.	Д.т.н., с.н.с.	1.3.14	Присутствует
19	Иосилевский И.Л.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Присутствует
20	Кириллин А.В.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.14	Отсутствует
21	Лагарьков А.Н.	Академик	1.3.9	Отсутствует
22	Ломоносов И.В.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.14	Отсутствует
23	Медин С.А.	Д.т.н., профессор	1.3.14	Присутствует
24	Норман Г.Э.	Д.ф.-м.н., профессор	1.3.9	Присутствует
25	Киверин А.Д.	Д.ф.-м.н.	1.3.14	Присутствует
26	Левашов П.Р.	К.ф.-м.н.	1.3.14	Присутствует
27	Савватимский А.И.	Д.т.н., профессор	1.3.14	Присутствует
28	Пикуз С.А.	К.ф.-м.н.	1.3.9	Присутствует
29	Зеленер Б.Б.	Д.ф.-м.н.	1.3.9.	Отсутствует
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 научного сотрудника лаборатории 14.1 – теории неидеальной плазмы Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук **Саргана Романа Александровича** на тему «Метастабильные состояния разогретого плотного водорода». Диссертация впервые представлена на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы. Диссертация выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования “Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)” (141700, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., д. 9, mipt.ru) на кафедре физики высокотемпературных процессов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук (125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр. 2, jiht.ru).

Научный руководитель:

Норман Генри Эдгарович – д.ф.-м.н., профессор, главный научный сотрудник международной лаборатории суперкомпьютерного атомистического моделирования и многомасштабного анализа Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»" (НИУ ВШЭ; Россия, 101000, г. Москва, ул. Мясницкая, д. 20, hse.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; Россия, 115409, Москва, Каширское ш., 31, mephi.ru).

Магницкая Мария Викторовна – гражданка РФ, к.ф.-м.н., старший научный сотрудник отдела теоретической физики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук (ИФВД РАН; Россия, 142190, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, стр. 14, hpri.troitsk.ru).

Ведущая организация:

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук (ФИЦ ПХФ и МХ; Россия, 142432, г. Черноголовка, г.о. Черноголовка, Московская обл., пр-кт академика Семенова, д. 1)

На заседании присутствуют официальные оппоненты д.ф.-м.н., профессор Губин С.А. и к.ф.-м.н. Магницкая М.В. (удаленное подключение), научный руководитель Саргана Р.А. д.ф.-м.н., профессор Норман Г.Э.

СТЕНОГРАММА

Председатель

Добрый день, коллеги! Сейчас мы будем рассматривать диссертацию Саргана Романа Александровича на тему: «Метастабильные состояния разогретого плотного водорода», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, по специальности 1.3.9 физика плазмы. Так, Алексей Владимирович, пожалуйста, вам слово.

Ученый секретарь

(Зачитывает данные о соискателе по материалам личного дела и сообщает о соответствии представленных документов требованиям ВАК Министерства образования и науки РФ).

Председатель

Спасибо. Сейчас мы переходим к изложению основных положений диссертации Романом Александровичем Сарганом. Пожалуйста, Роман Александрович.

Сарган Р.А.

Выступает с докладом по диссертационной работе (выступление не стенографируется, доклад Саргана Р.А. содержится в аттестационном деле).

Председатель

Спасибо, Роман Александрович теперь у нас обсуждение результата. Кто хотел бы задать вопросы пожалуйста. Пожалуйста, Николай Евгеньевич.

Андреев Н.Е.

Спасибо я попросил вернуться к графику, где был двойной логарифмический масштаб.

Сарган Р.А.

Этот?

Андреев Н.Е.

Да. У меня тут непонимание с горизонтальной осью вроде. Там, то есть это действительно логарифмический масштаб? Потому что так он выглядит как почти равномерный.

Сарган Р.А.

Смотрите, тут диапазон меняется, где 0.9 и 1.1, там по 0.2, а там – 0.3 и последнее тоже 0.3.

Андреев Н.Е.

А остальные по 0.3, да, но они немножко разной длины. Спасибо. Я рассмотрел.

Председатель

Павел Ремирович, пожалуйста.

Левашов П.Р.

У меня два вопроса. Первый вопрос. Возможно, вы знаете, что есть работы по расчетам фазового перехода диффузионным методом Монте-Карло, и там давление перехода примерно 5 мегабар. А у вас она меньше двух мегабар. И скорее всего это связано с влиянием обменного корреляционного функционала в расчетах квантовой молекулярной динамики. Вопрос такой: исследовали ли вы влияние обменного корреляционного функционала на положение фазового перехода?

Сарган Р.А.

Нет, не исследовали, тут применялся только один обменный корреляционный функционал. Фокусом было все-таки именно метастабильные состояния сами по себе скорее, а не положение по давлению, поэтому только один обменный корреляционный функционал и использовался.

Левашов П.Р.

И второй вопрос у меня. Есть вам известная работа Старостина, Филиппова и Грязнова, где они описывали этот фазовый переход с помощью химической модели. И не было у вас желания, так сказать, проверить эти результаты? Попросить авторов «натянуть» их химическую модель на ваши расчетные точки. Чтобы из химические модели определить параметры плазмы, степень диссоциации и все остальные.

Сарган Р.А.

Такой вопрос, «не было желания». Это про продолжение работы. Да, можно в эту сторону двигаться, но пока этого не было сделано.

Председатель

Еще вопросы, пожалуйста.

Храпак А.Г.

Скажите пожалуйста, вот вы когда говорите о проводимости плотного водорода, не совсем было понятно, вы учитывали роль зарядов в теплофизических свойствах водорода? И, если учитывали, то такой момент: из моего опыта работы с электронами в жидких диэлектриках, в частности, в жидком водороде. Жидкий водород представляет собой барьер порядка одного электрон-вольта для электрона. То есть, это влияет на потенциал ионизации молекул или атомов водорода в такой конденсированной фазе. Вот этот эффект вы, в частности, учитывали? Или вообще не учитывали заряды как таковые?

Сарган Р.А.

Заряды как таковые в методе молекулярной динамики в рамках теории функционала плотности отсутствуют. Нету отдельных зарядов есть только электронная плотность и в этом разрезе электроны отдельно на деле не учитывается. Вы говорите просто про другую модель.

Председатель

Хорошо, ответ дан. Так, пожалуйста.

Киверин А.Д.

Да. Вот у Вас одно из положений – это метод до получения метастабильных состояний. Всё-таки, не могли бы подробнее немного рассказать. Вы туда в метастабильную области за счет «поджатия», как вы выразились заходили. Это адиабатический сжатие?

Сарган Р.А.

Нет. Это просто уменьшается размер ячейки.

Киверин А.Д.

Просто у вас на картинах, вы говорите, на графиках речь идет об изотермах, а потом перепрыгиваете в метастабильную область. Просто по какой кривой? Это адиабатическое сжатие? Может изотермическое сжатие?

Сарган Р.А.

Конечно, мы сохраняем температуру. Цель – остаться на той же изотерме. То есть это изотермическое сжатие. Я говорил о том, что приходится «колдовать» с термостатом, выключать его, чтобы он не мешал, но при этом, все-таки, это одна изотерма. Это та же температура. Это изотермическое сжатие.

Киверин А.Д.

И вот еще не могли бы по поводу раннего состояния уточнить. Правильно я вас понял, что оно у вас работает только в области от полутора до двух с половиной тысяч кельвин?

Сарган Р.А.

Нет-нет. Это речь была о критической точки. Что из-за близости двух линий, вдоль которых расположены точки, соответствующие каждой из фаз, невозможно просто указать положение критической точки. Точнее не невозможно, а очень сложно, поэтому ее разброс – от полутора тысяч до двух с половиной. Такой большой получается критическая температура.

Киверин А.Д.

А само уравнение состояния в каком диапазоне?

Сарган Р.А.

Всё, что есть.

Киверин А.Д.

От 700, до 2000, да?

Сарган Р.А.

Да.

Председатель

Еще вопросы. Так может дистанционно, кто хотел бы задать их, пожалуйста. Леонид Михайлович, пожалуйста.

Василяк Л.М.

Короткий вопрос. Было написано, что меняется геометрия молекулы. Хотел бы уточнить, как она меняется? Вроде молекулы – линейные?

Сарган Р.А.

Размер меняется. У меня на предыдущих слайдах, сейчас секундочку...

Василяк Л.М.

То есть расстояние меняется?

Сарган Р.А.

Да. Среднее межатомное расстояние. Они чуть становятся больше.

Василяк Л.М.

А, наоборот, они больше становится. И второй вопрос, он – чисто терминологический. Вы говорите о времени жизни. Обычно, когда реакция, то говорят о времени полураспада. То есть используют натуральный логарифмы. А вы – десятичный. Или это – общепринятая вещь?

Сарган Р.А.

Нет. Я ввожу фактически свое определение времени жизни. Сколько в среднем существует молекула.

Василяк Л.М.

А, понял, понял. У меня пожелание. Поскольку вы публикуетесь везде, и за рубежом, и у нас, все-таки, поскольку есть определение, то вас могут просто неправильно понять.

Сарган Р.А.

Спасибо.

Председатель

Теперь дистанционной вопрос еще есть. Анатолий Васильевич хотел задать.

Филлипов А.В.

Роман Александрович, приведите физический механизм разрушения метастабильного состояния. У вас какое требование в системе приводит к разрушению?

Сарган Р.А.

Во-первых, метастабильные состояния имеют просто конечное время жизни. Просто во время моделирования, если достаточно долго моделировать, они сами перейдут рано или поздно в стабильное состояние. Это – во-первых. А во-вторых, эту вероятность перехода в стабильное состояние увеличивает присутствие термостата в

расчетах. Он играет роль возмущения. Но и во-вторых, то, что я говорил, при изменении размера ячейки. Само изменение может полностью разрушить стабильность, и молекулярно-динамическая траектория перейдет уже на стабильную ветвь изотермы.

Филлипов А.В.

Спасибо.

Председатель

Так, еще вопросы. Есть ли? Так, если нет, тогда мы переходим к следующему пункту. Слово предоставляется научному руководителю, Генри Эдгаровичу Норману. Пожалуйста.

Норман Г.Э.

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

Председатель

Спасибо, Генри Эдгарович. Алексей Владимирович, теперь вам слово.

Ученый секретарь

Дорогие коллеги, работа была выполнена в **Московском физико-техническом институте на кафедре физики высокотемпературных процессов Объединенного института высоких температур**. В связи с этим у нас в деле имеется два заключения: из Объединенного института высоких температур, и из Московского физико-технического института. Если позволите, в заключениях и следующий отзыв я не буду зачитывать все описание диссертации. Если потребуется, могу какие-то детали зачитать. Заключение Объединенного института высоких температур подписано заведующим отделом многомасштабного суперкомпьютерного моделирования **Владимиром Владимировичем Стегайловым**, утверждено директором Объединенного института высоких температур академиком Олегом Федоровичем Петровым.

В заключении указано, что диссертация «Метастабильные состояния разогретого плотного водорода» Романа Александровича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физ.-мат. наук по специальности 1.3.9 – Физика плазмы. Заключение Московского физико-технического института совпадает по рекомендации. Подписано заместителем заведующего кафедрой физики высокой температурных процессов доктором физ.-мат. наук **Владимиром Владимировичем Стегайловым** тоже, утверждено Виталием Андреевичем Баганом, проректором по научной работе.

Также в деле имеется отзыв ведущей организации. В качестве ведущей организации выступил **Федеральный исследовательский центр химической физики и медицинской химии**. Отзыв составил главный научный сотрудник, член-корреспондент РАН **Виктор Борисович Минцев**, заверил ученый секретарь Борис Львович Психа, доктор химических наук, утвердил отзыв заместитель директора доктор химических наук Эльмира Рашатовна Бадамшина. **Отзыв положительный**. Если позволите, не буду зачитывать все описание диссертации, оно здесь достаточно подробное, на много страниц. Отмечены следующие замечания:

- текст диссертации изобилует по всему тексту очень большим количеством орфографических, стилистических ошибок, опечаток, часто используются словосочетания, не являющиеся общепринятыми, допущены недопустимые вольности в использовании русского языка, что значительно затрудняет чтение диссертации.

- при описании параметров моделирования во второй главе рассмотрение конкретной модели, применяемой в настоящей работе, не подкреплено достаточным количеством ссылок.

- как известно, давление является характеристикой вещества, находящегося в термодинамическом равновесии. Так, на стр. 19 сказано: «Давление и температура вычислялись как средние значения вдоль МД-траектории после выхода на релаксацию через 1-2 пс после начала моделирования». Не пояснено, что в связи с этим означают осцилляции давления на рис.6 и 7 с периодом в несколько фемтосекунд.

- в главе 2 используются словосочетания “отрелаксированная траектория” и “релаксируя конфигурацию”. Не пояснен их смысл.

- в выводах к главе 3 написано, что линия сосуществования фаз на плоскости объем–давление имеет вид длинного и узкого “языка”. Не показано, и не пояснено как этот “язык” выглядит.

- здесь же указана оценка критической температуры в 1500К. Непонятно какой смысл имеет такая оценка при неопределенности в несколько тысяч Кельвин. Несколько тысяч – это сколько, 2000, 5000, 10000?

- неудачное на наш взгляд наименование оси ординат на рис. 13.

- следовало бы пояснить, что подтверждает или опровергает сравнение расчета и эксперимента на рис. 20-22.

Все перечисленные выше замечания не носят принципиального характера и не затрагивают основных результатов диссертационной работы. Изложенные в диссертации результаты достаточно хорошо обоснованы, апробированы. Опубликовано... если позволите, сокращу. Полностью соответствует квалификационным требованиям пункту 9 положений о присуждении ученых степеней, а ее автор Сартан Роман Александрович заслуживает присуждение ученой степени кандидатов физмат наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

Кроме этого, получено несколько отзывов на автореферат. В электронном виде в виде сканов получено 4 отзыва. В бумажном виде, в виде оригиналов получено два отзыва на автореферат. На текущий момент мы можем, таким образом, учесть вот эти **два отзыва**. Для более полной картины я упомяну все. Начну с тех, которые мы можем формально учесть.

Первый отзыв на автореферат получен из Физико-технического института имени Иоффе Российской Академии Наук от старшего научного сотрудника сектора теоретической астрофизики, кандидата физ.-мат. наук **Андрея Игоревича Чугунова**. **Отзыв положительный**, есть замечания:

- есть опечатки. Например, в подписи к рис. 2 пропущено слово «проводимость».

- не указано, какой термостат был использован, хотя важность отключения термостата для моделирования метастабильных состояний подчеркнута на стр. 8 автореферата

- на стр. 10 указано, что «Критическую температуру можно оценить в 1500 К с точностью порядка тысяч кельвин». Если это так, то как диапазон включает 0 К. Можно ли поставить более содержательный нижний предел?

- как указано на стр. 12, время жизни молекул в проводящей фазе составляет 10-

100 фс., т.е. всего несколько периодов колебаний атомов (см. также на стр. 14). Не очень понятно, насколько корректно называть такие короткоживущие конфигурации молекулами.

- при чтении автореферата возникает вопрос, как при переходе в проводящую фазу изменяется распределение молекул по времени жизни (остаётся ли распределение монотонным или появляется существенная доля короткоживущих молекул). Впрочем, ответ на этот вопрос во много дан в тексте диссертации.

- не очень ясно, почему «Резкое падение времени жизни можно интерпретировать как появление короткоживущих молекул H_2^+ » (стр. 13 автореферата).

Указанные замечания носят частный характер и не снижают общую оценку работы. Диссертационная работа удовлетворяет требованиям п.9 положения о порядке присуждения ученых степеней, и её автор заслуживает присуждения ученой степени по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

(Второй отзыв) Кроме того, оригинал отзыва получен из **Всероссийского научно-исследовательского института технической физики имени академика Забабахина** от **Владимира Владимировича Дремова**. Владимир Владимирович – замначальник отделения ИТФ, доктор физ.-мат. наук. Его подпись заверена ученым секретарем, кандидатом физ.-мат. наук Владимиром Николаевичем Ногиным. **Отзыв положительный**, без замечаний.

Кроме того два отзыва, которые мы сейчас формально не можем учесть, были присланные в виде сканов, и пока не пришли в виде оригиналов. Это отзыв от заведующего лабораторией квантовой химии Петербургского института ядерной физики имени Константинова Курчатовского института доктора физ.-мат. наук Анатолия Владимировича Титова, отзыв положительный, замечаний нет. И еще один отзыв был получен от кандидата физ.-мат. наук, начальника научно-исследовательского отделения, зам. директора РФЯЦ – ВНИИЭФ, это «Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики», Антона Олеговича Бликова. Отзыв положительный, по сути замечаний нету, есть замечание по оформлению: следует отметить довольно большое количество отпечаток, что конечно не снижает научную ценность проделанной работы.

Еще раз, **все отзывы положительные**.

Председатель

Алексей Владимирович, спасибо. Так, теперь слово Роману Александровичу для ответа на замечания. Пожалуйста.

Сарган Р.А.

Касательно замечания по поводу большого количества печаток – это так, это правда, можно только согласиться.

Замечание, что при описании параметров моделирования не указано достаточное количество ссылок. Там хватает ссылки на использованный функционал РВЕ.

Далее, тут есть следующее замечание по поводу того, что означают небольшие осцилляции давления на рисунках 6 и 7. Сейчас я покажу, что это были за рисунки в диссертация. Это – эволюция давления по времени вдоль молекулярно-динамической траектории. И небольшие осцилляции есть просто флуктуация давления. То есть молекулярной динамикой воспроизводятся механические флуктуации.

Далее вопрос о использовании словосочетания «отрелаксированной траектории» и

«релаксируя конфигурацию». Когда я говорю «релаксирую», я имею в виду «провожу молекулярно-динамический расчет, в результате которого моделируется релаксация». То есть начальная конфигурация, будучи неравновесной, в ходе моделирования релаксирует к равновесной.

Следующий вопрос по то, как выглядит в «язык». Это такая метафора. Он выглядит следующим образом. Для сравнения, слева изображены изотермы водорода, и жирным выделен этот «язык», бинодаль. А справа – хорошо известно уравнение газа ван-дер-Ваальса. У нас сама бинодаль, во-первых, перевернута, а во-вторых, из-за вот этого скошенного вида она получается вытянутой. И из-за этого определить положение её конца, который кончается критической точкой, сложно.

Касательно оценки критической температуры. На самом деле, то же самое что и про отпечатки. У меня там была некорректная фаза. Оценка критической температуры – от полутора до двух с половиной тысяч кельвин.

Про неудачная название оси ординат. Я в диссертации демонстрировал этот график, плотность распределения времени жизни. У меня там было написано просто «распределение время жизни молекул», но по смыслу имелась ввиду плотность распределения.

И последний вопрос от ведущей организации. Точнее, замечание: «следовало бы пояснить что подтверждает или опровергает сравнение расчета и эксперимента». В экспериментальной работе говорится о том, что в этой промежуточной области часто комбинируют и диссоциируют молекулы водорода. У меня – тоже самое, то есть это подтверждение такого характера, во-первых. А во-вторых, у меня по получается, что идут два параллельных процесса: один резкий, это ионизация, которая происходит при фазовом переходе, а другой – плавный, это диссоциация, которая не резкая, а с постепенной увеличивающейся степенью с ростом плотности. Собственно, в экспериментах первая группа точек – находится вдоль положения фазового перехода, где резко меняется время жизни и происходит ионизация, а в вторая она уже располагается там, где все уже доходит до полной диссоциации.

Так теперь замечания, которые были в **отзыве на автореферат**.

«Есть отпечатки» – признаю, есть.

«Не указано, какой термостат был использован» – в полном тексте диссертации это указано, был термостат Нозе-Гувера.

Далее замечание по критическую температуру. Оно аналогично замечанию в отзыве от ведущей организации, я на его уже ответил.

Вопрос про то, насколько корректно называть короткоживущие молекулы, если они живут всего несколько периодов колебаний. Дело в том, что это эти колебания существенны. Если смотреть на парную корреляционную функцию, справа она изображена красной линией, то мы увидим, что есть первый пик, и он заметно меньше, чем среднее расстояние между атомами вообще в ансамбле, которое вычисляется как обратная концентрация. Есть наличие какого-то ближнего порядка, оно существенно, поэтому даже если молекулы живут мало, все равно мы должны их учитывать.

Вопрос про по распределение времени жизни молекул. В этом вопросе даже сразу дан ответ, что в полном тексте диссертации об этом написано.

Так, и, вопрос звучит следующим образом: «не очень ясно, почему резкое падение времени можно интерпретировать как появление короткоживущих молекул H_2^+ ». Логика довольно простая: у нас, во-первых, есть резкое падение жизни и также, параллельно с этим, небольшой скачок межатомного расстояния в молекуле. Молекула

H_2^+ как раз менее стабильна сама по себе и имеет чуть больший размер. Отсюда делается, из вот этого сопоставления этих свойств, что мы наблюдаем именно H_2^+ .

Всё я ответил на замечания.

Председатель

Спасибо. Двигаемся дальше. Слово предоставляется официальным оппоненту Сергею Александровичу Губину. Пожалуйста, Сергей Александрович.

Губин С.А.

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

Председатель

Спасибо. Теперь слово Роману Александровичу, для ответа на замечания, пожалуйста.

Сарган Р.А.

Первое замечание связано с тем, что диссертации нет анализа условий, которому должны удовлетворять параметры неидеальной плазмы для существования метастабильных состояний. Но, вообще говоря, существование метастабильных состояний не зависит от параметров неидеальности плазмы. Поэтому такого анализа и не проводилось.

Следующее замечание, что в тексте нет пояснения, почему существование метастабильных состояний служит критерием того, что фазовый переход является именно переходом первого рода. Тут наверно будет уместно сослаться на пятый том Ландау, Лифшица. Действительно, только если у нас резкий фазовый переход, фазовый переход первого рода, то у него должны существовать метастабильные состояния, и наоборот тоже верно, то есть метастабильные состояния не могут существовать при фазовом переходе второго рода он плавный, постепенный.

Следующее замечание, откуда взялось указание на плазменную природу фазового перехода. Это связано с тем, что внешний вид, форма изотерм на качественном уровне воспроизводит результаты химической модели, где рассчитывался плазменный фазовый переход, это работа Бибермана, Нормана. Во-вторых, также есть конечно сходство с предсказаниями современной химической модели. Из-за вот этого сходства и делается вывод о плазменной природе.

Следующие замечание про ионизацию атомов водорода до H^+ . Логика такая: H_2 ионизируются до H_2^+ , потому что все молекулы становятся резко короткоживущими, а потом уже H_2^+ распадается на H и H^+ . И не H ионизируется до H^+ , а H^+ появляется из ионов молекулярных.

Так, и замечание, что диссертация написано с ошибками. Да, это – так. Могу только согласиться.

Председатель

Хорошо, спасибо. Так, следующий оппонент у нас будет участвовать дистанционно. Пожалуйста, слово предоставляется Магницкой Марии Викторовне.

Магницкая М.В.

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

Председатель

Мария Викторовна, спасибо вам за детальный комментарий. Теперь мы слово предоставляем Роману Александровичу для ответа на замечания. Пожалуйста.

Сарган Р.А.

Первое было замечание, связанное с другим молекулярно-динамическим расчетом, где тоже оценивалась концентрация. Сейчас я выведу на сайт сравнение с ним. Черные сплошные линии – это результат, полученный в моей работе, зеленые – это в той самой другой молекулярно-динамической работе. Различие состоит в том, что у них другой критерий, определяющий молекулу. Помимо радиуса обрезки r_{cut} они еще смотрели на время жизни молекул, и просто убрали все короткоживущие. То есть, они считали, что если молекула живет меньше 10 колебаний, что равняется там 76 фемтосекундам, то тогда такие атомы будут считаться одиночными, они не образуют молекулу. Я считаю, что мой подход более точный, потому что таким грубым способом выкидывать все короткоживущие молекулы неправильно, из-за того, что они присутствуют, и их, в частности, можно видеть на парной корреляционной функции. Первый пик парной корреляционной функции после фазового перехода как раз таки соответствует этим короткоживущим молекулами, и они образуют некий ближний порядок, который надо учитывать. Поэтому мой критерий, которые не обрезает все короткоживущие молекулы, а наоборот из их учитывает, я считаю более точным.

Следующее замечание о сравнении с экспериментом. Но я думаю, что в я в ходе презентации более подробно уже развернул подробное описание. Кратко напомним, что результаты экспериментов, которые группируются вдоль левой пунктирной линии, можно объяснить тем, что тут происходит именно фазовый переход и резкая ионизация, а вторая группа точек, которая расположена вдоль второй пунктирной линии – это уже достижение полной диссоциации.

Следующее замечание касательно линии Видома. Линия Видома была рассчитана для того, чтобы попытаться точнее определить критическую температуру. Я напомним, что в общем случае можно построить целую серию линий Видома, но главное, что они все будут начинаться в критической точке. И поэтому по какому критерию мы бы ее не строили, в данном случае это минимум производных давления по температуре, все равно она будет начинаться в критической точке. Правда даже расчет линии Видома не помог более точно определить критическую температуру. Потому что тут тоже довольно неоднозначные изменения: где линия фазового равновесия переходит в линию Видома определить сложно.

Насчет стилистических неряшливостей. Это опять же про опечатки, тут стоит столько согласиться. На странице 21 в третьем абзаце у меня там была фраза про то, что с металлизацией происходит с уменьшение плотности, но правильно было сказать с увеличением плотности. Я сейчас не буду проводить точную цитату, там длинное предложение, но неверная формулировка. И также неверная формулировка про оценку критической температуры. Правильно сказать, что критическая температура, её значение лежит в диапазоне от полутора тысяч до двух с половиной тысяч кельвин.

Так, это было последнее замечание.

Председатель

Спасибо, Роман Александрович. Так, теперь мы переходим к дискуссии. Пожалуйста, кто хотел бы выступить? Дистанционно тоже можно это делать. Так, пожалуйста.

Левашов П.Р.

Дорогие коллеги, я с работой Романа Александровича знаком с момента, как он начал этим заниматься. До этого этим занимался Ильнур Саитов, и это – продолжение работы Ильнура. Чтобы понять, собственно, ценность работы, я небольшой экскурс исторически сделаю.

С момента создания статистической физики Гиббсом не было понятно описывают ли статистическая физика фазовые переходы. И это подтверждение было получено только 1944 году, когда Онзагер получил решение для двумерной модели Изинга. Здесь плазменные фазовый переход был предсказан нашими коллегами, Норманом и Старостиным, Генри Эдгарович здесь присутствует, в 1968 году, и тогда же они написали в своей работе, что подтвердить или опровергнуть существование этого плазменного фазового перехода невозможно, потому что для этого нужно последовательно учесть эффекты вырождения и эффекты взаимодействия плазмы, что теоретически сделать очень трудно. И вот, в 2010 году произошло эпохальное событие, которое у нас в стране не замеченным прошло, к сожалению. Сразу в двух группах расчетных, они в США, был обнаружен вот такой вот новый тип фазового перехода. Это уже не теоретические работы, а именно расчетные работы. Это – новый тип фазового перехода, его нужно исследовать. Соответственно, ценность работы Романа Александровича состоит в том, что он исследует метастабильные состояния вот в этом новом типе фазового перехода. И, естественно, это нужно делать численными методами. И он действительно получил интересные результаты, на мой взгляд. Работа это должна продолжаться, она актуальна. Я считаю, что Роман Александрович заслуживает присуждение ему ученой степени кандидата физ.-мат. наук, и я вас призываю проголосовать за эту работу. Спасибо.

Председатель

Спасибо. Так, еще кто что-нибудь хотел бы?

Уважаемый коллеги, я хотел бы здесь сказать несколько слов. Я, конечно, призываю работу поддержать и проголосовать. В моем представлении мы сегодня заслушали классическую диссертацию человека, который прошел школу Генри Эдгаровича, и школу физтеха. Классика, она и есть классика. Во все времена остаётся. И, конечно, хотелось бы здесь только пожелать, чтобы эта работа шла, так сказать, дальше. Я не знаю какие планы у Романа Александровича, надеюсь, что конструктивные в части научных изысканий. Конечно, идти нужно дальше к новым результатам. А так, работа полностью соответствует всем требованиям, заслуживает поддержки. Спасибо.

Еще кто-нибудь хотел бы? Дистанционно?

По-видимому, всё ясно. Раз классика, так значит классика. Следующее у нас – заключительное слово соискателя. А потом уже голосовать.

Сарган Р.А.

Во-первых, хочу выразить свою благодарность научному руководителю, Генри

Эдгаровичу. Под его руководством довести работу до защиты было не так сложно. Вторых, моя благодарность Объединенному институту высоких температур, потому что здесь созданы все условия для того, чтобы можно было работать и вот, в частности, совершенно спокойно, без каких-то проблем дойти до защиты диссертации.

Председатель

Спасибо, Роман Александрович.

Переходим к голосованию, пожалуйста. Голосуем.

Ученый секретарь

Дорогие коллеги, еще раз напоминаю, у нас голосование в комбинированном режиме, как и заседание. Голосования проводится на сайте с помощью нашей электронной системы. Прошу войти на сайт в свою учетную запись и проголосовать.

Председатель

Уважаемые коллеги голосование завершилось. Алексей Владимирович сейчас объявит его результат.

Ученый секретарь

Дорогие коллеги, на заседании присутствовало **23** члена диссертационного совета, в том числе докторов наук по профилю рассматриваемой диссертации – **9**. Очно присутствовала **13** членов диссертационного совета, в том числе докторов наук по профилю рассматриваемой диссертации – **5**. Онлайн присутствовало **10** совета, в том числе по профилю рассматриваемой диссертация – **4**. Получено **23** голоса, результаты голосования: **23** – «за», **0** – «против», «недействительно» – **0**.

Председатель

Так, прошу утвердить протокол. Кто «за»? Так, есть ли «против»? Воздержавшиеся? Так, дистанционно тоже, есть ли «против»? И воздержавшиеся? Нет. Протокол утвердили, теперь можно поздравить Романа Александровича.

И так, обсуждаем проект заключения. Есть замечания?

(Члены диссертационного совета обсуждают проект заключения)

Председатель

Есть ли ещё у кого-то предложения и замечания? Если нет, предлагается тогда взять проект заключения за основу, с учетом замечаний, и его утвердить. Кто «за» это предложение, прошу голосовать. Так, есть ли «против»? «Воздержавшиеся»? Дистанционно, по-видимому, тоже возражений нет. Все, спасибо, на этом защита завершается.

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 28.12.2022г. № 36

О присуждении Сартану Роману Александровичу, гражданину Российской Федерации ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Метаустойчивые состояния разогретого плотного водорода» по специальности 1.3.9 – физика плазмы принята к защите 26.10.2022г., (протокол заседания № 27) 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 науки и высшего образования Российской Федерации № 86/нк от 26.01.2022г.

Соискатель Сартан Роман Александрович 1994 года рождения, в 2018 году окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»

Работает в должности научного сотрудника лаборатории № 14.1 – теории неидеальной плазмы Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

В 2022 году окончил очную аспирантуру Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)».

Диссертация выполнена в Федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования “Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)” на кафедре физики высокотемпературных процессов Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник международной лаборатории суперкомпьютерного атомистического моделирования и многомасштабного анализа Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования "Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»" Норман Генри Эдгарович.

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;

- кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник отдела теоретической физики Федерального государственного бюджетного учреждения науки

Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук
Магницкая Мария Викторовна

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук в своем положительном заключении, составленном главным научным сотрудником д.ф.-м.н. член-корр. РАН Минцевым В.Б. (утвержденном 13.12.2022г. ученым секретарем д.х.н. Психа Б.Л.) указала, что научная значимость работы состоит следующем:

- предложен метод моделирования метастабильных состояний в рамках метода квантовой молекулярной динамики;

- получено уравнение состояния разогретого плотного водорода с метастабильной областью, существование которой ранее было предсказано лишь в рамках квазихимического представления;

- предложен и применен новый метод оценки концентрации молекул H_2 и их времени жизни в рамках метода квантовой молекулярной динамики;

- в рамках прямого численного моделирования получено качественное описание процессов, сопровождающих фазовый переход, и получено представление о компонентном составе плотного водорода в области фазового перехода.

Степень достоверности полученных результатов является высокой, что подтверждается, с одной стороны, изложением материалов диссертационной работы в рецензируемых изданиях, индексируемых в отечественных и международных базах данных, а с другой стороны, непротиворечивостью полученных закономерностей и данных, известных из научной литературы. В работе использованы самые современные математические методы и методы математического моделирования. Обсуждение опирается на надежно установленные факты и закономерности. Выводы соответствуют содержанию разделов диссертации.

Соискатель имеет 17 опубликованных работ по теме диссертации, из них в рецензируемых научных изданиях опубликовано 7 работ, 10 тезисов в сборниках трудов конференций:

1. *Sartan R.* Changes in properties of H_2 molecules at the fluid–fluid phase transition in warm dense hydrogen // *Contribution to Plasma Physics.* — 2022. — Vol. 62, no. 8. — e202100227.

2. *Sartan R.* Structure properties of warm dense hydrogen // *Journal of Physics: Conference Series.* — 2020. — Vol. 1556. — P. 012047.

3. *Norman G., Saitov I., Sartan R.* Metastable states of fluid–fluid phase transition in warm dense hydrogen // *Journal of Physics: Conference Series.* — 2019. — Vol. 1147. — P. 012003.

4. *Norman G., Saitov I., Sartan R.* Metastable molecular fluid hydrogen at high pressure // *Contribution to Plasma Physics.* — 2019. — Vol. 59. — P. 173.

5. *Норман Г. Э., Саитов И. М., Сартан Р. А.* Метастабильные состояния разогретого плотного водорода // *Доклады Академии Наук.* — 2018. — Т. 481, № 4.

6. *Norman G., Saitov I., Sartan R.* Structures of liquid selenium at phase transition // *Journal of Physics: Conference Series,* — 2018. — Vol. 946. — P. 012101.

7. Norman G., Saitov I., Sartan R. Metastable states of warm dense hydrogen // Interfacial phenomena and heat transfer. — 2017. — Vol. 5. — P. 165.

На диссертацию и автореферат поступили отзывы:

1. **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:

- есть опечатки. Например, в подписи к рис. 2 пропущено слово «проводимость».

- не указано, какой термостат был использован, хотя важность отключения термостата для моделирования метастабильных состояний подчеркнута на стр. 8 автореферата.

- на стр. 10 указано, что «Критическую температуру можно оценить в 1500 К с точностью порядка тысяч кельвин». Если это так, то как диапазон включает 0 К. Можно ли поставить более содержательный нижний предел?

- как указано на стр. 12, время жизни молекул в проводящей фазе составляет 10-100 фс., т.е. всего несколько периодов колебаний атомов (см. также на стр. 14). Не очень понятно, насколько корректно называть такие короткоживущие конфигурации молекулами.

- при чтении автореферата возникает вопрос, как при переходе в проводящую фазу изменяется распределение молекул по времени жизни (остаётся ли распределение монотонным или появляется существенная доля короткоживущих молекул). Впрочем, ответ на этот вопрос во много дан в тексте диссертации.

- не очень ясно, почему «Резкое падение времени жизни можно интерпретировать как появление короткоживущих молекул H_2^+ » (стр. 13 автореферата).

2. **Федеральное государственное унитарное предприятие «Российский Федеральный Ядерный Центр - Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики имени академика Е.И. Забабахина»** (зам. начальника отделения д.ф.-м.н. Дремов В.В.) - отзыв положительный, без замечаний.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается:

- д.ф.-м.н., профессор Губин С.А. является ведущим ученым в областях термодинамического моделирования сложных химических систем и газодинамических расчётов ударных и детонационных волн.

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

2. 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.

3. Gubin S.A., Victorov S.B. The accuracy of the theories based on statistical physics for the thermodynamic modeling of state parameters of dense pure gases (fluids) // J. Phys.: Conf. Ser. 2019. V. 1205. P. 012020.

- к.ф.-м.н., Магницкая Мария Викторовна является высококвалифицированным специалистом в области теоретических исследований фундаментальных свойств

вещества: структуры, электронных свойств, устойчивости и фазовых превращений при высоких давлениях

1. Kamaeva, L., V. Magnitskaya, M., V. Suslov, A. A. Tsvyashchenko, A. V. Chtchelkatchev, N. M. Structural transformations and thermal stability of RhGe synthesized under high temperature and pressure // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2022. V. 34 (42) P. 424001.
2. Kamaeva, L. V. Chtchelkatchev, N. M. Suslov, A. A. Magnitskaya, M., V. Tsvyashchenko, A., V. Structural and thermal stability of B20-type high-pressure phases FeGe and MnGe // *Journal of Alloys and Compounds*. 2021 V. 888 P. 161565.
3. Chtchelkatchev, N. M. Magnitskaya, M. V. Tsvyashchenko, A. V. Ab initio study of non-centrosymmetric transition-metal monogermanide B20-RhGe synthesized at high temperature and pressure // *The European Physical Journal Special Topics*. 2020 V. 229 (2-3) P. 167-178

- Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук является профильной организацией, где проводятся исследования физико-химических процессов, протекающих при экстремально высоких значениях давления, температуры и плотности энергии. В лаборатории уравнения состояния вещества ведутся работы по сильно неидеальной плазме, в частности, изучается фазовый переход в разогретом плотном водороде и дейтерии.

1. Zaporozhets, Yu. B. Mintsev, V. B. Gryaznov, V. K. Rosmej, S. Reinholz, H. Röpke, G. The investigation of the optics of shock-compressed strongly correlated plasma // *Contr. to Pl. Phys*. 2021. V. 61 (10) P. e202100110
2. Мочалов, М. А. Ильяев, Р. И. Фортов, В. Е. Ерунов, С. В. Аринин, В. А. Бликов, А. О. Огородников, В. А. Рыжков, А. В. Комраков, В. А. Куделькин, В. Г. Максимкин, И. П. Грязнов, В. К. Иосилевский, И. Л. Левашов, П. Р. Минаков, Д. В. Парамонов, М. А. Квазиизэнтропическое сжатие неидеальной

плазмы дейтерия и его смеси с гелием в области давлений до 250 ГПа // *ЖЭТФ*. 2021. Т. 159 (6) С. 1118-1133

3. Filippov, A. V. Starostin, A. N. Gryaznov, V. K. Electron transport in nonideal and degenerate plasmas // *Jour. of Phys.: Conf. Series*. 2019. V. 1147. P. 012101

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований:

– разработан способ моделирования метастабильных состояний в рамках молекулярной динамики. Для достижения метастабильности, необходимо подобрать нужную начальную конфигурацию и провести систему в термодинамическое равновесие, по возможности снизив возмущения;

– построено уравнение состояния разогретого плотного водорода вдоль изотерм 700, 1000, 1500 и 2000 К. Получены метастабильные состояния молекулярной фазы для изотерм 700 и 1000 К. Их наличие указывает на то, что фазовый переход является фазовым переходом первого рода. Изотермы имеют скошенный вид с сильным перекрытием равновесных и метастабильных ветвей и сравнительно небольшой

разницей удельных объемов между ними. Вид изотерм соответствует предсказанию плазменного фазового перехода;

– предложен метод оценки концентрации и времени жизни двухатомных молекул водорода. Для анализа этих свойств молекул водорода по МД-траекториям дано формально определение “молекулы”: атомы считаются связанными, если расстояние между ними меньше некоторой наперед заданной величины r_{cut} . При этом, за время существования этой связи атомы должны хотя бы раз сблизиться на второе пороговое расстояние $r_{threshold}$;

– рассчитаны изменения концентрации, времени жизни и среднего межатомного расстояния молекул водорода при фазовом переходе. Концентрация молекул составляет 100% в непроводящей фазе и плавно уменьшается после фазового перехода с увеличением плотности. Время жизни молекул резко падает на несколько порядков во время фазового перехода. Среднее межатомное расстояние имеет небольшой, но резкий скачок на 5-8% при фазовом переходе. Эти особенности указывают на процесс резкой ионизации молекул H_2 в разогретом плотном водороде при фазовом переходе, и последующую постепенную диссоциацию.

Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:

Исследования свойств водорода в экстремальных условиях имеют фундаментальное значение. Результаты исследования находят свое применение в астрофизике. В атмосферах Сатурна и Юпитера, состоящих из водородно-гелиевой смеси, реализуются условия для фазового перехода в проводящее состояние, что связано со специфическим магнитным полем планет. Описание метастабильных состояний также поможет пониманию быстротекущих процессов с фазовым превращением.

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

Процесс металлизации водорода при больших температурах связан с родственной проблемой металлического водорода, получение которого до сих пор остается сложнейшей задачей. Потенциально, твердый метастабильный металлический водород может стать высокотемпературным сверхпроводником или быть использован как эффективное топливо.

С полученными результатами целесообразно ознакомить следующие организации: Московский государственный университет, Санкт-Петербургский государственный университет, ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН, НИЦ Курчатовский Институт, Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики и др.

Оценка достоверности результатов исследования выявила, что достоверность полученных результатов подтверждается использованием метода квантовой молекулярной динамики в рамках теории функционала плотности, который позволяет, как минимум, на качественном уровне воспроизвести ключевые физические процессы. Результаты имеют внутреннюю согласованность, а выводы позволяют объяснить наблюдаемые в ряде экспериментов явления. Рассчитанные изотермы совпадают с изотермами, рассчитанными в других молекулярно-динамических работах, а качественный вывод о характере диссоциации согласуется с выводами экспериментальных работ.

Личный вклад соискателя состоит в самостоятельной разработке и применении предлагаемых в положениях диссертации методов, а также в личном принятии участия в обработке, анализе и обсуждении результатов, полученных с помощью них.

Апробация результатов исследования проводилась на 14 российских и международных конференциях и симпозиумах. Основные публикации по выполненной работе также подготовлены при определяющем участии автора.

В ходе защиты диссертации критических замечаний высказано не было.

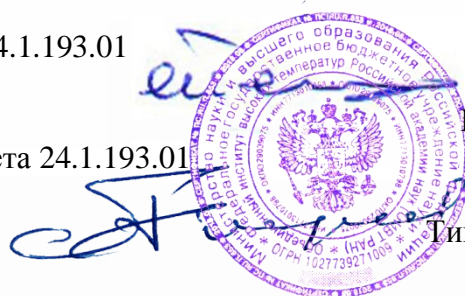
Соискатель Сартан Роман Александрович ответил на задаваемые ему в ходе заседания вопросы, привел собственную аргументацию и согласился с высказанными замечаниями.

На заседании от 28.12.2022г. диссертационный совет принял решение за исследование научной задачи, имеющей значение для развития физики плазмы, присудить Сартану Роману Александровичу ученую степень кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

При проведении тайного голосования Диссертационный совет в количестве 23 человек, из них очно: 5 докторов наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы и 5 докторов наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника, дистанционно: 4 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 23, против 0, недействительных бюллетеней - 0

Председатель диссертационного совета 24.1.193.01
академик

Ученый секретарь диссертационного совета 24.1.193.01
к.ф.-м.н.



Петров О.Ф.

Тимофеев А.В.
28.12.2022г.