

# ОТЗЫВ

г. Саров

№ \_\_\_\_\_

на автореферат диссертации  
Сайтова Ильнура Миннигазыевича  
«Образование проводящего состояния кристаллического и разогретого плотного  
водорода при сверхвысоких давлениях; первопринципное исследование»,  
представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук  
по специальности 1.3.3 «Теоретическая физика»

Диссертация посвящена развитию метода квантовой молекулярной динамики и, в основном, его применению к исследованиям экстремальных состояний вещества. Исследования в области разогретого плотного вещества при мегабарных давлениях и температурах порядка тысяч кельвинов находятся на переднем крае науки. Понимание процессов в экстремальных условиях имеет фундаментальный интерес. Этим определяется актуальность проведенных работ. Автором в рамках единого подхода рассматриваются уравнение состояния, электропроводность, коэффициент отражения, электронная и пространственная структура. Один и тот же подход используется при изучении различных веществ, таких как кристаллический и разогретый плотный водород, неидеальная плазма ксенона. Автором предложены методы, позволяющие самосогласованно описывать термодинамические, оптические и электронные свойства веществ при сверхвысоких давлениях в рамках квантовой молекулярной динамики (КМД) и теории функционала плотности (ТФП). Примененные методы ТФП и КМД позволили проводить моделирование объекта исследований, исходя из первых принципов (*ab initio*) и стали мощным, развивающимся направлением теоретической физики.

В результате выполненного цикла работ:

– выявлено образование полуметаллического состояния при сжатии молекулярного кристаллического водорода и определена область существования таких состояний на изотерме;

– исследована динамика перехода молекулярного кристаллического водорода из полуметаллического в металлическое состояние при сжатии. Показано, что этот переход является структурным;

– проведен расчет уравнения состояния, парных корреляционных функций (ПКФ) и статической электропроводности кристаллического водорода в области перехода в проводящее атомарное состояние. Показано, что переход молекулярного кристаллического водорода в атомарное состояние при сжатии является фазовым переходом первого рода;

– исследовано образование метастабильных состояний атомарного и молекулярного кристаллического водорода. Обнаружено перекрытие ветвей изотермы молекулярной и атомарной фаз кристаллического водорода, обусловленное существованием метастабильных состояний;

– предложен механизм фазового перехода флюид-флюид в разогретом плотном водороде на основе анализа результатов расчета уравнения состояния, расчета ПКФ и электропроводности. Показано, что природа фазового перехода сочетает ионизацию и изменение структуры;

– предложен метод получения метастабильных состояний в рамках ТФП и КМД. Получена метастабильная ветвь изотермы молекулярного флюида водорода;

– исследовано влияние оптической неоднородности на отражательную способность плазмы ударно сжатого ксенона.

Достоверность результатов выполненной работы подтверждается тем, что результаты численного моделирования достаточно хорошо согласуются с данными эксперимента. Результаты имеют внутреннюю согласованность, а выводы позволяют объяснить наблюдаемые в ряде экспериментов явления.

Уровень апробации работы и публикаций достаточный.

Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором. Автор принимал участие в обработке, анализе и обсуждении результатов, изложенных в настоящей работе, и в подготовке публикаций.

Из недостатков автореферата следует отметить некоторое количество опечаток, что, конечно, не снижает научную ценность проделанной работы.

Автореферат свидетельствует, что диссертация является завершенной научно-квалификационной работой, обладает научной новизной, имеет практическую ценность, соответствует пунктам 9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 №842, предъявляемого к докторским диссертациям, а её автор Саитов Ильнур Миннигазыевич, безусловно, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.3 «Теоретическая физика».

Заместитель директора ИФВ – начальник НИО-0340,  
ученый секретарь ФГУП «РФЯЦ – ВНИИЭФ»,  
кандидат физико-математических наук



А.О. Бликов