

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Саитова 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

В настоящее время изучение физических свойств водорода и его изотопов в широкой области давлений и температур вызывает большой интерес у многочисленных исследователей. Понимание процессов при мегабарных давлениях и температурах порядка тысяч кельвин важно не только для фундаментальной науки, но имеет и практический интерес с точки зрения атомистических основ свойств и процессов в материалах и рабочих телах электрохимических накопителей энергии, являющихся компонентами систем возобновляемых источников энергии. В диссертации исследуются экстремальные состояния водорода методом квантовой молекулярной динамики в рамках теории функционала плотности. Рассматриваются уравнение состояния, электропроводность, коэффициент отражения, электронная и пространственные структуры водорода. Тематика диссертации актуальна.

**Цель работы:** Самосогласованный подход для расчета равновесных, метастабильных термодинамических и структурных свойств, электропроводности, плазменной частоты и коэффициента отражения разогретого плотного водорода на основе квантовой молекулярной динамики в рамках теории функционала плотности.

В диссертации получен механизм последовательных структурных, фазовых превращений молекулярного кристаллического водорода в состояние полуметалла, а затем металла при изотермическом сжатии в области сверхвысоких давлений, а также метастабильных состояний в разогретом плотном водороде. Металлическое состояние атомарного кристаллического водорода возникает из молекулярного металлического состояния при дальнейшем изотермическом сжатии. Этот переход является фазовым переходом первого рода, в отличие от первых двух структурных переходов.

Квантовые молекулярно-динамические расчеты показали, что существуют метастабильные состояния разогретого плотного водорода в области параметров перехода в проводящее состояние. Определены области существования и структуры метастабильных состояний атомарного и молекулярного кристаллического водорода.

Фазовый переход флюида водорода в проводящее состояние имеет плазменную природу, т.к. связан с частичной ионизацией молекул водорода и существованием плазменных колебаний.

Рассчитаны электронные (электропроводность, плазменная частота), оптические (коэффициенты отражения) и термодинамические (уравнение состояния) свойства разогретого плотного водорода. Теория функционала плотности использовалась для расчета диэлектрической проницаемости, которая нужна для определения: электропроводности, плазменной частоты, коэффициента отражения.

Определены параметры образования и структуры атомарной решетки кристаллического водорода в области сверхвысоких давлений на основе расчета уравнения состояния и парной корреляционной функции.

Научная новизна и положения, выносимые на защиту в автореферате, подтверждают высокий научный уровень диссертации.

К автореферату имеются замечания:

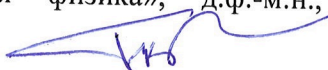
1. В автореферате нет пояснений, почему плазменный фазовый переход в разогретом плотном водороде является переходом первого рода.
2. Отсутствие списка сокращений затрудняет чтение автореферата. Ряд сокращений в автореферате приведен без пояснений, например, ПКФ –стр. 5.

Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации. Результаты диссертации опубликованы в ведущих российских и зарубежных журналах. Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на ведущих российских и международных конференциях.

Можно констатировать, что диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013 г., а ее автор Саитова Ильнур Миннигазыевич заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.3 – Теоретическая физика.

Отзыв составил:

Зав. кафедрой «Химическая физика», д.ф.-м.н., профессор НИЯУ МИФИ,  
Губин Сергей Александрович



08.11.2023

115409, г. Москва, Каширское ш., д. 31, тел.: +7(499)324-31-75, e-mail: sagubin@mephi.ru

Подпись Губина Сергея Александровича заверяю.

ПОДПИСЬ ЗАВЕРЯЮ  
ДИРЕКТОР ПО ПЕРСОНАЛУ  
НИЯУ МИФИ  
Л. В. ВАСИЛЬЧЕНКО



15409, г. Москва, Каширское ш., д. 31, тел.: +7(495)788-56-99, e-mail: sagubin@mephi.ru

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», 115409, г. Москва, Каширское ш., д. 31, тел.: +7(495)788-56-99, сайт: <https://mephi.ru>, e-mail: [info@mephi.ru](mailto:info@mephi.ru)