

ОТЗЫВ

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 (КМД) и его применению к исследованиям экстремальных состояний вещества. Автор использует единый подход для изучения таких характеристик вещества как уравнение состояния, электропроводность, коэффициент отражения. Тема диссертации, вне сомнения, является актуальной, так как метод прямого численного моделирования на основе квантовой молекулярной динамики, применяемый автором, открывает большие перспективы для получения надежной информации об уравнениях состояния, транспортных и оптических свойствах вещества с сильным межчастичным взаимодействием, где другие подходы сталкиваются со значительными, а иногда и непреодолимыми трудностями. В диссертации получены новые важные результаты, среди которых хотелось бы отметить следующие. Автором предложен комплексный метод расчета в рамках метода квантовой молекулярной динамики не только термодинамических, но электронных, оптических и структурных свойств вещества при экстремально высоких параметрах. Были исследованы термодинамические свойства сверхплотного водорода при изотермическом сжатии, получены данные по электропроводности, плазменной частоте и коэффициенту отражения сильно неидеальной плазмы ксенона. Получены результаты, на основании которых сделаны выводы о структуре водорода при субтерапаскальных давлениях.

Мне кажется важным, что в работе сделана успешная попытка на основе анализа парной корреляционной функции водорода сформулировать полученные результаты на языке, применяемые в других модельных подходах, а именно существование каких атомно-молекулярных комплексов реализуется в исследованной области фазовой диаграммы.

Можно сделать два замечания, которые, тем не менее, не меняют положительного впечатления о работе.

1. Было бы на мой взгляд уместно сопоставить полученные результаты по уравнению состояния водорода с экспериментальными данными, которых в области мегабарных и терапаскальных давлений имеется достаточно много.

2. В выводах 2 и 3 следовало бы указать не только давления, но и плотности (температуры), при которых происходят переходы в полуметаллическое и металлическое состояние.

Работа И.М. Сайтова по актуальности, научной новизне и значимости результатов исследований, степени их научной апробации и опубликования в научных журналах соответствует критериям, установленным п.п. 9-14 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» (Постановление Правительства РФ

№ 842 от 24.09.2013 г. (ред. от 11.09.2021)), предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора наук. Судя по автореферату содержание диссертации соответствует паспорту специальности 1.3.3 – теоретическая физика, а ее автор Саитов Ильнур Миннигазыевич заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук.

Согласен на включение персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Главный научный сотрудник ФИЦ ПХФ и МХ

д.ф.-м.н.

e-mail: grvk@icp.ac.ru

Грязнов Виктор Константинович

Подпись Грязнова В.К. заверяю

Ученый секретарь ФИЦ ПХФ и МХ

д.х.н.



Психа Б.Л.

27 ноября 2023 г.

Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии, 142432, Московская обл., г. Черноголовка, пр-кт акад. Семенова, д. 1, тел.: +7 (496) 522-44-74, сайт: <https://www.icp.ac.ru>, e-mail: office@icp.ac.ru