

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА 24.1.223.02, СОЗДАННОГО  
НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО  
УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ФЕДЕРАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО  
ЦЕНТРА «ИНСТИТУТ ОБЩЕЙ ФИЗИКИ ИМ. А.М. ПРОХОРОВА  
РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК» ПО ДИССЕРТАЦИИ НА  
СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ ДОКТОРА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 19 декабря 2023 г. № 269

О присуждении Саитову Ильнуру Миннигазыевичу, гражданину РФ,  
ученой степени доктора физико-математических наук.

Диссертация «Образование проводящего состояния кристаллического и разогретого плотного водорода при сверхвысоких давлениях; первопринципное исследование» по специальности 1.3.3. Теоретическая физика принята к защите «25» августа 2023 г. (протокол заседания № 262) диссертационным советом 24.1.223.02 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук (119991 Москва, ул. Вавилова, 38, приказ о возобновлении деятельности совета по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук Д 002.063.03 от 18.11.2020 г. № 683/нк).

Соискатель Саитов Ильнур Миннигазыевич 1987 года рождения. В 2010 году соискатель окончил Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)» – МФТИ (ГУ) (сейчас Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)» – МФТИ (НИУ)) по специальности «Прикладная математика и физика».

Решением диссертационного совета Д 002.110.02 при Федеральном государственном бюджетном учреждении наук Объединенном институте высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН) в 2013 году Саитову И. М. присуждена степень кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 – Физика плазмы. Тема диссертации: «Коэффициент отражения от плотной плазмы».

В настоящее время соискатель работает в должности старшего научного сотрудника в лаборатории теории неидеальной плазмы Отдела многомасштабного суперкомпьютерного моделирования Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН).

Диссертация выполнена в лаборатории теории неидеальной плазмы Отдела многомасштабного суперкомпьютерного моделирования ОИВТ РАН.

Научный консультант – доктор физико-математических наук, профессор Норман Генри Эдгарович, главный научный сотрудник Международной лаборатории суперкомпьютерного атомистического моделирования и многомасштабного анализа Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики».

Официальные оппоненты:

Титов Анатолий Владимирович, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, руководитель Отделения перспективных разработок Петербургского института ядерной физики им. Б.П. Константинова, НИЦ «Курчатовский Институт»;

Дремов Владимир Владимирович, доктор физико-математических наук, заместитель начальника Отделения теоретической физики и прикладной математики ФГУП РФЯЦ–ВНИИТФ имени академика Е.И. Забабахина;

Рыльцев Роман Евгеньевич, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории неупорядоченных систем Института металлургии УрО РАН

дали положительные отзывы о диссертации.

Ведущая организация Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН (ИФВД РАН) в своем положительном заключении, подписанном Рыжовым Валентином Николаевичем, доктором физико-математических наук, главным научным сотрудником лаборатории фазовых переходов в сильно коррелированных и неупорядоченных системах, указала, что диссертация Саитова Ильнура Минниагзыевича на тему «Образование проводящего состояния кристаллического и разогретого плотного водорода при сверхвысоких давлениях; первопринципное исследование» полностью отвечает критериям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-математических наук в соответствии с п.9 и п.13 Положения, утвержденного Правительством РФ «О присуждении ученых степеней» от 24.09.2013 г. № 842, а ее автор Саитов И.М. заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

Соискатель имеет 32 опубликованные работы, в том числе по теме диссертации опубликовано 27 работ в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК РФ.

Список наиболее значительных работ:

1. Г. Э. Норман, **И. М. Саитов**. Плазменный фазовый переход // УФН. — 2021. — Т. 191, № 11. — С. 1153–1186.
2. Г. Э. Норман, **И. М. Саитов**. Полуметаллические состояния кристаллического молекулярного водорода при высоких давлениях // Письма в ЖЭТФ. — 2020. — Т. 111, № 3. — С. 175–180.
3. **И. М. Саитов**. Моделирование ab initio динамики образования метастабильного проводящего твердого водорода // ЖЭТФ. — 2020. — Т. 157, № 3. — С. 504–512.
4. **И. М. Саитов**. Метастабильный проводящий кристаллический водород при высоких давлениях // Письма в ЖЭТФ. — 2019. — Т. 110, № 3. — С. 184–189.

5. G. E. Norman, **I. M. Saitov**, R. A. Sartan. Metastable molecular fluid hydrogen at high pressures // Contributions to Plasma Physics — 2019. — Vol. 59, no. 6. — P. e201800173.
6. G. E. Norman, **I. M. Saitov**. Plasma phase transition (by the fiftieth anniversary of the prediction) // Contributions to Plasma Physics — 2019. — Vol. 59, no. 6. — P. e201800182.
7. G. E. Norman, **I. M. Saitov**. Plasma phase transition in warm dense hydrogen // Contributions to Plasma Physics — 2018. — Vol. 58, no. 2-3. — Pp. 122–127.
8. **I. M. Saitov**. Density functional theory for dielectric properties of warm dense matter // Molecular Physics — 2016. — Vol. 114, no. 3–4. — Pp. 446–452.
9. G. E. Norman, **I. M. Saitov**. Brewster angle and reflectivity of optically nonuniform dense plasmas // Physical Review E — 2016. — Vol. 94, no. 4. — P. 043202.
10. G. Norman, **I. Saitov**, V. Stegailov, P. Zhilyaev. Ab initio calculation of shocked xenon reflectivity // Physical Review E. — 2015. — Vol. 91, no. 2. — P. 023105.

На автореферат поступило 7 отзывов:

1. Грязнов Виктор Константинович, доктор физ.-мат. наук, главный научный сотрудник лаборатории уравнений состояний вещества, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук. Отзыв положительный, есть замечания: было бы уместно сопоставить полученные результаты по уравнению состояния водорода с экспериментальными данными, которых в области мегабарных и терапаскальных давлений имеется достаточно много. В выводах 2 и 3 следовало бы указать не только давления, но и плотности (температуры), при которых происходят переходы в полуметаллическое и металлическое состояние.
2. Губин Сергей Александрович доктор физ.-мат. наук, заведующий кафедрой «Химическая физика», профессор, Федеральное государственное

автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ». Отзыв положительный, есть замечания: В автореферате нет пояснений, почему плазменный фазовый переход в разогретом плотном водороде является переходом первого рода. Отсутствие списка сокращений затрудняет чтение автореферата. Ряд сокращений в автореферате приведен без пояснений, например ПКФ – стр. 5.

3. Овчинников Сергей Геннадьевич, доктор физ.-мат. наук, профессор, заслуженный деятель науки России, руководитель научного направления «Магнетизм» Института физики им. Л.В. Киренского, Федеральный исследовательский центр «Красноярский научный центр» Сибирского отделения Российской академии наук. Отзыв положительный, есть замечания: На рис. 7 автореферата, судя по смыслу, показаны зависимости щели в спектре электронов от давления. Но об этом можно только догадываться, так как слово «Щель» в подписи отсутствует. При переходах диэлектрик–полуметалл–металл происходит появление и изменение поверхности Ферми, сопровождаемые переходами Лифшица. Их обсуждение могло бы привести соискателя к более глубокому пониманию физики изучаемых явлений.

4. Бликов Антон Олегович, кандидат физ.-мат. наук, заместитель директора Института физики взрыва, ученый секретарь Федерального государственного унитарного предприятия Российский федеральный ядерный центр Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики (ФГУП "РФЯЦ–ВНИИЭФ"). Отзыв положительный, замечаний нет.

5. Муртазаев Акай Курбанович, доктор физ.-мат. наук, член-корреспондент РАН, профессор, заведующий лабораторией вычислительной физики и физики фазовых переходов, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики Дагестанского федерального

исследовательского центра (ДФИЦ РАН). Отзыв положительный, замечаний нет.

6. Стрельцов Сергей Владимирович, доктор физ.-мат. наук, профессор РАН, член-корреспондент РАН, главный научный сотрудник, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики металлов имени М.Н. Михеева Уральского отделения Российской академии наук (ИФМ УрО РАН). Отзыв положительный, замечаний нет.

7. Успенский Юрий Алексеевич, доктор физ.-мат. наук, главный научный сотрудник, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук (ФИАН). Отзыв положительный, замечаний нет.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается высокой степенью их компетентности в вопросах теоретической физики и, в особенности, теоретических подходов для описания свойств веществ в экстремальных состояниях, включая сверхвысокие давления, и широко известными достижениями в соответствующей области науки, что позволяет им подтвердить достоверность полученных результатов, а также оценить научно-практическую значимость рассматриваемой в диссертации проблемы.

Диссертационный совет отмечает, что на основании выполненных соискателем исследований предложен метод расчета в рамках квантовой молекулярной динамики термодинамических структурных, электронных и оптических свойств веществ при сверхвысоких давлениях. Уравнение состояния рассчитывается с учетом метастабильных состояний. Установлено, что переход диэлектрического молекулярного кристаллического водорода в металлическое состояние при сжатии происходит через образование полуметаллического состояния. Установлено, что образование атомарного кристалла водорода является фазовым переходом первого рода. В возникающей при этом структуре ближайшее расстояние между протонами равно  $0.92 \text{ \AA}$ , как в кластере  $\text{H}_3^+$ . Обнаружен гистерезис зависимости

давления от плотности: перекрытие ветвей изотермы 100 К молекулярной и атомарной фазы соответствует области существования метастабильных состояний. Продемонстрирована возможность существования атомарного кристаллического водорода в метастабильном состоянии при уменьшении давления. Установлено, что при образовании проводящей фазы флюида водорода резко уменьшается количество молекул и взамен возникают протонные комплексы с межатомными расстояниями, как в ионах  $\text{H}_2^+$  и  $\text{H}_3^+$ . Метастабильные состояния флюида водорода получены для изотерм 700 и 1000 К. Обнаружено резкое возрастание электропроводности и плазменной частоты вдоль изотерм. Таким образом, доказано, что фазовый переход имеет электронную природу и связан с частичной ионизацией молекул водорода, что прямо указывает на механизм плазменного фазового перехода. Исследованы оптические свойства плазмы ударно сжатого ксенона. Показано, что учет неоднородности фронта ударной волны улучшает согласие с экспериментом.

Теоретическая значимость исследования определяется тем, что свойства экстремальных состояний вещества слабо изучены. Водород – простейший химический элемент, однако данные для него при высоких давлениях очень противоречивы. Результаты расчетов, полученные в работе, позволяют прояснить механизм образования проводящего состояния водорода.

Научная новизна диссертации заключается в следующем. Выявлено образование полуметаллического состояния при сжатии молекулярного кристаллического водорода и определена область существования таких состояний на изотерме. Обнаружено перекрытие ветвей изотермы молекулярной и атомарной фаз кристаллического водорода, обусловленное существованием метастабильных состояний. Предложен метод получения метастабильных состояний и получена метастабильная ветвь изотермы молекулярного флюида водорода. Показано, что механизм образования проводящего флюида водорода связан с плазменным фазовым переходом.

Значение полученных соискателем результатов исследования для практики обусловлено тем, что свойства экстремальных состояний вещества определяют структуру, эволюцию и светимость звезд и больших планет. Для моделирования данных астрофизических объектов необходим точный расчет уравнения состояния. В земных условиях экстремальные состояния вещества возникают в некоторых новых мощных энергетических установках. В работе развит подход для расчета равновесных и метастабильных термодинамических и структурных свойств, электропроводности, плазменной частоты и коэффициента отражения веществ при сверхвысоких давлениях.

Оценка достоверности результатов. Результаты расчета исследованы на сходимость по параметрам используемой модели, что обуславливает их достоверность. Электронные свойства и уравнение состояния определяются распределением электронной плотности, что указывает на их согласованность. Полученные результаты достаточно хорошо согласуются с экспериментом.

Личный вклад соискателя. Все основные результаты диссертации были получены лично соискателем или при его непосредственном участии. Соискатель принимал участие в подготовке и написании публикаций.

Соискатель Саитов И.М. ответил на задаваемые ему в ходе заседания вопросы и привел собственную аргументацию.

На заседании 19 декабря 2023 г. диссертационный совет принял решение присудить Саитову И.М. ученую степень доктора физико-математических наук за разработку теоретических положений, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение, которое позволяет прояснить механизм образования проводящего состояния водорода в области сверхвысоких давлений.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 20 человек, из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 24 человек,



входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту «0» человек, проголосовали: за «20», против «нет», недействительных бюллетеней «нет».

Председатель диссертационного совета  
академик РАН



И.А. Щербаков

Ученый секретарь диссертационного совета  
канд. физ.-мат. наук

Т.Б. Воляк

20 декабря 2023 г.