

УТВЕРЖДАЮ

Директор ОИВТ РАН

академик РАН Петров О.Ф.

1 октября 2024 г.



ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Объединенный институт высоких температур Российской академии наук
(ОИВТ РАН)

Диссертация «Модель поведения экситонов в плотных молекулярных флюидах H_2 и N_2 на основе первопринципной молекулярной динамики для описания экспериментов по их импульсному нагреву» выполнена в лаборатории 14.2 теории конденсированного состояния в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук.

В период подготовки диссертации с 2020 г. по настоящее время соискатель Федоров Илья Дмитриевич работал в лаборатории 14.2 теории конденсированного состояния Объединенного института высоких температур РАН в должности младшего научного сотрудника и научного сотрудника.

В 2020 г. Федоров И.Д. окончил федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)» по направлению подготовки 03.04.01 Прикладные математика и физика. В 2024 г. окончил очную аспирантуру МФТИ по направлению подготовки 03.06.01 Физика и астрономия.

Удостоверение о сдаче кандидатских экзаменов выдано в 2024 г. федеральным государственным автономным образовательным учреждением высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)».

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, доцент Стегайлов Владимир Владимирович. Основное место работы – Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук, отдел №14 многомасштабного суперкомпьютерного моделирования, главный научный сотрудник, заведующий отделом.

По итогам обсуждения диссертации «Модель поведения экситонов в плотных молекулярных флюидах H_2 и N_2 на основе первопринципной молекулярной динамики для описания экспериментов по их импульсному нагреву» принято следующее заключение:

Тема диссертации является актуальной для объяснения описания экспериментов по импульсному нагреву плотных флюидов водорода и азота. В настоящее время нет общепризнанной модели перехода, способной объяснить противоречия в результатах подобных экспериментов, а также отличия наблюдений для флюидов водорода и азота. Актуальность исследования подтверждается большим количеством экспериментальных и теоретических работ по теме за последние 10 лет.

Цели и задачи диссертации:

1. Исследовать возможности электронных возбуждений в молекулярной фазе плотного флюида водорода и азота, используя методы первопринципной молекулярной динамики.
2. Разработать подход к анализу возбужденного состояния в плотном флюиде водорода и азота.
3. Исследовать влияние электронных возбуждений на переход из непроводящего молекулярного состояния в плазму в плотном флюиде водорода.
4. Исследовать влияние электронных возбуждений на формирование цепочечных структур в плотном флюиде азота.

Основные результаты диссертации:

1. Показана возможность существования возбужденных состояний электронов (электрон-дырочных пар, экситонов) в молекулярных фазах флюидного водорода и азота.
2. Разработана методика описания экситонов в плотных флюидах водорода и азота в рамках ограниченного метода Кона-Шэма с открытыми оболочками на основе максимально локализованных функций Ванье, а также метод определения параметров флюида, соответствующих возможности спонтанной диссоциации экситонов.
3. Предложен пороговый механизм перехода плотного флюида водорода из непроводящего молекулярного состояния в плазму, первый этап которого заключается в диссоциации электрон-дырочной пары. Соответствующие результаты расчетов для флюида водорода находятся в согласии с систематизированными данными экспериментальных работ для давлений 70-220 ГПа и температур 900-2500 К.
4. Предложен экситонный механизм, объясняющий плато температуры и рост оптического поглощения, наблюдаемые при нагреве флюида азота в алмазных наковальнях при давлениях 20-60 ГПа и температурах 5000-8000 К.

Все представленные в диссертации результаты получены лично соискателем. Постановка задач, вошедших в диссертационную работу, выполнена под руководством В. В. Стегайлова. Методика расчета электронной температуры в рамках модели electron Force Field была развита совместно с Н. Д. Ореховым. Выводы и положения, выносимые на защиту, сформулированы лично автором при участии научного руководителя.

Научная новизна работы заключается в том, что

1. Впервые показана возможность существования возбужденных состояний электронов (экситонов) в молекулярных фазах флюидного водорода и азота.
2. Впервые разработана методика в рамках ограниченного метода Кона-Шэма с открытыми оболочками с использованием максимально локализованных функций Ванье для описания экситонов и определения параметров флюида, соответствующих возможности их спонтанной диссоциации.

3. Впервые предложен пороговый механизм перехода плотного флюида водорода из непроводящего молекулярного состояния в плазму, первый этап которого заключается в диссоциации электрон-дырочной пары.
4. Впервые предложена модель полимеризации в плотном флюиде азота, ускоряемой появлением экситонов при повышении вероятности их термического возбуждения.

Обоснованность и достоверность результатов и выводов: Проведенная работа прошла апробацию на множестве российских и международных конференций. Статьи опубликованы в рецензируемых журналах из списка ВАК. Полученные результаты находятся в согласии с экспериментальными данными.

Статьи соискателя, в которых опубликованы материалы диссертации:

1. Fedorov I.D., Orekhov N.D., Stegailov V.V. Nonadiabatic effects and excitonlike states during the insulator-to-metal transition in warm dense hydrogen // *Physical Review B*. – 2020. – Т. 101. – №. 10. – С. 100101. – URL: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.100101>
2. Fedorov I.D., Stegailov V.V. Exciton Nature of Plasma Phase Transition in Warm Dense Fluid Hydrogen: ROKS Simulation // *ChemPhysChem*. – 2023. – Т. 24. – №. 6. – С. e202200730. – URL: <https://doi.org/10.1002/cphc.202200730>
3. Федоров И.Д., Стегайлов В.В. Диссоциация экситонных состояний в разогретом плотном водороде // *Письма в ЖЭТФ*. – 2021. – Т. 113. – №. 6. – С. 392-398. – URL: <https://doi.org/10.31857/S1234567821060070>
4. Fedorov I.D., Stegailov V.V. First-principles molecular dynamics of exciton-driven initial stage of plasma phase transition in warm dense molecular nitrogen // *J. Chem. Phys.* – 2024. – URL: <https://doi.org/10.1063/5.0233822>

Основные положения диссертации были доложены и обсуждены на различных российских и международных научных конференциях, среди которых можно указать Международные конференции «International Conference on Equations of State for Matter» (Приэльбрусье, 2018, 2022), Международные конференции «International Conference on Interaction of Intense Energy Fluxes with Matter» (Приэльбрусье, 2019, 2021), Международные семинары «Non-Ideal Plasma Physics» (Москва, 2018, 2020, 2021, 2022, 2023), Всероссийские конференции «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений» (Сочи, Буревестник, 2020, 2021, 2022, 2024), а также следующие международные научные конференции:

1. 16th International Conference on the Physics of Non-Ideal Plasmas (PNP16); Доклад: Wave packet molecular dynamics study of the plasma phase transition in warm dense hydrogen; Авторы: Федоров И.Д., Стегайлов В.В., Орехов Н.Д.; Место: Франция, Сен-Мало; Даты: 23.09.2018 - 29.09.2018
2. 40th International Workshop on High Energy Density Physics with Intense Ion and Laser Beams; Доклад: Ab-initio Methods for Modelling and Simulation of Warm-dense Hydrogen: How to Get Beyond Born-Oppenheimer Approximation?; Авторы: Федоров И.Д., Стегайлов В.В., Орехов Н.Д.; Место: Австрия, Хиршег; Даты: 26.01.2020 - 01.01.2020
3. 41st Workshop on High-Energy-Density Physics with laser and Ion beams; Доклад: Exciton Dissociation in Warm Dense Hydrogen; Авторы: Федоров И.Д., Стегайлов В.В.; Место: Австрия, Хиршег; Даты: 01.02.2021 - 05.02.2021
4. 42nd Workshop on High-Energy-Density Physics with laser and Ion beams; Доклад: Exciton Mechanism as a Physics Model of Warm Dense Hydrogen Metallization;

Авторы: Федоров И.Д., Стегайлов В.В.; Место: Австрия, Хиршег; Даты: 31.01.2022 - 04.02.2022

5. 11th International Workshop on Warm Dense Matter 2023. Доклад: Kinetics of plasma phase transition in dense fluid H_2 : analysis based on first-principles molecular dynamics. Авторы: Федоров И.Д., Стегайлов В.В. Место: Япония, Осака. Даты: 25.06.2023 - 01.07.2023
6. Международный научный семинар «Complex Systems of Charged Particles and Their Interactions with Electromagnetic Radiation». Доклад: Excitonic nature of plasma phase transition kinetics in dense molecular fluids. Авторы: Федоров И.Д., Стегайлов В.В. Место: Россия, Москва. Даты: 08.04.2024 - 12.04.2024
7. XXXV IUPAP Conference on Computational Physics. Доклад: First-Principles Molecular Dynamic of Exciton Dissociation as a Key Mechanism of Plasma Phase Transition in Dense Fluid Nitrogen. Авторы: Федоров И.Д., Стегайлов В.В. Место: Греция, Салоники. Даты: 07.07.2024 - 12.07.2024

Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 1.3.8 Физика конденсированного состояния, в частности, пунктам:

- п. 2 – Теоретическое и экспериментальное исследование физических свойств упорядоченных и неупорядоченных неорганических и органических систем, включая классические и квантовые жидкости, стекла различной природы, дисперсные и квантовые системы, системы пониженной размерности.
- п. 3 – Теоретическое и экспериментальное изучение свойств конденсированных веществ в экстремальном состоянии (сильное сжатие, ударные воздействия, сильные магнитные поля, изменение гравитационных полей, низкие и высокие температуры), фазовых переходов в них и их фазовых диаграмм состояния.
- п. 5 – Разработка математических моделей построения фазовых диаграмм состояния и прогнозирование изменения физических свойств конденсированных веществ в зависимости от внешних условий их нахождения.

Диссертация «Модель поведения экситонов в плотных молекулярных флюидах H_2 и N_2 на основе первопринципной молекулярной динамики для описания экспериментов по их импульсному нагреву» Федорова Ильи Дмитриевича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 Физика конденсированного состояния.

Заключение принято на семинаре Отдела №14 многомасштабного суперкомпьютерного моделирования Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный институт высоких температур Российской академии наук. Присутствовало на заседании 12 человек. Результаты голосования: «за» – 12 чел., «против» – нет, «воздержались» – нет, протокол №1 от 27 сентября 2024 года.

Руководитель семинара отдела №14
д.ф.-м.н., профессор,
главный научный сотрудник лаб. 14.1



Норман Генри Эдгарович