

ОТЗЫВ

научного руководителя Стегайлова Владимира Владимировича на диссертационную работу Федорова Ильи Дмитриевича «Модель поведения экситонов в плотных молекулярных флюидах H_2 и N_2 на основе первопринципной молекулярной динамики для описания экспериментов по их импульсному нагреву», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

С Ильей Федоровым я познакомился весной 2017 года, когда Илья, будучи студентом третьего курса МФТИ, проявил желание участвовать в научно-исследовательском проекте. Для подготовки бакалаврского диплома Илья выбрал Образовательную программу «Вычислительная физика конденсированного состояния и живых систем» ЛФИ МФТИ. Уже во время подготовки бакалаврского диплома под моим руководством Илья показал себя как инициативный и целеустремленный студент, владеющий очень широким спектром компьютерных и вычислительных технологий, используя которые, он смог успешно решить стоящие перед ним сложные теоретические и вычислительные задачи.

Задача, стоящая перед Ильей, состояла в построении в рамках первопринципной молекулярной динамики модели, которая могла бы описать начальную стадию перехода молекулярного флюида водорода в плазму при сверхбыстром нагреве и/или сжатии. В своей работе Илья сочетал различные теоретические подходы (метод волновых пакетов и теорию функционала электронной плотности в различных приближениях) и использовал различные программные инструменты (LAMMPS, CPMD, CP2K, VASP и др.). Большого внимания и вдумчивости требовала интерпретация результатов моделирования, требующая анализа границ применимости стандартных методов первопринципных расчетов. Не менее важным элементом работы Ильи был анализ и систематизация многочисленных экспериментальных данных, в которых детектировались признаки перехода молекулярного флюида водорода в плазму.

В результате филигранного вычислительного исследования Ильей были получены данные, на основе которых была сформулирована модель экситона в плотном флюиде водорода. Анализ полученных результатов расчетов позволил сформулировать кинетический механизм перехода молекулярного флюида водорода в плазму.

Попытка перенести развитый подход на плотный флюид азота оказалась сопряжена со значительными методическими и вычислительными трудностями, в том числе с необходимостью перекрестной проверки работоспособности существующих кодов. Илья блестяще справился с данной задачей и, в частности, выявил существующие проблемы с расчетом функций Ванье в рамках метода ROKS в CP2K.

Таким образом, диссертация Ильи является примером использования самых современных методов расчета свойств вещества из первых принципов, согласованное сочетание которых позволило получить результаты, раскрывающие физические механизмы рассматриваемых явлений и дать согласованное объяснение большому числу экспериментальных наблюдений.

В настоящий момент Федоров И. Д. является научным сотрудником Объединенного института высоких температур РАН, ведет активную преподавательскую деятельность в МФТИ и НИУ ВШЭ. За время своей работы Илья участвовал в качестве исполнителя в грантах РНФ и РФФИ/РЦИ, а также в выполнении других проектов в области суперкомпьютерного математического моделирования.

Основные результаты по тематике диссертации опубликованы в 4 статьях в рецензируемых журналах, входящих в список ВАК (а также в базы цитирования Web of Science и Scopus), и докладывались более, чем на 30 российских и международных конференциях.

Уровень квалификации Федорова И. Д. и накопленный им опыт полностью соответствуют требованиям, предъявляемым к соискателям ученой степени кандидата физико-математических наук. Диссертация представляет собой законченное научное исследование, соответствует требованиям ВАК, а Федоров И. Д. достоин присуждения степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.8 – физика конденсированного состояния.

Я, Стегайлов Владимир Владимирович, даю согласие на использование моих персональных данных в документах, связанных с защитой диссертации Федорова И. Д., и их дальнейшей обработкой.

Научный руководитель

Заведующий отделом 14 многомасштабного суперкомпьютерного моделирования
Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенный
институт высоких температур Российской академии наук (ОИВТ РАН)
д.ф.-м.н.

В. В. Стегайлов

Почтовый адрес: 125412, г. Москва, ул. Ижорская, д.13, стр.2.

Рабочий телефон: 8 (495) 485-85-45

Адрес электронной почты: stegailov@jiht.ru

01.10.2024



Подпись Стегайлова Владимира
Владимировича удостоверяю

Ведущий инженер
отдела кадров



Морозова И.А.