

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Левашова Павла Ремировича «Квантово-статистический расчет теплофизических свойств веществ для интерпретации ударно-волновых экспериментов и численного моделирования воздействия лазерных импульсов на вещество», представленной на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.14 – «теплофизика и теоретическая теплотехника».

Диссертация посвящена разработке и применению квантово-статистических подходов для расчета теплофизических свойств конденсированных веществ. Тема, несомненно, является актуальной: аналитические методы для получения уравнений состояния, транспортных и оптических свойств вещества с сильным межчастичным взаимодействием зачастую встречаются с практически непреодолимыми трудностями, а имеющихся экспериментальных данных в подавляющем большинстве случаев недостаточно для построения надежных моделей теплофизических свойств. Автор использует в работе широкий спектр моделей: от относительно простой квазиклассической модели Томаса-Ферми до сложного многочастичного метода Монте-Карло с использованием формулировки квантовой механики на основе интегралов по траекториям. В диссертации получено значительное количество новых важных результатов, из которых хотелось бы отметить следующие. Во-первых, была разработана полная термодинамическая модель Томаса-Ферми при конечной температуре для смеси веществ, включающая расчет вторых производных термодинамического потенциала с заданной точностью и аккуратное выделение тепловой части термодинамических функций. Важно, что модель доведена до практической реализации в виде общедоступной программы с удобным интерфейсом. Во-вторых, с помощью квазигармонического приближения и критерия Линдемана были рассчитаны кривые плавления металлов с нагретыми электронами. Этот результат важен для интерпретации экспериментов по взаимодействию фемтосекундных лазерных импульсов с металлическими мишенями. Одним из наиболее важных результатов диссертации является теоретическое описание всех типов ударно-волновых экспериментов для алюминия. В диссертации убедительно продемонстрировано, что метод квантовой молекулярной динамики позволяет достичь согласия с экспериментом в области жидкого состояния и плотной плазмы. Это, в свою очередь, открывает возможности для получения новых данных по теплофизическим свойствам веществ в областях, труднодоступных для экспериментального изучения. Важное значение имеют и новые данные, полученные автором с помощью формулы Кубо-Гринвуда для транспортных свойств плотной плазмы алюминия и пластика эффективного состава CH_2 , в том числе в двухтемпературном приближении.


Надо отметить и проведенное в работе важное методическое исследование, касающееся применения полноэлектронного и псевдопотенциального вариантов метода функционала плотности на примере вольфрама с выделением электронов внешних 5d и 6s оболочек.

Работа Левашова П.Р. 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 уче-

ной степени доктора наук. Содержание диссертации соответствует паспорту специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника, а ее автор Левашов Павел Ремирович 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
чл.-корр. РАН, д.ф.-м.н.
e-mail: minvb@icp.ac.ru



Минцев Виктор Борисович

Подпись Минцева В.Б. заверяю

Ученый секретарь ФИЦ ПХФ и МХ
д.х.н.



Психа Б.Л.

24 октября 2022 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