

ОТЗЫВ

официального оппонента

на диссертационную работу Левашова Павла Ремировича

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

Диссертация Левашова П.Р. посвящена развитию ряда квантово-статистических подходов для расчетов термодинамических, переносных и оптических веществ. Большое внимание уделяется также применению квантово-статистических подходов для решения фундаментальных и прикладных задач. В работе используются как традиционные и хорошо изученные подходы, такие как метод Томаса-Ферми и метод функционала плотности, так и сложный многочастичный метод Монте-Карло с интегралами по траекториям, применяемый пока лишь для модельных систем или для самых легких элементов. В диссертации получено много интересных результатов, среди которых можно отметить методику расчета вторых производных термодинамического потенциала для модели Томаса-Ферми, моделирование кривых плавления металлов, в том числе в зависимости от температуры электронов, моделирование ударно-волновых экспериментов для различных веществ, расчеты переносных свойств. Созданные в работе модели теплофизических свойств были использованы для решения практической задачи уменьшения влияния предимпульса мощного лазерного импульса на металлическую мишень.

Актуальность работы. Теплофизические свойства веществ играют большую роль для решения широкого круга фундаментальных и прикладных задач. Проблемы физики конденсированного состояния, физики плазмы, физики ударных и детонационных волн, технические вопросы традиционной и ядерной энергетики, обработки материалов, воздействия электромагнитного излучения и корпускулярных потоков частиц на вещество, изучение различных процессов в геологии и астрофизике требуют знания термодинамических, транспортных и оптических свойств веществ в широком диапазоне температур и давлений. Экспериментальные подходы для измерения теплофизических свойств имеют ряд ограничений, поэтому особое значение приобретают методы компьютерного моделирования и, в частности, первопринципные квантово-статистические расчеты, используемые в диссертации. Первопринципные расчеты полностью основаны на теоретических представлениях и не требуют привлечения экспериментальных данных. Это открывает новые возможности для создания широкодиапазонных моделей, которые затем могут использоваться в численном моделировании, в частности, для изучения процесса воздействия лазерных импульсов на вещество.

Научная новизна работы определяется применением квантово-статистических подходов для решения новых задач теплофизики, а также получением новых данных по теплофизическим свойствам конденсированных веществ с помощью этих подходов. В частности, разработан новый метод расчета вторых производных термодинамического потенциала ко-

нечно-температурной модели Томаса-Ферми, построены новые полуэмпирические уравнения состояния металлов с тепловым вкладом электронной подсистемы по модели Томаса-Ферми, выполнен расчет кривых плавления металлов с нагретой электронной подсистемой, впервые получено теоретическое описание всех типов ударно-волновых экспериментов для алюминия, выявлены особенности транспортных свойств плотной плазмы алюминия и плазмы эффективного состава CH_2 в двухтемпературном приближении.

Теоретическая и практическая значимость работы. В работе разработаны новые теоретические подходы для расчетов термодинамических свойств конечно-температурной модели Томаса-Ферми для одного атома и для смеси элементов; расчетов кривых плавления на основе квазигармонического приближения и критерия Линдемана, в том числе для кристаллов с нагретыми электронами; предложены и обоснованы критерии применимости псевдопотенциалов в методе квантовой молекулярной динамики; выполнена теоретическая интерпретация ударно-волновых экспериментов для алюминия. В диссертации получены и важные практические результаты: разработан компьютерный код для расчетов таблиц термодинамических функций электронов для модели Томаса-Ферми, а также параллельный код для вычисления транспортных свойств по формуле Кубо-Гринвуда; создан новый класс полуэмпирических уравнений состояния для металлов; получены новые данные по термодинамическим и транспортным свойствам для ряда веществ в конденсированном состоянии; численно изучена проблема подавления предимпульса лазерного импульса с помощью тонкой пленки, установленной перед мишенью.

В диссертации получен ряд важных результатов, среди которых хотелось бы отметить два наиболее ярких. Во-первых, это использование модели Томаса-Ферми для учета теплового вклада электронов в уравнение состояния. Чаще всего при описании электронной подсистемы применяют модель идеального Ферми-газа, в которой пренебрегается взаимодействием электронов. В диссертации полностью решена проблема вычисления термодинамических функций по модели Томаса-Ферми с заданной точностью, а также аккуратно выделен тепловой вклад электронов. В результате получены новые широкодиапазонные уравнения состояния металлов, применимые от нормальных условий и значительно более точно описывающие свойства электронной подсистемы. Во-вторых, впервые была проведена теоретическая интерпретация всех типов ударно-волновых экспериментов для алюминия без привлечения эмпирической информации. Следует отметить, что для решения этой задачи было необходимо учесть ряд физических эффектов: взаимодействие между всеми типами частиц, вырождение электронной подсистемы, обменные и корреляционные эффекты, а также особенности электронной структуры твердого и жидкого алюминия. В диссертации убедительно продемонстрировано, что метод квантовой молекулярной динамики при правильном применении адекватно учитывает все эти эффекты и обеспечивает хорошее согласие с экспериментальными данными.

Объем и структура работы. Диссертационная работа состоит из 271 страницы и содержит введение, 8 глав, заключение и три приложения. Каждая глава завершается выводами и ссылками на источники, в которых опубликованы результаты.

Во введении сформулированы актуальность, цели работы, научная новизна, научная и практическая значимость задач, решаемых в диссертации. Введение также содержит все остальные необходимые формальные разделы.

Первая глава посвящена рассмотрению общих вопросов квантовой статистической физики, а также обзору квантово-статистических методов расчета, использованных в работе. Изложены модель идеального газа, конечно-температурная модель Томаса-Ферми, метод Монте-Карло с интегралами по траекториям, метод функционала плотности и метод квантовой молекулярной динамики.

Во второй главе подробно рассмотрена модель Томаса-Ферми при конечной температуре как для одного атома, так и для смеси элементов. Сформулирована постановка задачи и выведены формулы для вычисления термодинамических функций модели. Особое внимание уделено выделению тепловой части модели и обеспечению заданной точности расчетов. Приведены примеры расчетов в широком диапазоне параметров. В главе также описана программа TFMix для вычисления термодинамических функций электронов для смеси элементов, а описание графического интерфейса программы помещено в приложение А.

В третьей главе сформулированы две полуэмпирические модели уравнений состояния с тепловым вкладом электронов по модели Томаса-Ферми. Получены уравнения состояния для пяти металлов, для которых использовались полуэмпирические выражения для холодной кривой и теплового вклада атомов и ионов. Неизвестные параметры модели определялись путем сравнения с экспериментальными данными. Продемонстрировано хорошее качество описания экспериментальных данных по ударному сжатию сплошных и пористых образцов, изэнтропическому расширению и измерению скорости звука за фронтом ударной волны. Коэффициенты уравнений состояния приведены в приложении Б.

Четвертая глава посвящена изложению и применению метода Монте-Карло с интегралами по траекториям. В главе изложена математическая формулировка метода, основанная на операторном тождестве для матрицы плотности, а также алгоритм моделирования термодинамических свойств. В качестве примера применения метода в главе рассмотрена водородно-гелиевая плазма с различными массовыми концентрациями гелия. Давление и энергия плазмы сравнивались с химической моделью в области ее применимости. Также в главе обсуждаются области плохой сходимости к равновесному состоянию, возникающие при относительно низких температурах, а также связь этих областей с теоретическими предсказаниями гипотетического плазменного фазового перехода.

В пятой главе рассмотрен метод функционала плотности и квантовой молекулярной динамики. Существенная часть материала главы посвящена исследованию области применимости псевдопотенциалов, используемых в методе функционала плотности. Для учета колебаний ионов в кристаллической фазе металлов привлекается квазигармоническое приближение, с помощью которого рассчитывается фононный спектр, плотность фононных состояний и среднеквадратичное смещение ионов от положения равновесия. На основе критерия Линдемана восстанавливается зависимость температуры плавления от давления для алюминия, меди и никеля. Заслуживают внимания зависимости температуры плавления этих же металлов от электронной температуры, полученные впервые.

Шестая глава посвящена моделированию ударно-волновых экспериментов для алюминия, дейтерия и дейтерида лития с помощью метода квантовой молекулярной динамики. Обсуждаются методика и результаты расчетов ударных адиабат сплошных и пористых образцов, изэнтроп сжатия и разгрузки, ударных адиабат двукратного сжатия и скорости

звука в ударно-сжатом веществе, которые согласуются с данными экспериментов и расчетами других авторов. Для алюминия воспроизведены все типы ударно-волновых экспериментов и проведено обсуждение расхождения с экспериментальными данными по изотропической разгрузке в воздух при высоких скоростях расширения. Для дейтерия продемонстрировано отсутствие особенностей на изотропе сжатия. Для дейтерида лития обсуждается влияние учета различного числа валентных электронов на ударную адиабату. Также в этой главе сформулирован критерий применимости псевдопотенциалов в методе квантовой молекулярной динамики. Результаты расчетов для алюминия и дейтерида лития приведены в приложении В.

В седьмой главе обсуждается расчет электронных транспортных и оптических свойств на основе метода квантовой молекулярной динамики и формулы Кубо-Гринвуда. Следует отметить, что на сегодняшний день это единственный надежный способ получения информации об электронных транспортных свойствах в жидких металлах и плотной плазме в условиях, недоступных для эксперимента. Подробно описана теоретическая часть расчета, проведено исследование сходимости в зависимости от параметров моделирования. Получены новые данные по электропроводности и теплопроводности алюминия и пластика эффективного состава CH_2 , в том числе при различных температурах электронов и ионов. Следует отметить сложную нелинейную зависимость статической электропроводности плазмы CH_2 в зависимости от температуры.

В восьмой главе диссертации рассчитанные теплофизические свойства различных материалов используются для моделирования уменьшения влияния предимпульса мощного лазерного импульса с помощью тонкой пленки, установленной перед мишенью из серебра. Использовалась двухтемпературная одножидкостная гидродинамическая модель с учетом переноса излучения в диффузионном приближении. Для замыкания системы уравнений использовались двухтемпературные уравнения состояния, аппроксимационные зависимости комплексной диэлектрической проницаемости от частоты, плотности и двух температур, а также коэффициент электрон-ионного взаимодействия. В расчете убедительно показано, что после облучения пленки предимпульсом возникает радиационный поток на мишень, зависящий от толщины материала пленки. В случае алюминия радиационный поток на мишень оказывается примерно в 10 раз выше, чем в случае пластиковой пленки из CH_2 . Таким образом, использование пленки из алюминия приводит к существенному нагреву и деформации мишени радиационным потоком от предимпульса. Этого не происходит для пленки из CH_2 .

В заключении перечислены основные результаты, полученные в диссертации, и сформулированы задачи для будущих исследований.

К изложению материала в диссертации имеется ряд **замечаний**.

1. В конце разделов 3.2 и 3.3 указано, что пять неизвестных коэффициентов моделей уравнений состояния определялись из условия наилучшего соответствия ударно-волновым экспериментальным данным. Однако процедура определения параметров в тексте диссертации не описана. Также ничего не сказано о погрешности коэффициентов уравнения состояния.

2. В главе 7 приводятся результаты расчетов статической электропроводности для плотной плазмы алюминия и пластика эффективного состава CH_2 . Важной характеристикой таких расчетов является средний заряд плазмы, фигурирующий во многих кинетических моделях транспортных свойств. Автору диссертации следовало бы обсудить вопрос о среднем заряде плазмы хотя бы для целей сравнения результатов моделирования с менее совершенными моделями.
3. Отметим, что книге В.П. Копышева «Теория уравнений состояния» Саров 2009 год дано описание моделей уравнений состояния (УРС) «с целью иллюстрации методов конструирования УРС», включая модель Томаса-Ферми, параграф 4.9, с выводом термодинамических свойств вещества, с использованием выражений для большого потенциала и гамильтониана.

Однако указанные замечания не снижают общей положительной оценки диссертационной работы Левашова П.Р. Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации.

Результаты диссертации опубликованы в двадцати пяти рекомендованных ВАК статьях в ведущих российских и зарубежных журналах. Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на многочисленных ведущих российских и международных конференциях. Постановка всех задач, анализ результатов и выводы были сделаны непосредственно автором работы.

Таким образом, можно констатировать, что диссертация Левашова П.Р. представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013 г., а ее автор Левашов Павел Ремирович заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника.

Отзыв составил:

Профессор кафедры химической
физики НИЯУ МИФИ,
д.ф.-м.н.



Губин Сергей Александрович

115409, г. Москва, Каширское ш., д. 31, тел.: +7(499)324-31-75, e-mail: sagubin@mephi.ru

Подпись Губина Сергея Александровича заверяю



Подпись удостоверяю
Заместитель начальника отдела
документационного обеспечения
НИЯУ МИФИ

В. М. Самаров

115409, г. Москва, Каширское ш., д. 31, тел.: +7(495)788-56-99, e-mail: info@mephi.ru

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», 115409, г. Москва, Каширское ш., д. 31, тел.: +7(495)788-56-99, сайт: <https://mephi.ru>, e-mail: info@mephi.ru