

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

Расчет теплофизических свойств конденсированного вещества представляет собой чрезвычайно сложную научную проблему, для решения которой необходимо привлекать квантово-статистические подходы и современные параллельные алгоритмы для моделирования на суперкомпьютерах. В диссертации Левашова П.Р. рассматриваются так называемые первопринципные методы, основанные на строгих физических принципах: метод Томаса-Ферми, метод функционала плотности, метод квантовой молекулярной динамики и метод Монте-Карло с интегралами по траекториям. Для проведения расчетов по этим методам не требуется эмпирическая информация, за исключением заряда и массы ядер элементов и фундаментальных физических констант. Это позволяет получать надежные теплофизические данные в области применимости методов. Автор диссертации разработаны новые подходы в теории Томаса-Ферми, созданы широкодиапазонные уравнения состояния металлов, проведены расчеты термодинамических, транспортных и оптических свойств ряда веществ, продемонстрирована возможность использования рассчитанных теплофизических свойств в континуальном моделировании практических задач. **Актуальность** работы не вызывает сомнений, так как надежные экспериментальные данные по теплофизическим свойствам веществ в конденсированном состоянии доступны лишь для некоторых веществ, а в обширных областях фазовой диаграммы и вовсе отсутствуют. Квантово-статистическое моделирование является, на сегодняшний день, единственным подходом, позволяющим заполнить эти пробелы.

Степень научной новизны. В диссертации получен ряд новых научных результатов. В частности, разработана процедура расчета вторых производных термодинамического потенциала конечно-температурной модели Томаса-Ферми с заданной точностью как для одного атома, так и для смеси элементов. Также следует отметить метод выделения тепловой части модели Томаса-Ферми, что весьма важно для построения широкодиапазонных уравнений состояния. Продemonстрировано, что температура плавления некоторых металлических кристаллов возрастает с ростом электронной температуры. Автор выполнено полноценное исследование критериев применимости псевдопотенциалов в методе функционала плотности и в методе квантовой молекулярной динамики. Впервые было показано, что метод квантовой молекулярной динамики способен описать все типы

ударно-волновых экспериментов для алюминия. Наконец, были получены новые данные по транспортным свойствам плотной плазмы алюминия и CH_2 .

Обоснованность выводов и суждений. Квантово-статистические модели, использованные в диссертации, основаны на строгих физических принципах. Аналитические выкладки, приведенные во второй главе диссертации, математически обоснованы. Результаты численных расчетов по различным моделям проводились с оценкой погрешностей и проверялись на сходимость. При наличии экспериментальных данных проводилось сравнение с ними с обсуждением возможных расхождений. В диссертации также присутствует сравнение с другими теоретическими моделями. Выводы, приведенные в конце каждой главы, сделаны на основе полученных автором результатов и логических заключений. Таким образом, все научные выводы и суждения в диссертации являются обоснованными.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 8 глав, заключения, списка литературы и трех приложений (271 страница). Список литературы включает более 400 наименований.

Во введении сформулированы актуальность, цели работы, научная новизна, научная и практическая значимость задач, решаемых в диссертации, методология и методы исследования, положения, выносимые на защиту, соответствие паспорту специальности, степень достоверности и апробация результатов, а также личный вклад автора.

Первая глава содержит общее описание и краткий обзор квантово-статистических подходов. Рассмотрены модель идеального газа, модели атома в сферической ячейке, в том числе модель Томаса-Ферми, метод функционала плотности, метод квантовой молекулярной динамики и метод Монте-Карло с интегралами по траекториям. Обсуждается терминология, используемая в диссертации.

Во второй главе излагается конечно-температурная модель Томаса-Ферми в вариантах для одного атома и для смеси атомов. Приводится математическая постановка проблемы и описывается метод ее решения. Подробно описывается процедура расчета вторых производных термодинамического потенциала с заданной точностью. Автор также обсуждает аккуратное выделение тепловой части термодинамических функций модели Томаса-Ферми с помощью асимптотических формул. Описанные в главе подходы реализованы в программном коде TFmix с графическим интерфейсом, который обсуждается в приложении А.

Третья глава посвящена разработке широкодиапазонных уравнений состояния пяти металлов с тепловым вкладом электронной подсистемы, рассчитанным по модели Томаса-Ферми из главы 2. Свободная энергия записывается в виде суммы трех слагаемых: холодной кривой, теплового вклада атомов и ионов и теплового вклада электронов. Для первых двух слагаемых используются полуэмпирические выражения. В главе приводятся две модели, отличающиеся поведением теплоемкости при температурах ниже комнатной. Неиз-

вестные коэффициенты уравнений состояния определяются путем сравнения с ударно-волновыми экспериментальными данными. Качество определения коэффициентов демонстрируется на графиках.

В четвертой главе описан метод Монте-Карло с интегралами по траекториям для случая смеси нескольких элементов. Метод затем применяется для расчетов термодинамических функций водородно-гелиевой плазмы для двух массовых концентраций гелия: 0.234 и 0.988. Первая концентрация соответствует примерному содержанию гелия во внешних слоях атмосферы Юпитера. Результаты моделирования сравниваются с химической моделью плазмы. Показано, что при высоких температурах согласие с химической моделью оказывается хорошим, тогда как при температурах 20 кК и ниже согласие ухудшается. При низких температурах в расчетах возникают две области плохой сходимости к термодинамическому равновесию, обсуждается возможная связь этих аномалий с гипотетическим плазменным фазовым переходом.

Пятая глава полностью посвящена методу функционала плотности. Приводится краткое описание метода, его теоретическое обоснование и основные уравнения. Много внимания в главе уделяется методическому вопросу исследования области применимости псевдопотенциалов в методе функционала плотности по температуре и давлению. С помощью квазигармонического приближения и критерия Линдемана проведены расчеты кривых плавления трех металлов в хорошем согласии с экспериментальными данными. Остаток главы посвящен учету электронной температуры в квазигармоническом приближении и получению кривых плавления металлических кристаллов с нагретыми электронами.

Шестая глава является одной из ключевых в диссертации и содержит результаты моделирования ударно-волновых экспериментов с помощью метода квантовой молекулярной динамики. Рассмотрены различные типы ударно-волновых экспериментов: по ударной сжимаемости сплошных и пористых образцов, по изоэнтропическому расширению и сжатию, по измерениям скорости звука за фронтом ударной волны. Для всех типов экспериментов обсуждаются детали расчетов соответствующих кривых: ударных адиабат, адиабат Пуассона, скорости звука. Проведены расчеты для трех веществ: алюминия, дейтерия и дейтерида лития. Констатируется хорошее согласие с экспериментальными данными, обсуждаются возможные причины расхождений для экспериментов по изоэнтропическому расширению. На примере дейтерида лития сформулирован критерий применимости псевдопотенциалов в методе квантовой молекулярной динамики.

В седьмой главе приведен метод расчета транспортных и оптических свойств плотной плазмы с помощью формулы Кубо-Гринвуда. Подробно обсуждаются параметры расчета и сходимость метода по отношению к этим параметрам. Проведено исследование сходимости для статической электропроводности жидкого алюминия, сделан вывод о доминирующем влиянии числа частиц на результаты. Получены новые данные для динами-

ческой электропроводности плотной плазмы алюминия и пластика эффективного состава CH_2 , в том числе для случая различных температур электронов и ионов. Продemonстрировано, что статическая электропроводность и теплопроводность плазмы алюминия с нагретыми электронами оказывается существенно выше, чем для равновесного случая. Интересно также отметить сложную нелинейную зависимость статической электропроводности плазмы CH_2 от температуры, а также недрудевское поведение динамической электропроводности при температурах ниже 10 кК.

Восьмая глава посвящена численному моделированию воздействия лазерного импульса на металлическую мишень, перед которой установлена пленка из алюминия или пластика эффективного состава CH_2 . Моделирование проводилось с целью уменьшения влияния предимпульса лазерного импульса на мишень, толщина пленки подбиралась таким образом, чтобы к моменту прихода основного импульса с характерной длительностью 0.5 пс пленка становилась полностью прозрачной. Использовалась двухтемпературная одножидкостная гидродинамическая модель в лагранжевых координатах, в которой учитывалось поглощение лазерного излучения, электронная теплопроводность, электрон-ионный обмен, а также перенос излучения в диффузионном приближении. Для учета этих эффектов привлекались результаты расчетов теплофизических свойств, полученные в предыдущих главах диссертации. Было показано, что на тыльной стороне пленки возникает радиационный поток, который может оказывать существенное влияние на мишень. Количественно радиационный поток от пленки из CH_2 оказался примерно в 10 раз менее интенсивным, чем от пленки из алюминия.

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

Диссертация Левашова П.Р. суммирует результаты многолетней работы автора и содержит большой объем полезной информации. Тем не менее, диссертация не свободна от недостатков, которые перечислены ниже:

1. В главе 2 диссертации приведено подробное описание конечно-температурной модели Томаса-Ферми, а в главе 3 результаты главы 2 используются для построения широкодиапазонных полуэмпирических уравнений состояния металлов. Тем не менее, в главе 2 отсутствует обсуждение области применимости модели Томаса-Ферми, что, безусловно, важно для разработанных уравнений состояния.
2. В главе 3 при формулировке модели уравнения состояния в качестве выражения для теплового вклада ядерной компоненты использовалось квазигармоническое приближение с некоторой характеристической температурой. В то время как квазигармоническое приближение неплохо работает для кристаллического состояния, его применимость для жидкой фазы вызывает сомнения.
3. На рис. 6.5-6.7 показаны ударные адиабаты сплошных и пористых образцов алюминия, рассчитанные методом квантовой молекулярной динамики до давлений примерно 10

- Мбар. Известно, однако, что для алюминия есть экспериментальные данные по ударной сжимаемости при значительно более высоких давлениях, свыше 100 Мбар. Однако в шестой главе диссертации эти данные не интерпретируются и даже не упоминаются.
4. В главе 7 упоминается закон Видемана-Франца. Автором получены данные по электропроводности и теплопроводности, которые позволяют проверить этот закон в области плотной плазмы, однако соответствующие графики не приведены в диссертации. Это было бы полезно сделать для приложений, так как закон Видемана-Франца часто используется при моделировании процессов при высоких плотностях энергии ввиду отсутствия данных по теплопроводности.

Однако указанные замечания не снижают общей положительной оценки диссертационной работы Левашова П.Р. Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации. Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на многочисленных ведущих российских и международных конференциях.

Диссертация Левашова П.Р. является законченной научно-квалифицированной работой, в которой получены результаты, совокупность которых можно квалифицировать как решение важной научной проблемы, связанной с разработкой и применением квантово-статистических методов для расчетов теплофизических свойств веществ. Это соответствует всем критериям к докторским диссертациям, установленным п. 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней» № 842 от 24.09.2013 г.

Диссертационная работа соответствует паспорту специальности 1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника в части физико-математических наук, а автор диссертационной работы Левашов Павел Ремирович заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника.

Отзыв составил:

Профессор кафедры теплофизики
МГТУ им. Н.Э. Баумана
Д.ф.-м.н., профессор

Рыжков Сергей Витальевич

федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)»

Адрес: 105005, Москва, ул. 2-я Бауманская, д. 5, стр. 1

Телефоны: 8 499 263-65-70

E-mail: svryzhkov@bmstu.ru

Подпись д.ф.-м.н., профессора С.В. Рыжкова заверяю:



ТЕЛ. 8-499-263-60-48