



УТВЕРЖДАЮ

Директор ИФВД им. Л.Ф. Верещагина РАН

Академик РАН

В.В. Бражкин

«01» сентября 2022 г.

М.П.

ОТЗЫВ

ведущей организации, Федерального государственного бюджетного учреждения науки
Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН

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.

В диссертационном исследовании Левашова П.Р. с использованием ряда квантово-статистических подходов проведены расчеты термодинамических, транспортных и оптических свойств различных веществ. В частности, построены широкодиапазонные уравнения состояния для ряда металлов с тепловым вкладом электронов по модели Томаса-Ферми, выполнено моделирование ударно-волновых экспериментов для алюминия, дейтерия и дейтерида лития, с помощью формулы Кубо-Гринвуда проведены расчеты динамической и статической электропроводности и теплопроводности. Полученные результаты использованы для гидродинамического моделирования воздействия мощного лазерного импульса на вещество с учетом переноса излучения.

Актуальность исследования определяется потребностями разработки широкодиапазонных моделей термодинамических, транспортных и оптических свойств веществ для решения разнообразных практических задач, в том числе связанных с взаимодействием лазерных импульсов с веществом. Наибольшую сложность для теоретического описания представляет область фазовой диаграммы, в которой сильны эффекты как межчастичного взаимодействия, так и вырождения электронной подсистемы. Экспериментальные данные в этой области имеются лишь для ограниченного набора веществ, а при температурах выше 2500 К зачастую и вовсе отсутствуют. Поэтому особое значение приобретают так называемые первопринципные методы моделирования, основанные на квантово-статистических подходах.

В работе получен ряд важных результатов, определяющих **научную новизну**. Так, в диссертации разработан метод расчета тепловой части термодинамических функций конечно-температурной модели Томаса-Ферми для смеси элементов, включая вторые произ-

водные термодинамического потенциала, выполнен расчет кривых плавления металлов различной плотности с нагретой электронной подсистемой, продемонстрирована возможность описания всех типов ударно-волновых экспериментов для алюминия с помощью метода квантовой молекулярной динамики, выявлены особенности электронных транспортных свойств для плотной плазмы эффективного состава CH_2 в диапазоне температур от 5 до 100 кК.

Теоретическая значимость работы обусловлена разработкой нового подхода для расчета тепловой части термодинамических функций конечно-температурной модели Томаса-Ферми с заданной точностью, включая вторые производные термодинамического потенциала; метода исследования области применимости псевдопотенциалов для метода функционала плотности; метода расчёта кривых плавления кристаллов с нагретыми электронами.

Практическая значимость работы состоит в разработке компьютерного кода с графическим интерфейсом для расчёта теплового вклада электронов для смеси веществ по конечно-температурной модели Томаса-Ферми; параллельного кода для вычисления транспортных свойств по формуле Кубо-Гринвуда; в расчете подробных таблиц термодинамических свойств электронов по модели Томаса-Ферми; в создании нового класса широкодиапазонных полуэмпирических уравнений состояния металлов; в численном изучении проблемы подавления лазерного предымпульса с помощью тонкой плёнки, устанавливаемой перед мишенью.

Результаты, полученные в диссертации, представляют существенную значимость для развития теплофизики, демонстрируя возможности квантово-статистического моделирования теплофизических свойств в условиях сильного межчастичного взаимодействия и вырождения. Это позволяет осуществлять интерпретацию экспериментальных теплофизических данных для конденсированных веществ, а в некоторых случаях полностью заменять эксперимент численным моделированием. Таким образом, современные квантово-статистические подходы вносят существенный вклад в разработку широкодиапазонных моделей теплофизических свойств веществ, что убедительно продемонстрировано в диссертации.

В качестве одного из основных результатов, полученных в диссертации, следует отметить теоретическую интерпретацию ударно-волновых экспериментов. Хорошо известно, что метод функционала плотности давно и с успехом используется для теоретического описания статических экспериментов при высоких давлениях. Температура в таких расчетах часто полагается равной нулю, что сводит задачу к квантово-механическому расчету. Однако при рассмотрении ударно-волновых экспериментов необходимо учитывать существенный рост температуры и связанные с этим явления, в частности, плавление. Поэтому при моделировании ударной адиабаты необходимо использовать метод квантовой молекулярной динамики, что представляет собой существенно более сложную проблему. В частности, возникает вопрос о влиянии псевдопотенциалов на рассчитываемые термодинамические функции при высоких давлениях и температурах. В диссертации проведено достаточно полное исследование всех аспектов моделирования ударно-волновых экспериментов и продемонстрирована хорошая точность описания экспериментальных данных, в том числе температурных измерений.

В диссертации последовательно изложены различные квантово-статистические подходы, для ряда веществ с их помощью выполнены расчеты теплофизических свойств, а полученные свойства использованы для решения задачи воздействия мощного лазерного импульса на тонкую пленку, установленную перед металлической мишенью. Во *введении* обосновывается актуальность задачи моделирования теплофизических свойств конденсированных веществ, особенно при высоких температурах и давлениях. Кроме того, во *введении* содержатся все формальные разделы, необходимые для представления диссертации. Основной материал диссертации изложен в восьми главах и трех приложениях, каждая глава завершается выводами.

Первая глава содержит краткий обзор квантово-статистических методов расчета теплофизических свойств веществ, в частности, введена необходимая терминология и последовательно рассмотрены наиболее употребительные для практических задач модели. Приведен краткий обзор модели идеального ферми-газа, модели атома в сферической ячейке, метода функционала электронной плотности и метода Монте-Карло с интегралами по траекториям. Сделан вывод о том, что для проведения практических расчетов по квантово-статистическим моделям необходимо прибегать к различным приближениям, без которых эффективность вычислений резко снижается.

Во *второй главе* подробно изложена конечно-температурная ячеечная модель Томаса-Ферми для расчета термодинамических свойств электронов как для одного атома, так и для смеси элементов. Сформулирована математическая постановка задачи, приведены уравнения и граничные условия для ее решения. Особое внимание уделено расчету термодинамических функций модели и специфике вычисления интегралов, входящих в термодинамические функции, с заданной точностью. Изложена теория вычисления вторых производных термодинамического потенциала и выведены уравнения для их расчета. Также подробно рассмотрен вопрос о корректном вычислении теплового вклада электронов в термодинамические функции модели и приведены примеры практических расчетов. Выполнено описание программы Tfmix с графическим интерфейсом для расчетов термодинамических функций электронов.

В *третьей главе* построены полуэмпирические уравнения состояния пяти металлов с тепловым вкладом электронов, рассчитанным по конечно-температурной модели Томаса-Ферми. Свободная энергия представлялась в виде суммы трех слагаемых: холодной кривой, теплового вклада ядер и теплового вклада электронов. Для первых двух слагаемых использовались полуэмпирические выражения, а для третьего слагаемого таблицы термодинамических функций электронов, рассчитанных по конечно-температурной модели Томаса-Ферми. Неизвестные параметры в первых двух слагаемых подбирались из условия наилучшего соответствия ударно-волновым экспериментальным данным. Результаты сравнения расчетов по разработанным уравнениям состояния с экспериментальными данными по ударной сжимаемости сплошных и пористых образцов, изоэнтропическому расширению и измерениям скорости звука за фронтом ударной волны показывают хорошее согласие.

Четвертая глава посвящена изложению метода Монте-Карло с интегралами по траекториям и результатам моделирования этим методом смеси водорода с гелием. Результаты расчетов сравнивались с химической моделью плазмы в условиях ее применимо-

сти. Продemonстрировано хорошее согласие с химической моделью при температурах выше 100 кК. Рассмотрены две массовые концентрации гелия: 0.234 и 0.988, первая из которых соответствует содержанию гелия в верхних слоях атмосферы Юпитера. При температуре 10^4 К и низкой концентрации гелия в расчетах наблюдались две области термодинамической неустойчивости, природа которых в настоящее время остается неясной.

В *пятой главе* изложены методы функционала электронной плотности и квантовой молекулярной динамики, а также исследована область применимости псевдопотенциалов для некоторых элементов для метода функционала плотности. В квазигармоническом приближении выполнены расчеты кривых плавления алюминия, меди и никеля, в том числе для кристаллов с температурой электронов, значительно превышающей температуру решетки. Продemonстрировано, что квазигармоническое приближение и критерий Линдемана обеспечивают хорошее согласие кривых плавления с экспериментом для всех трех металлов, а повышение температуры электронов до 5-10 эВ приводит к существенному росту температуры плавления для меди и никеля.

В *шестой главе* с помощью метода квантовой молекулярной динамики проведено моделирование ударно-волновых экспериментов для алюминия, дейтерия и LiD. Подробно обсуждается методика расчета ударных адиабат сплошных и пористых образцов, изоэнтроп сжатия и разгрузки, а также скорости звука за фронтом ударной волны. Для алюминия проведено сравнение со всеми типами ударно-волновых экспериментов и выполнен анализ причин занижения расчетной скорости расширения на изоэнтропах разгрузки. Для дейтерия выполнен расчет квазиизоэнтропы сжатия и продemonстрировано отсутствие скачка плотности в области предполагаемого плазменного фазового перехода. Для дейтеридов лития проанализировано влияние учета одного или трех валентных электронов для лития на термодинамические свойства и ударную адиабату. Было продemonстрировано, что при учете лишь одного валентного электрона для лития возникает эффективное дополнительное притяжение, что уменьшает давление на ударной адиабате. Для ударных адиабат исследованных веществ получено хорошее согласие с данными ударно-волновых экспериментов.

Седьмая глава диссертации посвящена методу расчета электронных транспортных и оптических свойств с использованием метода квантовой молекулярной динамики и формулы Кубо-Гринвуда. Изложена методика проведения моделирования, вычисления коэффициентов Онзагера, динамической и статической электропроводности, а также коэффициента теплопроводности. Выполнены расчеты коэффициентов электропроводности и теплопроводности для жидкого алюминия при постоянной плотности в зависимости от температуры, проведено сравнение с экспериментальными данными при атмосферном давлении. Также было выполнено подробное исследование транспортных свойств плазмы эффективного состава CH_2 , продemonстрирована существенно недрудевская зависимость действительной части электропроводности от частоты, а также сложная нелинейная зависимость статической электропроводности от температуры. Были исследованы транспортные свойства плазмы алюминия для случая различных температур электронов и ионов, продemonстрировано существенное увеличение коэффициента теплопроводности для случая нагретой электронной подсистемы по сравнению с однотемпературным случаем.

Восьмая глава диссертации посвящена использованию полученных результатов по теплофизическим свойствам веществ для моделирования воздействия мощного лазерного импульса на металлическую мишень из серебра, перед которой была установлена тонкая пленка для уменьшения влияния предимпульса. Для моделирования использовалась двухтемпературная одножидкостная одномерная гидродинамическая модель, учитывающая поглощение лазерного излучения, двухтемпературные неравновесные состояния для электронной и ионной подсистем, электронную теплопроводность и перенос излучения в диффузионном приближении. В результате численной оптимизации были подобраны параметры пленки, необходимые для полного поглощения предимпульса с образованием прозрачной для основного импульса плазмы. При использовании в качестве пленки фольги из алюминия возникает поток мягкого рентгеновского излучения на мишень, приводящий к разрушению мишени еще до прихода основного импульса. Если же использовать пленку из пластика эффективного состава CH_2 , то радиационный поток уменьшается примерно на порядок, что позволяет сохранить мишень для воздействия основного импульса.

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

1. В главе 4 диссертации приведены результаты расчетов давления и энергии водородно-гелиевой плазмы методом Монте-Карло с интегралами по траекториям. На некоторых графиках (например, рисунки 4.3 и 4.4) наблюдаются осцилляции расчетных зависимостей, связанные, по-видимому, с большой статистической погрешностью. В работе отсутствует обсуждение этого эффекта, а также учета влияния параметров моделирования и «проблемы знаков» на результаты расчетов.

2. На рисунке 5.2 главы 5 диссертации приведены расчетные кривые зависимости давления от степени сжатия для калия до давлений 20 Мбар. Все кривые рассчитаны для объемно-центрированной кубической решетки калия. Известно, однако, что в диапазоне давлений до 1 Мбар калий испытывает ряд полиморфных фазовых превращений, которые оказывают существенное влияние на кривую холодного сжатия. По-видимому, для иллюстрации погрешностей псевдопотенциалов в методе функционала плотности автору следовало бы выбрать другой металл, например, золото или платину.

3. В главе 5 диссертации приведены расчеты кривых плавления алюминия, меди и никеля на основе квазигармонического приближения и критерия Линдемана. Между тем, вблизи кривой плавления сильное влияние на результаты могут оказывать эффекты ангармонизма, как это имеет место, например, для циркония. В работе этот эффект не анализируется и не обсуждается.

4. В диссертации анализируются экспериментальные данные, полученные как в статических, так и динамических условиях, в частности, в главе 6 для алюминия и дейтеридов лития. При этом подразумевается, что в ударно-волновых экспериментах устанавливается термодинамическое равновесие, однако в диссертации отсутствуют оценки времени термализации за фронтом ударной волны.

5. В главе 6 диссертации на рисунках 6.6 и 6.7 обсуждаются ударные адиабаты пористых образцов алюминия, однако в тексте диссертации понятие пористости не определяется и не обсуждается. Автору следовало бы более подробно остановиться на этом вопросе, а также кратко изложить модель Я.Б. Зельдовича, используемую для интерпретации ударно-волновых экспериментов с пористыми веществами.

Указанные замечания, однако, не снижают общей положительной оценки, которую заслуживает диссертационная работа Левашова П.Р. Автореферат полностью отражает основное содержание диссертации.

Результаты диссертации опубликованы в двадцати пяти статьях в ведущих российских и зарубежных журналах, а также в большом числе трудов российских и международных конференций, где настоящая работа проходила апробацию. Постановка всех задач, анализ результатов и выводы были сделаны непосредственно автором работы.

Диссертация обсуждена и одобрена на семинаре ИФВД РАН под председательством академика РАН Бражкина В.В. 6 июня 2022 г.

С учетом всего вышесказанного считаем, что диссертация 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:

Заместитель директора по науке
ИФВД РАН,
д.ф.-м.н.



Рыжов Валентин Николаевич

108840, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, стр. 14, +7(495)851-00-13,
ryzhov@hppi.troitsk.ru

Подпись Рыжова Валентина Николаевича заверяю.
Ученый секретарь ИФВД РАН,
к.ф.-м.н.



Валянская Татьяна Валентиновна

108840, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, стр. 14, +7(495)851-00-16,
tval@hppi.troitsk.ru

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук (108840, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, стр. 14, тел.: +7(495)851-05-82, сайт: <http://www.hppi.troitsk.ru/>, e-mail: hpp@hppi.troitsk.ru).