

ОТЗЫВ

официального оппонента

на диссертационную работу Морозова Игоря Владимировича

«Столкновительные и релаксационные процессы в неидеальной электрон-ионной плазме», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы

Плазма является наиболее распространенным состоянием вещества во Вселенной. При этом во многих достаточно плотных астрофизических объектах, таких как внешние оболочки нейтронных звезд, оболочки и недра белых и коричневых карликов, ядра красных гигантов, недра крупных планет, плазма является существенно неидеальной, что не позволяет применять многие из известных теоретических моделей и значительно затрудняет анализ данных наблюдений. В настоящее время развитие экспериментальной техники сделало возможным исследование указанных состояний вещества и в лабораторных условиях, в частности, при помощи генерации ударных волн мощными лазерными импульсами и взрывами. В связи с этим развитие теоретических моделей, учитывающих неидеальность плазмы, является **актуальной задачей**.

Предметом диссертации Морозова И.В. является исследование нерелятивистской неидеальной плазмы с умеренной степенью вырождения электронов. Большинство полученных результатов основано на компьютерном моделировании методом классической молекулярной динамики со специально подобранными потенциалами электрон-ионного и электрон-электронного взаимодействий, до определенной степени учитывающими квантово-механические эффекты. Автору удалось показать, что, например, использование модифицированного потенциала Кельбга позволяет получить приемлемые результаты для проводимости и внутренней энергии неидеальной плазмы даже за формальной границей вырождения.

Методы молекулярной динамики и Монте-Карло применяются, как правило, к так называемой физической модели плазмы, в которой плазма представлена в виде системы атомных ядер и электронов, которые, взаимодействуя друг с другом, могут образовывать связанные состояния. Эту модель труднее реализовать, чем так называемую химическую модель, в которой рассматривается совокупность свободных электронов, ионов, атомов и молекул, число которых изменяется в результате процессов ионизации и диссоциации, аналогично химическим превращениям веществ. Физическая модель свободна от основного

недостатка химической модели – необходимости разделения совокупности электронов на связанные и свободные, которое является неоднозначным из-за наличия многочастичных корреляций в неидеальной плазме.

Основная сложность физической модели заключается в корректном учете процессов ионизации и рекомбинации, не вполне поддающихся описанию на уровне классической механики. Для преодоления этой трудности при относительно низких температурах или существенных значениях параметра вырождения плазмы в диссертации предложен новый численный метод, основанный на представлении электронов в виде гауссовских волновых пакетов. Это позволяет более точно описать связанные состояния электронов и ионов, а также в некотором приближении учесть эффекты антисимметризации многоэлектронной волновой функции. В частности, предложенный комбинированный подход, основанный на динамике волновых пакетов и использовании функционала электронной плотности для учета обменно-корреляционного взаимодействия, оказался оптимальным с точки зрения скорости вычислений и точности полученных результатов. Результатом применения этого метода стало получение новых данных для ударной адиабаты и изоэнтропы водорода, дейтерия и гелия – веществ, имеющих важное **практическое значение**, в том числе для решения ряда астрофизических задач.

Научная новизна полученных в диссертации результатов заключается в следующем: разработан ряд оригинальных методик моделирования неидеальной плазмы, включая модифицированный метод молекулярной динамики с волновыми пакетами; для метода классической молекулярной динамики показана возможность перехода к длинноволновому пределу при расчете динамической проводимости с использованием различного типа граничных условий; получены новые результаты для статической и динамической проводимости однородной равновесной неидеальной плазмы в широком диапазоне параметра неидеальности; проведены оценки скоростей релаксационных процессов в электронной и ионной подсистемах для слоя плазмы, образованного тяжелым многозарядным ионом в конденсированной мишени; показан недебаевский характер экранирования в неидеальной плазме на поверхности металла в условиях формирования униполярной вакуумной дуги; с помощью компьютерного моделирования и теоретической модели описана зависимость уменьшения частоты поверхностных плазмонов в ионизованном наноразмерном кластере от размера кластера; определено затухание объемных плазмонов в неидеальной кластерной наноплазме.

Достоверность и обоснованность научных положений диссертации подтверждается, в первую очередь, верификацией результатов моделирования на основе различных методик. Например, при расчете динамической проводимости плазмы показано хорошее совпадение результатов, полученных с использованием и без использования среднего поля; для периодических и отражающих граничных условий показана сходимость результатов с ростом числа частиц в ячейке и т.п. Во-вторых, разработанные автором новые методики, такие как модифицированный метод молекулярной динамики с волновыми пакетами, сначала были опробованы на ряде модельных задач с известными из литературы решениями, к которым относятся: определение основного состояния атомов водорода и гелия, основного состояния молекулы водорода, расчет туннельной ионизации атома водорода коротким лазерным импульсом, определение распределения ферми-частиц в гармонической ловушке и другие. Кроме того, в работе подробно обсуждается сравнение полученных данных с теоретическими работами других авторов и имеющимися экспериментальными исследованиями.

Диссертация имеет достаточный **объем** для изложения представленного материала и понятную **структуру**. Она состоит из 5 глав, введения и заключения. Полный объем диссертации составляет 284 страницы; работа содержит 83 рисунка, 12 таблиц и библиографический список ссылок из 557 источников.

Введение знакомит читателя с основными целями и задачами работы, описанием актуальности исследуемой темы, ее теоретической и практической значимости, перечнем выбранных методов исследования, положениями, выносимыми на защиту, и сведениями об апробации работы.

Первая глава содержит обзор литературных источников, а также определения основных терминов и понятий, используемых далее в тексте диссертации. Автор уделяет значительное внимание имеющимся теоретическим и экспериментальным работам в области физики неидеальной плазмы. Достаточно подробно описаны данные по сжатию вещества в алмазных наковальнях, в том числе с подогревом посредством лазерных импульсов, ударным волнам в газах и твердых телах, воздействию лазерных импульсов и потоков заряженных частиц на твердотельные и кластерные мишени, образованию неидеальной плазмы в разрядах высокого давления и прикатодной области вакуумных разрядов, электровзрыву проводников, исследованиям так называемой ультрахолодной плазмы (ридберговского вещества). При этом большое внимание уделяется проблеме наличия плазменного фазового перехода в водороде, которая имеет важное значение, например, для описания вещества в недрах Юпитера и Сатурна, а также подобных им экзопланет. В обзоре упоминаются также работы по

исследованию плотной плазмы, характерной для ядер звезд-гигантов, недр белых и коричневых карликов и оболочек нейтронных звезд.

Среди теоретических подходов, описанных в первой главе, отмечаются методы расчета на основе химической модели, квантово-статистический подход и статистический метод на основе формализма электронной плотности (метод Томаса — Ферми). Довольно подробно описаны и методы компьютерного моделирования, включая различные варианты молекулярно-динамического моделирования, классический и квантовый методы Монте-Карло, метод частиц в ячейке. Приведенные сведения позволяют судить о современном состоянии исследований и ключевых задачах, относящихся к теории неидеальной плазмы и плотного разогретого вещества, а также о недостатках и преимуществах имеющихся аналитических моделей и методов компьютерного моделирования.

Вторая глава посвящена результатам расчета статической и динамической проводимости равновесной пространственно-однородной неидеальной плазмы методом классической молекулярной динамики на основе теории линейного отклика. В данной главе большое внимание также уделено методическим вопросам расчета автокорреляционных функций тока в методе молекулярной динамики и влиянию граничных условий. Для статической проводимости результаты расчетов сопоставлены с экспериментальными данными, теоретическими моделями и результатами моделирования ультрахолодной плазмы, полученными другими авторами. Показано, что в области полностью ионизованной невырожденной плазмы результаты всех представленных моделей и экспериментов хорошо совпадают с результатами компьютерного моделирования. Проведенные расчеты показали несовершенство двух из трех проанализированных теоретических моделей при переходе через границу вырождения и позволили сделать оценку проводимости. Также во второй главе обсуждается расчет динамической проводимости неидеальной плазмы, необходимый для описания взаимодействия диагностического лазерного излучения с плазмой, и обосновано использование длинноволнового предела при анализе результатов моделирования. Показано хорошее согласие с квантово-статистическим подходом в области частот, не превышающих плазменную частоту.

В третьей главе метод классической молекулярной динамики применяется для анализа ряда неравновесных систем, представляющих собой пространственно-неоднородную неидеальную плазму. В качестве первой модельной задачи рассмотрена релаксация электронов на плоской границе плазмы с вакуумом. Эти расчеты позволили сделать предварительную оценку формы установившегося двойного электронного слоя на границе плазмы, а также времени его

установления. Следующей из рассмотренных систем является плазма вблизи поверхности металла, возникающая в условиях формирования униполярной вакуумной дуги. В результате проведенного моделирования было определено, что характерное время установления равновесного распределения электронов на границе плазмы составляет порядка 100 фс. При этом на распределении заряда вблизи поверхности металла был обнаружен неэкспоненциальный участок, размер которого зависит от параметра неидеальности плазмы. С учетом этого участка определена характерная ширина двойного слоя и потенциал поверхности в зависимости от температуры и плотности плазмы и предложены простые полуэмпирические формулы для этих зависимостей. В третьем случае рассматривалась неидеальная плазма в треке одиночного многозарядного иона в конденсированной мишени, для которой также были определены характерные времена релаксации в электронной и ионной подсистемах (от 1 фс для релаксации функции распределения электронов до 1 пс для характерного времени разрушения ионной решетки). Эти данные важны для анализа наблюдаемых рентгеновских спектров и оптимизации многих практически важных процессов, связанных с распространением тяжелых ионов в среде.

В четвертой главе предложена схема моделирования, основанная на классической молекулярной динамике, позволяющая детально рассмотреть процессы в электронной подсистеме наноразмерного кластера, ионизованного коротким лазерным импульсом. С помощью предложенной методики исследованы процессы установления равновесного распределения электронов по скоростям, релаксации пространственного распределения электронов, тепловой эмиссии электронов из наноплазмы и возбуждения тепловых колебаний – поверхностных и объемных плазмонов. В результате этих исследований удалось установить параметры электронных колебаний в зависимости от размера кластера. В частности, был обнаружен сдвиг частоты поверхностных плазмонов, который удалось отчасти описать теоретической моделью. Большой интерес представляет также полученная зависимость декремента затухания объемных плазмонов, которая хорошо описывается той же интерполяционной формулой, которая использована во второй главе для описания статической проводимости пространственно-однородной плазмы. Это подтверждает гипотезу о слабой зависимости частоты и декремента объемных плазмонов от размера кластера (в отличие от поверхностных плазмонов).

Результаты, описанные в первых четырех главах, показали широкие возможности метода классической молекулярной динамики, однако выявили и ряд его недостатков, таких как недостаточно точное описание связанных

состояний электронов и ионов, зависимость псевдопотенциалов взаимодействия частиц от температуры и слишком грубый учет эффектов вырождения электронного газа. Решение этих проблем рассмотрено в **пятой главе**, где автор предлагает заменить классические электроны на гауссовские волновые пакеты, что позволяет преодолеть указанные трудности классического метода. Вместе с тем такой подход, называемый динамикой волновых пакетов, также не лишен недостатков, таких как неограниченное распыление волновых пакетов со временем, ограниченная параметризация волновой функции в случае связанных состояний и вычислительно трудоемкий метод учета эффектов вырождения в рамках приближения Хартри – Фока. Разделы пятой главы посвящены способам устранения каждого из этих недостатков. В результате проблему распыления волновых пакетов удастся решить двумя способами: ограничением ширины по критерию энергии взаимодействия с ближайшим ионом и помещением волновых пакетов в ограничивающий потенциал. Недостаточная параметризация волновой функции электрона может быть улучшена путем использования линейной комбинации нескольких гауссовских волновых пакетов, причем в работе показана экспоненциальная сходимость энергии основного состояния с ростом числа пакетов на электрон. Для преодоления трудности применения метода Хартри – Фока предложена его формальная замена на приближение Хартри с дополнительным учетом обменно-корреляционной энергии при помощи приближения локальной плотности с учетом спина (LSDA), традиционно используемого в методах квантовой молекулярной динамики для функционала электронной плотности. Правильность сделанных предположений подтверждена сопоставлением результатов моделирования с данными большого числа экспериментальных работ и с другими теоретическими моделями.

Заключение содержит достаточно подробное описание полученных результатов с указанием степени проработанности каждой из поставленных задач, обоснование достоверности результатов и список актуальных нерешенных задач, перспективных для развития данной работы.

В целом, в диссертации представлен большой объем исследований, основанных на тщательной разработке методик моделирования. При этом к изложению материала можно сделать ряд **замечаний**:

1. При обсуждении результатов расчета статической проводимости неидеальной плазмы (рис. 2.1 на стр. 103) приведены лишь результаты экспериментов 1970-х – 1980-х годов, но ничего не сказано о более поздних экспериментальных исследованиях.

2. В разделе 4.1 недостает оценки влияния магнитного поля на движение электронов плазмы при воздействии коротких лазерных импульсов на кластерные мишени.

3. Во Введении (разделы 1.1.1 и 1.3.1, а также рисунок 1.1) использованы устаревшие (до 1990 года) данные о теоретических исследованиях уравнения состояния однокомпонентной плазмы – в частности, приведены неточные аппроксимации и основанное на них значение параметра неидеальности, при котором происходит кристаллизация ($\Gamma=178$), тогда как уже давно известны более точные результаты, в том числе значение параметра неидеальности при кристаллизации $\Gamma=175$ (Potekhin & Chabrier, Phys. Rev. E, 2000, vol.62, p.8554; в той же статье даны ссылки на другие современные результаты численного моделирования таких систем).

4. В описании квантово-механических исследований однокомпонентной плазмы автор ограничился рассмотрением электронов, уделив основное внимание характерной для них проблеме знаков в методе Монте-Карло с интегралами по траекториям (МКИТ). Однако в недрах компактных звезд квантово-механические эффекты могут быть важны также и для ионов. Поэтому стоило бы упомянуть результаты, полученные для ионных кристаллов в гармоническом приближении (Baiko et al., Phys. Rev. E, 2001, vol.64, id.057402), а также для плазмы в кристаллическом и жидком состояниях на основе МКИТ (например, Baiko & Chugunov, Mon. Not. R. Astron. Soc., 2022, vol.510, p.2628 и ссылки там).

5. Работа написана хорошим научным языком, но не свободна от отдельных мелких языковых погрешностей: так, в п.1.1.2 использовано слово «метеоров» там, где по смыслу подходит «метеороидов»; на с.18 вместо «определяется соотношением Γ_{deg} » точнее было бы написать «определяется величиной Γ_{deg} »; имеется и небольшое число опечаток, неизбежных при написании работы такого объема.

Указанные замечания являются незначительными. Они не снижают общей высокой оценки диссертационной работы Морозова И.В. и не подвергают сомнению ни ее основные выводы, ни новизну и достоверность полученных результатов. Автореферат диссертации достаточно полно и вполне точно описывает содержание работы. Материалы диссертации представлены на 34 научных конференциях и опубликованы в 27 статьях в рецензируемых научных журналах, рекомендованных ВАК при Минобрнауки РФ, в том числе большинство статей – в ведущих высокорейтинговых международных

физических журналах. Несомненен решающий вклад автора в постановку и решение задач, описанных в диссертации.

Таким образом, можно с уверенностью заключить, что докторская диссертация Морозова И.В. вносит значительный вклад в развитие теории неидеальной плазмы и представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая полностью соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013 г. в актуальной редакции, утвержденной постановлениями Правительства РФ, а автор данной диссертации Морозов Игорь Владимирович заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

Отзыв составил:

Главный научный сотрудник
сектора теоретической астрофизики
ФТИ им. А.Ф. Иоффе
д.ф.-м.н.



Потехин Александр Юрьевич

194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 26, тел.: +7 (812) 292-71-80,
сайт: <http://www.ioffe.ru/astro/DTA/palex/palex.html>, e-mail: palex@astro.ioffe.ru

Подпись Потехина Александра Юрьевича заверяю.

Заместитель директора ФТИ им. А.Ф. Иоффе
по научной работе,
д.ф.-м.н.



П.Н. Брунков

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук (ФТИ им. А.Ф. Иоффе),
адрес: 194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 26,
тел.: +7 (812) 297-22-45, сайт: <https://ioffe.ru>, e-mail: post@mail.ioffe.ru.