

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

Исследования неидеальных сред и, в частности, неидеальной плазмы, которой посвящена диссертация Морозова И.В., представляют собой важную область теоретической физики. Работы по этой тематике ведутся уже несколько десятилетий, однако многие проблемы все еще далеки от решения. Специфика неидеальной плазмы проявляется в изменении характера кулоновского экранирования зарядов, снижении потенциала ионизации атомов и ионов, значительной роли сильных столкновений частиц, аномальной проводимости и др. Эффекты неидеальности проявляются уже при значениях параметра неидеальности (отношения средней потенциальной энергии кулоновских взаимодействий к кинетической энергии движения частиц) порядка 0.1, при больших значениях этого параметра известные выражения для идеальной плазмы, а также приближение Дебая-Хюккеля оказываются неприменимыми.

Теоретические модели неидеальной плазмы построены, как правило, на использовании теории возмущений. Определенный прогресс в описании термодинамических свойств классической однокомпонентной неидеальной плазмы был получен благодаря решению интегральных уравнений для функции распределения с использованием приближений Перкуса-Йевики, модифицированного гиперцепного приближения, аппарата теории поля и других методов. Большое значение для верификации этих подходов имели работы по моделированию неидеальной плазмы методами Монте-Карло и молекулярной динамики, которые позволили исследовать уравнение состояния и фазовые переходы в широком диапазоне значений параметра неидеальности. Метод молекулярной динамики, кроме того, оказался незаменимым при исследовании неравновесных систем и релаксационных процессов.

Еще более важную роль играет компьютерное моделирование в случае двухкомпонентной плазмы с учетом квантовых эффектов взаимодействия электронов и ионов и многочастичных квантовых эффектов для электронов. Для рассматриваемых в работе Морозова И.В. параметров плазмы существенна роль квантово-механических эффектов электрон-ионного и электрон-электронного взаимодействия, поэтому рассмотрение среды в виде газа взаимодействующих классических заряженных материальных точек (классическая плазма) имеет лишь ограниченное применение, что существенно затрудняет применение существующего теоретического аппарата, а также метода классической молекулярной динамики. Для решения этой проблемы в диссертации рассматривается как использование псевдопотенциальных моделей, так и развитие нового

метода моделирования, основанного на представлении электронов в форме гауссовских волновых пакетов.

Актуальность темы исследований. Эффекты неидеальности проявляются в парах жидких металлов, в разрядах высокого давления, при высокоскоростном разряде (электровзрыве проводников), сжатии вещества под воздействием ударных волн и мощных лазерных импульсов, в недрах звезд и гигантских планет. Примерами неидеальных систем заряженных частиц являются также электрон-дырочная плазма в полупроводниках, электролиты, растворы заряженных коллоидных частиц и пылевая плазма. Исследование термодинамики и реакционных процессов в данных средах имеет важной прикладное значение и является актуальной задачей.

Структура диссертации. Текст диссертации изложен на 284 страницах, включая введение, обзор литературы, 4 главы с описанием результатов исследований, заключение и список литературы, состоящий из 557 наименований. Введение содержит необходимые данные об актуальности, целях и задачах работы, научной новизне, теоретической и практической значимости, методологии и методах исследований, положениях, выносимых на защиту, апробации результатов. Обзор литературы дает исчерпывающее представление о существующих теоретических подходах, методах компьютерного моделирования и экспериментальных данных, относящихся к рассматриваемым в диссертации задачам. Каждая из последующих глав содержит подробное изложение полученных результатов и сопровождается краткими выводами, подводящими итог соответствующей части работы, а заключение содержит обещающие выводы и описаний возможностей дальнейшего развития работы. Автореферат диссертации содержит краткое описание основных результатов и перечень опубликованных работ, корректно отражая содержание диссертации.

Достоверность результатов и обоснованность выводов. Рассмотрим основные результаты исследований, сформулированные в главах 2 – 5 диссертации.

После вводной главы 1, в главе 2 обсуждается расчет статической и динамической проводимости неидеальной плазмы, т.е. проводимости, зависящей от частоты возмущающего поля. Для расчета проводимости используется метод классической молекулярной динамики (МД) и теория линейного отклика, позволяющая связать проводимость и автокорреляционную функцию тока. Большое внимание автор уделяет выбору параметров моделирования, граничных условий и потенциала межчастичного взаимодействия (в работе используется модифицированный потенциал Кельбга). Полученные для статической проводимости данные сопоставлены с тремя теоретическими оценками, из которых две получены в приближении классической динамики электронов, а третья учитывает эффекты вырождения электронного газа. Результаты МД моделирования хорошо согласуются с оценками на основе классической теории при малых концентрациях электронов и подтверждают важность учета квантовых свойств электронов при приближении к границе вырождения, что в, данном случае, обеспечивается выбором

псевдопотенциала. Также, результаты моделирования хорошо согласуются с имеющимся массивом экспериментальных данных.

Для динамической проводимости существенна проблема учета нелокальности корреляционной функции. В результате проведенных исследований с привлечением дополнительной численной схемы, включающий явный учет среднего поля от удаленных зарядов, автор демонстрирует корректность использования длинноволнового приближения. Представленная зависимость эффективной частоты столкновений от частоты возмущающего поля сопоставлена с теоретической зависимостью, полученной другими авторами. Проведенные сопоставления показывают, что разработанная методика определения динамической проводимости, а также полученные с ее помощью результаты являются обоснованными.

Глава 3 посвящена моделированию релаксационных процессов в неидеальной плазме с использованием различных начальных условий. Здесь также применяется метод классической молекулярной динамики, с помощью которого рассмотрено формирование двойного электрического слоя на границе плазма–вакуум и вблизи поверхности металла в условиях униполярной дуги. Далее, проведено моделирование релаксации неидеальной плазмы, образованной одиночным многозарядным ионом в конденсированной мишени. Во всех случаях применяется схожий подход моделирования неравновесных процессов, основанный на усреднении по ансамблю состояний, отличающихся микроскопическим распределением частиц, но одинаковым с макроскопической точки зрения. Для генерации такого ансамбля используется вспомогательная равновесная МД траектория, на которой выбираются точки, отстоящие на «время динамической памяти», требуемое для микроскопического перемешивания траекторий. Таким образом, метод МД одновременно выполняет две функции -- как способ генерации статистически независимых начальных распределений частиц, за счет относительно малого времени динамической памяти, а также для самого моделирования релаксационных процессов.

Эффекты неидеальности в приведенных результатах наиболее заметны для плазмы вблизи металлической поверхности, где характер экранирования поверхностного заряда существенно отличается от дебаевского.

Полученные в работе результаты не противоречат имеющимся экспериментальным данным, а для случая плазмы ионного трека, построенная с их помощью кинетическая схема, дает хорошее согласие с наблюдаемыми рентгеновскими спектрами.

Глава 4 содержит результаты МД моделирования плазменного образования, полученного при облучении металлического кластера фемтосекундным лазером. При умеренных интенсивностях импульса полученная плазма является неидеальной. Здесь особое значение играют размерные эффекты. В работе описывается оригинальная постановка численного эксперимента, направленная на изучение исключительно динамики электронов (ионы считаются неподвижными), т.е. в данном случае фактически используется адиабатическое приближение. Такой подход обоснован в случае достаточно тяжелых ионов,

а также на ранних стадиях разлета кластера вследствие кулоновского отталкивания, когда скорости движения ионов невелики.

Моделирование показывает, что электронная подсистема в данном случае достаточно быстро достигает квазиравновесного состояния, в котором внешняя ионизация кластера фактически прекращается из-за накопленного кластером положительного заряда. Это подтверждается и сделанными теоретическими оценками. Основной акцент в данной части работы делается на исследовании коллективных колебаний электронов в образовавшейся «наноплазме». Присутствие таких колебаний проявляется, например, в резонансном поглощении диагностического лазерного импульса, следующего с небольшой задержкой после основного (ионизирующего) импульса.

В работе рассмотрены поверхностные и объемные плазмоны, причем для поверхностных плазмонов теоретически обоснован сдвиг частоты в красную область спектра. Этот эффект воспроизводится и в результатах МД моделирования. Неидеальность плазмы в данном случае проявляется в зависимости коэффициента затухания поверхностных и объемных плазмонов от плотности плазмы, которая имеет схожий характер с декрементом затухания ленгмюровских волн и скоростью релаксации импульса в пространственно однородной неидеальной плазме. Результаты расчетов сравниваются теоретическими моделями и компьютерным моделированием других авторов.

В главе 5 описана дальнейшая разработка метода динамики гауссовских волновых пакетов и исследование его применимости к моделированию неидеальной плазмы. Этот метод призван устранить недостатки классической молекулярной динамики, связанные с использованием зависящих от температуры псевдопотенциалов, сложностью описания связанных состояний электронов и ионов и вырождения электронного газа. Преимущества и недостатки данного метода обсуждаются сначала на простых модельных системах, таких как атом водорода и гелия, молекула водорода, Ферми-газ в гармоническом ограничивающем потенциале и др. С помощью данных расчетов показано, например, что, представляя электрон в виде линейной комбинации волновых пакетов, можно добиться сходимости энергии основного состояния этих систем к известным значениям.

Однако, хорошо описывая связанные состояния, метод динамики волновых пакетов сталкивается с проблемами при описании свободных электронов из-за отсутствия ограничений на ширину волнового пакета. В диссертации подробно описываются предложенные различными авторами методы ограничения ширины пакетов, сопоставляется их влияние на усредненные характеристики столкновительных процессов. В качестве одного из решений данной проблемы рассматривается помещение частиц в ограничивающий потенциал, удерживающий таким образом, волновые пакеты от расплывания. Применимость данного подхода к моделированию пространственно неограниченной плазмы обсуждается на примерах как классической МД, так и непосредственно динамики волновых пакетов.

Для учета обменно-корреляционных эффектов также рассмотрены несколько подходов, среди которых приближение Хартри-Фока, метод псевдопотенциала электронного силового поля (electron force field) и использование функционала электронной плотности

LSDA, определенного на основе распределения суммарной плотности волновых пакетов в расчетной ячейке. Последний из указанных подходов продемонстрировал оптимальное соотношение точности и времени вычислений, его результаты хорошо согласуются с ударно-волновыми экспериментами и расчетами методом Монте-Карло в терминах интегралов по траекториям. В то же время полученный метод сохраняет возможность моделирования динамических и релаксационных процессов, что открывает возможность его применения ко многим задачам, требующим как более точного, чем в классической МД учета квантово-механических эффектов, так и моделирования неравновесных состояний.

Таким образом, полученные результаты в достаточной степени базируются на известных к настоящему времени теоретических моделях, внутренне непротиворечивы, использованные методы апробированы на тестовых задачах, а полученные с их помощью данные сопоставлены с экспериментальными и другим расчетными работами, что подтверждает достоверность и обоснованность выводов диссертационной работы.

Научная новизна. Оригинальность диссертации и личный вклад автора не вызывают сомнений, отдельно хотелось бы отметить следующие новые результаты:

- данные по статической и динамической проводимости неидеальной плазмы в широком диапазоне параметра неидеальности;
- обоснование перехода к длинноволновому пределу при расчете динамической проводимости методом молекулярной динамики с периодическими граничными условиями;
- определение стационарной ширины двойного электронного слоя на границе неидеальной плазмы с различной геометрией, а также характерное время его установления;
- расчет пространственно-разрешенной автокорреляционной функции тока и исследование мод колебаний электронов в ионизованном нанокластере;
- вывод аналитической зависимости заряда ионизованного нанокластера и частоты поверхностных плазмонов от размера кластера и температуры электронов;
- разработка метода динамики волновых пакетов для электронов, представленных линейной комбинацией нескольких гауссовских функций;
- разработка методики моделирования динамики волновых пакетов без принудительного ограничения их ширины;
- разработка способа учета обменно-корреляционных эффектов в методе динамики волновых пакетов за счет использования функционала электронной плотности.

Замечания. По диссертации Морозова И.В. можно сделать следующие замечания:

1. Неясно, как из уравнений (2.16), (2.17) получается уравнение (2.19), с учетом того, что $\omega_p/\omega \rightarrow \infty$ при $\omega \rightarrow 0$. Данный переход либо неверен, либо требует дополнительных пояснений.

2. Рис. 2.9 убедительно показывает равенство продольной и поперечной частоты столкновений, что отвечает длинноволновому режиму. Автору следовало бы оценить границу размеров вычислительной ячейки, которая дает длинноволновой предел. Будут ли частоты отличаться для меньших размеров? Не является ли полученный результат следствием компенсации ошибок или других эффектов?

3. Практическое совпадение результатов расчета частоты столкновений с применением и без применения схемы Эвальда требует обсуждения. Связано ли это с соотношением размера вычислительной ячейки и длины экранирования?

4. Уравнение (2.31), по-видимому, содержит ошибку, если речь идет об усреднении по равновесному ансамблю. Действительно, для любой динамической переменной A , выполняется равенство, $\langle A \, dA/dt \rangle = 0$, которое следует из обратимости микроскопических уравнений. Если уравнение (2.31) верно, необходимо соответствующее пояснение.

5. Несколько неясен вывод о совпадении динамической проводимости для случая ПГУ и ОГУ. Следует ли из этого заключение, что данные методы хорошо аппроксимируют проводимость бесконечной (термодинамически большой) системы? Дело в том, что существующие «длинные (гидродинамические) хвосты» автокорреляционных функции требуют достаточно продолжительного интегрирования для получения низкочастотных значений проводимости. Для этого необходима достаточно большая вычислительная ячейка и использование ПГУ не решает проблему. Исследовал ли автор зависимость динамической проводимости от размера вычислительной ячейки?

6. Из описания модели приповерхностной электрон-ионной плазмы не понятно, использовались ли заряды изображения (наведенные заряды), отвечающие металлическому полупространству и если нет, то почему? Необходимо привести соответствующее объяснение.

7. Следовало бы более подробно описать процесс разрушения ионной решетки, в том числе сам механизм разрушения? Происходит ли равномерное по объему «набухание» вещества или послойное «испарение»?

8. Является ли добавление члена $U_e^{wpm d}$ к энергии волнового пакета полностью феноменологическим? Почему выбрана степенная зависимость со степенью 6? Существует ли какое-нибудь, даже качественное объяснение такой модели, основанное на физических соображениях? Нельзя ли провести соответствующий анализ на основе метода ВКБ?

9. При рассмотрении модели классической однокомпонентной плазмы в обзорной первой главе, автор не привел ссылок на последние работы по уравнению состояния этой системы, полученные разными группами авторов

10. При оформлении списка литературы используется несколько различных стандартов, что затрудняет его использование.

Данные замечания, однако, не снижают высокой оценки диссертационной работы, которая представляет собой законченный цикл научных исследований и соответствует всем критериям квалификационной работы, установленным п. 9 Положения о порядке

присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013г., ред.01.10.2018 г. Автор диссертации Морозов И.В. заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

Профессор Сколковского института науки и технологий,
121205, г. Москва, территория инновационного центра «Сколково»,
Большой бульвар, д. 30 стр. 1,
тел.: +7 (812) 297-22-45,
e-mail: N.Brilliantov@skoltech.ru.
д.ф.-м.н.


Бриллиантов Николай Васильевич

Подпись Бриллиантова Н.В. заверяю:

Ученый секретарь/директор/зам. директора/проректор/ректор и т.д.

РУКОВОДИТЕЛЬ ОТДЕЛА
КАДРОВОГО АДМИНИСТРИРОВАНИЯ

Подпись, гербовая печать, дата





Ф.И.О.



Автономная некоммерческая образовательная организация высшего образования «Сколковский институт науки и технологий» (Сколтех), адрес: 121205, г. Москва, территория инновационного центра «Сколково», Большой бульвар, д. 30 стр. 1, телефон: +7 (495) 280-14-81, веб сайт: www.skoltech.ru, e-mail: inbox@skoltech.ru