

Отзыв на автореферат диссертации Кадатского М.А.
«Квантово-статистический расчёт термодинамических свойств
простых веществ и смесей при высоких плотностях энергии»,
представленной на соискание учёной степени кандидата
физико-математических наук по специальности 01.04.08 —
Физика плазмы

Получение термодинамических характеристик горячей плотной плазмы представляет собой актуальную задачу современной физики высоких плотностей энергии. Важная группа методов решения этой задачи основана на физических моделях высокотемпературной плазмы: слэтеровского среднего иона, химических моделях типа модели Саха, моделях Томаса-Ферми с разного рода поправками (далее – ТФ и ТФП), квантово-статистических моделях. Последний класс моделей является самым сложным для реализации, и, теоретически, имеет наиболее широкую область применимости, включающий область так называемой тёплой материи (warm dense matter).

Представленный автореферат позволяет заключить, что диссертация посвящена реализации модели расчёта термодинамических характеристик по модели Хартри – Фока – Слэтера (далее – ХФС) с учётом состояний электронов промежуточного (между дискретными и непрерывными) типа. Созданная программа использована для расчёта целого ряда термодинамических характеристик для некоторых конкретных веществ (как чистых, так и смесей).

Судя по автореферату, автор является достаточно квалифицированным специалистом в области моделей высокотемпературной плазмы. Вместе с тем, к автореферату имеется ряд замечаний. Первое из них – чрезмерная лаконичность при описании используемой модели: фактически, приведена единственная формула (1), почти идентичная формуле (18) из [1], причём последний интеграл в ней просто равен 2. Приведён ряд отсылок к алгоритмам, однако в автореферате нет никакой информации (даже общей) о них. Для прояснения неясных из автореферата деталей я обратился к полному тексту диссертации, выложенному на сайте диссертационного совета Д002.110.02. Приведу наиболее существенные из возникших в результате замечаний.

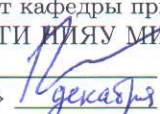
1. Формулы модели ХФС раздела 1 первой главы фактически полностью (за исключением формулы (1.26) для плотности числа состояний промежуточной группы) взяты из [1]. Наиболее важную часть реализации модели представляют особенности алгоритмов. Описание таких особенностей полностью отсутствует в диссертации. Без такого описания (хотя бы некоторых особенностей) трудно сделать вывод о том, что сделано автором самостоятельно.
2. Промежуточные состояния с указанными граничными условиями не ортогональны состояниям дискретного спектра (с выбранным граничным условием $R_{nl}(r_0) = 0$). Ортогональность состояний существенно используется при сведении многоэлектронной задачи к одноэлектронной. Исследование того, велика ли степень этой неортогональности, и как она может повлиять на рассчитанные термодинамические функции, в диссертации отсутствует.
3. Формулы для нахождения давления и внутренней энергии электронной компоненты взяты из [1]. Вместе с тем, известно, что расчёт по этим формулам имеет ряд серьёзных трудностей, которые в том числе приводят к отказу (во всяком случае для давления) от формул типа (1.30а), а применению теоремы вириала и иных подходов (см., например, [2],[3], ссылки на которые есть в диссертации, а также [4]). Никаких упоминаний о такого рода сложностях и путях их преодоления в диссертации нет.
4. При рассмотрении вклада в термодинамические функции ионов считается, что они имеют заряд Z_0 , равный средней степени ионизации плазмы. Это означает, что ионы рассматриваются вместе со связанными электронами. С другой стороны, вклад связанных электронов уже учтён. Таким образом, возможен двойной учёт некоторых составляющих.

5. В диссертации много говорится об эталоне. При этом, подтверждений более высокого качества получаемых уравнений состояния (по сравнению с моделями ТФ или ТФП), по-моему, недостаточно. Наличие осцилляций термодинамических величин, которые трактуются, как оболочечные эффекты, таким подтверждением не является. Например, из рисунка 1.2 (а также других) видим значительное отклонение результатов расчётов по реализованной модели ХФС там, где ТФ и ТФП – близки (при температурах выше 100 эв), а значит, квантовые поправки – малы и ХФС также должна давать результаты, близкие к ТФ.
6. По моему мнению, в диссертации недостаточно отражены результаты, полученные В. Г. Новиковым и А. С. Грушиным (ИПМ им. М. В. Келдыша РАН), очень близкие к тематике диссертации.

Подводя итог, можно сказать, что из диссертации, и, особенно, автореферата, трудно оценить степень вклада диссертанта в выбранное направление исследований. Формальные требования к авторефератам диссертаций и апробации работы выполнены. Это позволяет в целом положительно оценить представленный на отзыв автореферат, при условии, что на сделанные замечания во время защиты диссертации будут даны удовлетворительные ответы.

Список литературы

- [1] Никифоров А.Ф., Новиков В.Г., Уваров В.Б. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы. М.: Физматлит. 2000.
- [2] Liberman D. A. Self-consistent field model for condensed matter // Physical Review B. 1979. V. 20, No. 12. P. 4981–4989.
- [3] Овечкин А. А., Новиков В. Г., Грушин А. С. Особенности вычисления энтропии в моделях самосогласованного поля // Теплофизика высоких температур. 2011. Т. 49, № 6. С. 845–855.
- [4] Новиков В.Г., Овечкин А.А. Вычисление давления в модели ограниченного атома. М.: ИПМ им. М.В.Келдыша РАН. 2009. Препринт № 77. 26 с.

Отзыв составил:
Доцент кафедры прикладной математики
СарФТИ НИЯУ МИФИ, к.ф.-м.н.
 М. А. Вронский
« 10 » декабря 2019 г.

Подпись Вронского Михаила Александровича
удостоверяю.
Начальник отдела кадров
СарФТИ НИЯУ МИФИ

 Л. В. Овсинникова
« 10 » декабря 2019 г.
