

ОТЗЫВ

официального оппонента

на диссертационную работу Сартана Романа Александровича
«Метастабильные состояния разогретого плотного водорода» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности
1.3.9– физика плазмы.

В настоящее время изучение физических свойств водорода и его изотопов в широкой области давлений и температур вызывает большой интерес у многочисленных исследователей. Одной из наиболее обсуждаемых проблем является возможное существование плазменного фазового перехода или диссоциативного фазового перехода [1]. *Номера ссылок в отзыве совпадают с номерами ссылок в диссертации.*

Более 10 лет назад были выполнены уникальные взрывные измерения квазиизоэнтропического сжатия дейтерия [1], в которых был обнаружен скачок плотности примерно на 20% при давлении 130 ГПа. Для теоретического описания этих экспериментов применялись разнообразные полуэмпирические модели и методы. Оказалось, что ряд расчетов не воспроизводит скачка плотности на квазиизоэнтропе, но есть методы и модели, расчеты по которым описывают фазовый переход в согласии с опытами.

Признаки фазового перехода первого рода в водороде (дейтерии), такие как наличие скрытой теплоты фазового перехода или аномальные изменения оптических свойств, были обнаружены в [2—5]. В других опытах наблюдалось, только, увеличение электрической проводимости [6; 7].

В [4; 8—11] с помощью метода квантовой молекулярной динамики в разогретом плотном водороде был предсказан фазовый переход первого рода флюид-флюид. При этом, существование фазового перехода, именно, первого рода обосновывалось появлением плато на изотерме давления, резким изменением парной-корреляционной функции и скачкообразным ростом электрической проводимости.

Как у каждого фазового перехода первого рода, в разогретом плотном водороде должны существовать сопутствующие ему метастабильные состояния. Отметим, что метастабильные состояния разогретого плотного водорода не исследовались ранее в молекулярно-динамических расчетах, не наблюдались в экспериментах.

Во введении обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, формулируется цель работы и описывается научная новизна, *теоретическая* и практическая значимость.

Цель работы:

получение метастабильных состояний разогретого плотного водорода методом квантовой молекулярной динамики с использованием теории функционала плотности;

расчет уравнения состояния разогретого плотного водорода в области фазового перехода, включая область метастабильности;
описание характера процессов диссоциации и ионизации, сопутствующих фазовому переходу в разогретом плотном водороде.

Научная новизна:

Предложен и разработан метод моделирования метастабильных состояний в рамках метода квантовой молекулярной динамики;
получено уравнение состояния разогретого плотного водорода с метастабильной областью;
предложен и применен новый метод оценки концентрации молекул H_2 и их времени жизни по молекулярно-динамическим траекториям;
дано качественное описание процессов, сопровождающих фазовый переход.

Основные положения, выносимые на защиту:

метод получения метастабильных состояний в рамках квантовой молекулярной динамики;
уравнение состояния разогретого плотного водорода вдоль изотрем 700, 1000 и 1500 К с учётом метастабильных состояний;
метод оценки концентрации и времени жизни двухатомных молекул водорода; резкая ионизации молекул H_2 до H_2^+ и частичная диссоциации при фазовом переходе в разогретом плотном водороде.

В работе применяются новые подходы к исследованию природы фазового перехода флюид-флюид в разогретом плотном водороде в рамках квантовой молекулярной динамики. В диссертации убедительно продемонстрировано, что метод квантовой молекулярной динамики при правильном применении адекватно учитывает все эффекты и обеспечивает хорошее согласие с экспериментальными данными.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 17 печатных изданиях, 7 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК, 10 — в виде тезисов докладов в сборниках трудов конференций.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из введения, 5 глав и заключения. Полный объем диссертации составляет 66 страниц с 22 рисунками и 1 таблицей. Список литературы содержит 81 наименование.

В первой главе сообщается о первых работах, предсказывающих плазменный фазовый переход. Описаны результаты наиболее значимых современных экспериментальных работ, где исследовался водород или дейтерий при давлениях и температурах, соответствующих области фазового перехода. Различные эксперименты не всегда согласуются между собой, как на количественном, так и на качественном уровнях. Описаны основные принципы, квантовой молекулярной динамики с применением теории функционала плотности, используемые в этом методе в работе.

Во второй главе моделирование осуществлялось в рамках квантовой молекулярной динамики с использованием программного пакета VASP. Для обработки данных написан специальный код. Описаны параметры моделирования, приведены результаты равновесных расчетов фазового перехода изотермы плотного водорода 700 К, парной корреляционной функции.

Далее подробно представлен и описан метод получения метастабильности. Исходная МД-конфигурация должна заранее соответствовать молекулярному состоянию. Затем, последовательно увеличивая плотность и релаксируя каждую новую конфигурацию, воспроизводились метастабильные молекулярные ветви изотерм.

Третья глава посвящена результатам расчетов уравнения состояния разогретого плотного водорода с учетом метастабильной области.

Построено уравнение состояния разогретого плотного водорода вдоль изотерм 700, 1000, 1500 и 2000 К. Получены метастабильные состояния молекулярной фазы для изотерм 700 и 1000 К. Их расчет указывает на то, что фазовый переход является фазовым переходом первого рода.

Изотермы имеют скошенный вид с сильным перекрытием равновесных и метастабильных ветвей и сравнительно небольшой разницей удельных объемов между ними. Вид изотерм соответствует предсказанию плазменного фазового перехода.

Четвертая глава посвящена описанию разработанного метода оценки концентрации и времени жизни молекул H_2 . Предложен метод оценки концентрации и времени жизни двухатомных молекул водорода. Для анализа этих свойств молекул водорода по МД-траекториям дано формально определение “молекулы”: атомы считаются связанными, если расстояние между ними меньше некоторого заданного значения.

Рассчитаны изменения концентрации, времени жизни и среднего межатомного расстояния молекул водорода при фазовом переходе. Концентрация молекул составляет 100% в непроводящей фазе и плавно уменьшается из-за диссоциации после фазового перехода с увеличением плотности. Время жизни резко падает на несколько порядков во время фазового перехода. Среднее межатомное расстояние имеет небольшой, но резкий скачок на 5-8% при фазовом переходе. Эти особенности указывают на процесс ионизации водорода молекул H_2 в разогретом плотном водороде при фазовом переходе.

Пятая глава посвящена анализу физических процессов, сопровождающих фазовой переход в разогретом плотном водороде. Результаты расчетов концентрации молекул H_2 позволяют качественно описать процессы, после перехода в проводящее состояние. Молекулы водорода ионизируются. Одновременно с ионизацией молекулы частично диссоциируют на атомы. При этом, степень

диссоциации постепенно увеличивается по мере продвижения вглубь проводящей области. Полная диссоциация достигается при давлениях, заметно превышающих давления фазового перехода.

В заключении перечислены основные результаты, полученные в диссертации.

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

1. В отличие от [1], в диссертации нет анализа условий, которым должны удовлетворять параметры неидеальной плазмы для существования метастабильных состояний.
2. В диссертации отмечается, что: «существование метастабильных состояний служит новым критерием того, что фазовый переход в разогретом плотном водороде является переходом первого рода». Однако, в тексте нет пояснений и обоснований этого критерия, кроме указания на то, что метастабильные состояния не могут существовать при фазовом переходе второго рода. Можно было бы привести краткие пояснения, например, из теории фазовых переходов Ландау.
3. Скошенный вид изотерм с сильным перекрытием равновесных и метастабильных ветвей и сравнительно небольшой разницей удельных объемов между ними, указывают на плазменную [36] природу фазового перехода жидкость–жидкость в разогретом плотном водороде. В диссертации по этому поводу нет пояснений.
4. В процессе диссоциации молекул H_2 образуются атомы водорода, которые ионизируются. Однако, нет подтверждений ионизации атомов H , на основе методики оценки концентрации и времени жизни компонентов по молекулярно-динамическим траекториям плотного, горячего водорода (глава 4) при давлениях выше плазменного фазового перехода на изотерме в проводящей области.
5. Диссертация написана неряшливо. Имеются ошибки и пропуски в тексте и в подписях к рисункам.

Однако эти недостатки не имеют принципиального значения.

В диссертации получены важные фундаментальные результаты по физике плазмы. Разработан способ моделирования и получены метастабильные состояния молекулярной фазы в рамках молекулярной динамики для изотерм 700 и 1000 К. Рассчитаны изменения концентрации, времени жизни и среднего межатомного расстояния молекул водорода при фазовом переходе [80; 81] с использованием молекулярно-динамических траекторий плотного, горячего водорода. Эти характеристики указывают на процесс плазменной ионизации компонентов в разогретом плотном водороде при фазовом переходе, и при последующей постепенной диссоциации в зоне проводимости.

Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации. Результаты диссертации опубликованы в рекомендованных ВАК статьях в ведущих российских и зарубежных журналах. Основные результаты диссертации докладывались и обсуждались на ведущих российских и международных конференциях.

Таким образом, можно констатировать, что диссертация Сартана Р.А. представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013г., (ред.07.06.2021г.), а ее автор Сартан Роман Александрович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – Физика плазмы.

Отзыв составил:

Зав. кафедрой «Химическая физика», д.ф.-м.н., профессор НИЯУ МИФИ,
Губин Сергей Александрович

115409, г. Москва, Каширское ш., д. 31, тел.: +7(499)324-31-75, e-mail:
sagubin@mephi.ru

Подпись Губина Сергея Александровича заверяю.



ДИРЕКЦИЯ
ПО УПРАВЛЕНИЮ
ПЕРСОНАЛОМ
НИЯУ МИФИ
И.В.В. Сильченко

15409, г. Москва, Каширское ш., д. 31, тел.: +7(495)788-56-99, e-mail:
info@mephi.ru

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»,
115409, г. Москва, Каширское ш., д. 31, тел.: +7(495)788-56-99, сайт:
<https://mephi.ru>, e-mail: info@mephi.ru