

ОТЗЫВ

на диссертацию САРГАНА Романа Александровича «Метастабильные состояния разогретого плотного водорода», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

Диссертационная работа Сартана Р.А. посвящена исследованию фазового перехода флюид-флюид в разогретом плотном водороде методом компьютерного моделирования. Изучаемый фазовый переход происходит в режиме разогретого плотного вещества (warm dense matter), где водород представляет собой неидеальную плазму. До сих пор нет полной теории, описывающей природу перехода в проводящее состояние. Теоретическое исследование водорода при экстремальных давлениях и температурах актуально и имеет фундаментальный интерес. Считается также, что рассматриваемые экстремальные условия реализуются в атмосферах Юпитера и Сатурна, состоящих из водородно-гелиевой смеси.

Диссертация состоит из введения, обзора литературы и четырех глав – по одной на каждое выносимое на защиту положение, заключения и списка литературы. Общий объем диссертации составляет 65 страниц, включая 22 рисунка и 1 таблицу. Библиография включает 76 наименований.

Во введении приводится обоснование актуальности и новизны работы, ее научной и практической значимости. Сформулированы цели исследования, приведены основные результаты и положения, выносимые на защиту. Отмечен личный вклад автора, дана информация о публикациях автора и апробации работы на российских и международных конференциях.

В обзоре литературы (глава 1) обсуждается проблема проводящего водорода и фазовые переходы в нем. Приводятся наиболее известные публикации по теме работы. Описан метод первопринципной (квантовой) молекулярной динамики в рамках теории функционала плотности, составляющий основу подхода, использованного в работе.

Во второй главе представлен метод молекулярно-динамического моделирования и описаны технические детали достижения метастабильности.

В третьей главе, применяя собственный подход, соискатель нашел метастабильные ветви изотерм при 700 и 1000 К. Сам факт получения метастабильности говорит о том, что исследуемый фазовый переход является переходом первого рода, а не плавным кроссовером. Полученный результат интересен тем, что совпадает на качественном уровне с аналитическими предсказаниями: особенности вида изотерм,

полученных с помощью моделирования, аналогичны особенностям изотерм, рассчитанных в рамках двух разных химических моделей плазмы – как более простой ранней, так и современной.

Четвертая глава посвящена анализу изменения свойств молекул водорода при фазовом переходе. С помощью простого геометрического критерия, из ансамбля атомов выделяются пары, образующие молекулу. Физический смысл критерия состоит в том, что атомы должны совершить как минимум одно колебание друг относительно друга, что напоминает критерий для построения линии Френкеля. Вслед за формальным определением молекулы предлагаются формулы, позволяющие оценить их концентрацию и время жизни.

В пятой главе описываются физические процессы, сопровождающие фазовой переход в разогретом плотном водороде. При фазовом переходе время жизни молекул резко падает на несколько порядков. Исходя из того, что время жизни у ионов H_2^+ меньше, чем у стабильных молекул H_2 , падение времени жизни интерпретируется как единовременная ионизация всех молекул H_2 до H_2^+ . Концентрация самих молекул при этом спадает плавно, что означает лишь частичную диссоциацию до H и H^+ . Степень диссоциации увеличивается с ростом плотности, и полная диссоциация достигается при давлениях в несколько раз больше давления фазового перехода.

При сравнении с экспериментом в работе была замечена интересная деталь: экспериментальные точки из разных работ, обозначающие ту или иную зафиксированную аномалию на фазовой диаграмме (обнаружение скрытой теплоты плавления, аномальные оптические свойства и т.п.), можно условно разделить на две группы. Одна группа точек располагается вдоль линий высокой концентрации димеров водорода, где происходит фазовый переход, а другая – в области достижения полной диссоциации.

В заключении перечислены основные результаты и выводы и приведены ссылки на публикации автора по теме диссертации.

В целом диссертационную работу Сартана Р.А. можно охарактеризовать как систематическое первопринципное исследование свойств разогретого плотного водорода. Достоверность результатов определяется – там, где это возможно – согласием с теоретическими и экспериментальными данными, в частности, с расчетами группы Редмера (ФРГ). Научная новизна работы подтверждается публикацией результатов в международных журналах и их апробацией на научных конференциях.

Вместе с тем, по диссертации можно сделать ряд замечаний.

1. В пятой главе, при сравнении с другими исследованиями, упоминается молекулярно-динамический расчет, где также производилась оценка концентрации молекул водорода. Различия в методах и результатах описаны, но нет объяснения, почему один подход предпочтительнее другого.

2. Также в пятой главе сравнение с экспериментом проведено слишком кратко. Не хватает более подробного объяснения, как результаты разных экспериментов можно было бы объяснить предлагаемым в диссертации механизмом фазового перехода.

3. В третьей главе при обсуждении линии Видома упоминается, что саму линию можно построить несколькими способами, но нет обоснования, почему используются именно минимумы производных давления по температуре.

4. Имеются стилистические неряшливости. Так, на стр. 21 в третьем абзаце последнее предложение неполное, что искажает его смысл; в выводах к главе 3 сказано, что критическую температуру можно оценить в 1500 К с точностью порядка тысяч кельвин, другими словами, сама оценка ниже точности.

Все перечисленные замечания носят рекомендательный характер и не снижают общую положительную оценку диссертационной работы Сартана Р.А. Изложение материала в диссертации ясное и логичное. Автор свободно владеет методами первопринципного моделирования, понимает их теоретические основы и хорошо разбирается в современной физике экстремальных состояний вещества.

Результаты диссертации своевременно опубликованы в 7 статьях в рецензируемых изданиях из перечня ВАК и представлены лично автором на 17 российских и международных конференциях по соответствующей тематике. Автореферат правильно и в полной мере отражает содержание диссертации. Личный вклад автора в результаты, представленные в работе, не вызывает сомнений. Содержание диссертации позволяет сделать вывод о соответствии темы диссертации паспорту специальности 1.3.9 – физика плазмы.

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 24.09.2013 г., (ред.

07.06.2021 г.), а ее автор Сарган Роман Александрович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

Отзыв составила:

старший научный сотрудник ИФВД РАН

к.ф.-м.н.



Магницкая Мария Викторовна

108840, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, стр. 14,

тел.: (495)-851-05-82, magma@yandex.ru

Подпись Магницкой Марии Викторовны заверяю

Ученый секретарь ИФВД РАН,

к.ф.-м.н.



Валянская Татьяна Валентиновна

108840, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, стр. 14,

тел.: (495)-851-05-82, hpp@hppi.troitsk.ru

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина РАН, 108840, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, стр. 14, тел.: (495)-851-05-82, e-mail: hpp@hppi.troitsk.ru