

малоисследованной области фазовой диаграммы, где значительно затруднено применение существующих теоретических моделей. Исследование неидеальной плазмы экстремальных параметров чрезвычайно важно для решения фундаментальных проблем строения вещества, адекватного описания природных явлений и для реализации современных и перспективных энергетических проектов.

Новизна полученных результатов состоит в создании нового метода моделирования метастабильных состояний в рамках квантовой молекулярной динамики, применяя который диссертанту удалось получить данные об уравнении состояния и компонентном составе сильно сжатого водородного флюида с учетом метастабильной области.

Научная и практическая значимость полученных в работе результатов состоит в следующем:

- Предложен метод моделирования метастабильных состояний в рамках метода квантовой молекулярной динамики.

- Получено уравнение состояния разогретого плотного водорода с метастабильной областью, существование которой ранее было предсказано лишь в рамках квазихимического представления.

- Предложен и применен новый метод оценки концентрации молекул H_2 и их времени жизни в рамках метода квантовой молекулярной динамики.

- В рамках прямого численного моделирования получено качественное описание процессов, сопровождающих фазовый переход, и получено представление о компонентном составе плотного водорода в области фазового перехода.

Степень достоверности полученных результатов является высокой, что подтверждается, с одной стороны, изложением материалов диссертационной работы в рецензируемых изданиях, индексируемых в отечественных и международных базах данных, а с другой стороны, непротиворечивостью полученных закономерностей и данных, известных из научной литературы. В

работе использованы самые современные математические методы и методы математического моделирования. Обсуждение опирается на надежно установленные факты и закономерности. Выводы соответствуют содержанию разделов диссертации.

Структура и общее содержание диссертационной работы

Диссертационная работа Сартана Романа Александровича по содержанию и структуре отвечает научно-квалификационной работе на соискание ученой степени кандидата наук. Работа изложена на 65 страницах машинописного текста, проиллюстрирована 22 рисунками и содержит 1 таблицу. Работа состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы, содержащего 76 наименований.

Во введении изложены цели, обоснована научная новизна и практическая значимость проведенных исследований, описана методология исследования представлены положения, представлены данные о достоверности полученных результатов и апробации работы.

Первая глава представляет собой обзор имеющихся на данный момент работ по экспериментальному и теоретическому исследованию фазовых переходов в неидеальной водородной плазме, плазменному фазовому переходу и переходу флюид-флюид в разогретом плотном водороде. В главе содержится описание, основополагающие уравнения и идеология применяемых методов квантовой молекулярной динамики используемых в настоящее время для изучения неидеальной плазмы. Особое внимание уделено конкретной реализации метода прямого численного моделирования, применяемого в настоящей работе.

Во второй главе представлен способ получения метастабильных состояний в рамках метода квантовой молекулярной динамики. Описаны все параметры моделирования, включая число атомов, тип термостата, вид обменно-корреляционной энергии в методе функционала плотности для расчета электронных состояний, метод расчета электропроводности.

Рассмотрена структура парной корреляционной функции (ПКФ) при различных плотностях, соответствующих молекулярному и ионизованному состоянию водорода, отмечена корреляция первого пика ПКФ и давления на МД-траектории и связь молекулярного и ионизованного состояния с электропроводностью. Описана методика расчета метастабильных состояний, указаны условия для достижения метастабильности и приведены результаты расчетов на примере изотермы 700К.

Третья глава посвящена рассмотрению уравнения состояния разогретого плотного водорода. Детально проанализирован вид изотерм водорода для температур 700 и 1000К. При этом обе изотермы построены с использованной во второй главе методики получения метастабильных состояний. Сделан вывод, что фазовый переход в разогретом плотном водороде является переходом первого рода. Замечено, что размер метастабильной области зависит от количества частиц. Проведена оценка параметров критической точки в разогретом плотном водороде и проанализирован вид рассчитанной линии Видома. Отмечено, что изотермы имеют скошенный вид с сильным перекрытием равновесных и метастабильных ветвей и сравнительно небольшой разницей удельных объемов. Проведено сравнение полученных результатов с экспериментом и расчетами других авторов.

В четвертой главе представлены результаты анализа свойств молекулярной фазы, включая свойства молекулы H_2 , время жизни этой молекулы и ее концентрация в водородной плазме при различных плотностях. Для этого введено определение “молекулы”, основанное на геометрических критериях, которые позволяют отличить “фиктивную” связь от “реальной”. Введенные критерии позволили определить концентрацию молекул H_2 и степень диссоциации в водородном флюиде. Указано, что применяемые методы не позволяют выявить более сложные протонные кластеры (молекулы H_3).

Пятая глава посвящена анализу физических процессов, сопровождающих фазовый переход в разогретом плотном водороде. На основе

результатов расчета показано, что молекулярная фаза практически полностью состоит из молекул водорода, включая равновесные и метастабильные состояния, в то время как в проводящей фазе доля молекул сокращается с ростом плотности, захватывая и переходную область (область, где наблюдается скачок плотности), а полная диссоциация достигается при давлениях, значительно превышающих давление фазового перехода. Замечено, что при высоких плотностях доля молекул в значительной мере зависит от конкретного определения молекулы (выбора геометрических критериев). Уменьшение доли молекул отражается и на виде парной корреляционной функции и, наряду с этим, сказывается на времени жизни, приводя к его резкому уменьшению. Показано, что при фазовом переходе среднее межатомное расстояние увеличивается небольшим, но резким скачком на 5-8%, а снижение молекулярной стабильности после фазового перехода согласуется с результатами эксперимента.

В заключении сформулированы основные результаты работы.

К основным результатам, полученным автором, и имеющим несомненную научную значимость, следует отнести:

1. Разработан способ моделирования метастабильных состояний.
2. Построено уравнение состояния разогретого плотного водорода вдоль изотерм 700, 1000 и 1500 К. Получены метастабильные состояния молекулярной фазы для изотерм 700 и 1000 К, наличие которых указывает на то, что фазовый переход является фазовым переходом первого рода, а вид изотерм соответствует предсказанию плазменного фазового перехода.
3. На основе формального определения “молекулы” предложен метод оценки концентрации и времени жизни двухатомных молекул водорода.
4. Рассчитаны изменения концентрации, времени жизни и среднего межатомного расстояния молекул водорода при фазовом переходе. При этом концентрация молекул составляет 100% в непроводящей фазе и плавно уменьшается после фазового перехода с увеличением плотности, а время жизни 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 скачкообразную ионизацию молекул H_2 при фазовом переходе, и последующую постепенную диссоциацию с ростом плотности.

Рекомендации по использованию результатов и выводов работы

Полученные в диссертационной работе новые результаты в области компьютерного моделирования процессов в сильно неидеальной плазме и в веществе с высокой плотностью энергии представляют несомненный интерес для специалистов в данных областях. С полученными результатами целесообразно ознакомить следующие организации: Московский государственный университет, Санкт-Петербургский государственный университет, ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН, НИЦ Курчатовский Институт, Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики и др.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались на 14 российских и международных конференциях как у нас в стране, так и за рубежом.

Список публикаций по материалам диссертации представлен в 17 печатных изданиях, 7 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК, 10 — в тезисах докладов.

По диссертационной работе можно сделать следующие **замечания**.

1. Текст диссертации изобилует по всему тексту очень большим количеством орфографических, стилистических ошибок, опечаток, часто используются словосочетания, не являющиеся общепринятыми, допущены недопустимые вольности в использовании русского языка, что значительно затрудняет чтение диссертации.

2. При описании параметров моделирования во второй главе рассмотрение конкретной модели, применяемой в настоящей работе, не подкреплено достаточным количеством ссылок.

3. Как известно, давление является характеристикой вещества, находящегося в термодинамическом равновесии. Так, на стр.19 сказано: "Давление и температура вычислялись как средние значения вдоль МД-траектории после выхода на релаксацию через 1-2 пс после начала моделирования". Не пояснено, что в связи с этим означают осцилляции давления на рис.6 и 7 с периодом в несколько фемтосекунд.

4. В главе 2 используются словосочетания "отрелаксированная траектория" и "релаксируя конфигурацию". Не пояснен их смысл.

5. В выводах к главе 3 написано, что линия сосуществования фаз на плоскости объем–давление имеет вид длинного и узкого "языка". Не показано, и не пояснено как этот "язык" выглядит.

6. Здесь же указана оценка критической температуры в 1500К. Непонятно какой смысл имеет такая оценка при неопределенности в несколько тысяч Кельвин. Несколько тысяч - это сколько 2000, 5000, 10000?

7. Неудачное на наш взгляд наименование оси ординат на рис. 13.

8. Следовало бы пояснить, что подтверждает или опровергает сравнение расчета и эксперимента на рис.20-22.

Все перечисленные выше замечания не носят принципиального характера и не затрагивают основных результатов диссертационной работы. Изложенные в диссертации результаты достаточно хорошо обоснованы и прошли апробацию на международных и всероссийских конференциях. На основе проведенных исследований опубликовано 7 научных статей в изданиях, рекомендуемых ВАК.

Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации.

Заключение по диссертационной работе

Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая по актуальности поставленных задач, научной новизне, теоретической и практической значимости, достоверности полученных результатов, степени обоснованности выводов, объему выполненных исследований и уровню публикаций в открытой печати полностью соответствует квалификационным требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г., предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук, а ее автор Сартан Роман Александрович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

Диссертация была заслушана и обсуждена на заседании семинара Отдела экстремальных состояний вещества ФГБУН ФИЦ ПХФ и МХ РАН 18 ноября 2022 года (протокол № 11).

Отзыв составил:

Главный научный сотрудник,

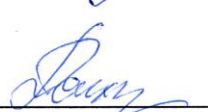
Член-корреспондент РАН



В.Б. Минцев

Ученый секретарь ФИЦ ПХФ и МХ РАН

д.х.н.



Б.Л. Психа

+7(496) 522 19 32, psi@icp.ac.ru

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и
медицинской химии Российской академии наук 142432, Московская область,
г. Черноголовка, проспект академика Семенова, 1 ,тел. +7(495) 993-57-07, +7
(496) 522-44-74, e-mail: director@icp.ac.ru, office@icp.ac.ru.