

## ОТЗЫВ

официального оппонента Петрова Юрия Васильевича  
на диссертационную работу Дьячкова Сергея Александровича  
«Квазиклассическая модель термодинамических свойств электронов с учетом состояний дискретного спектра и область ее применимости», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности  
01.04.08 –  
«Физика плазмы».

В диссертации Дьячкова С. А. разрабатывается модель для исследования термодинамических свойств электронов плазмы с плотностью ниже нормальной, где становятся одного порядка вклады состояний дискретного и непрерывного спектра в статистическую сумму. При этом используется приближение Томаса-Ферми для среднего атома, а состояния дискретного спектра в квазиклассическом приближении учитываются согласованным образом в виде оболочечных поправок к электронным термодинамическим функциям. Таким образом, получается достаточно широкодиапазонная модель термодинамических свойств электронов плазмы.

**Краткая характеристика основного содержания диссертации.** Диссертационная работа изложена на 135 страницах машинописного текста и состоит из списка используемых обозначений, введения, обзора литературы, трех глав, заключения, трех приложений и списка литературы, включающего 113 наименований. Диссертация содержит 36 рисунков и 14 таблиц.

В обзоре литературы приводится краткий исторический обзор основных квантовомеханических моделей расчета самосогласованного поля электронов и ядер: модели Томаса-Ферми, Хартри-Фока, Хартри-Фока-Слэтера, теория функционала электронной плотности. Проведено обсуждение преимуществ и недостатков рассматриваемых подходов, их применимость для расчета состояния вещества в экстремальных условиях высоких температур, сильных сжатий и разрежений. Рассматриваются актуальные исследования в этой области, в том числе применение модели псевдоатома при рассмотрении экстремальных состояний вещества.

В первой главе дана общая постановка задачи нахождения свободной энергии и других термодинамических функций системы электронов и ядер, вводятся рассматриваемые в диссертации приближения: модель Томаса-Ферми, приближение электронейтральной сферической атомной ячейки. Произведен учет квантовых и обменных эффектов в виде поправки к электронной плотности и потенциала Томаса-Ферми. Приведены основные формулы и схема расчета таких термодинамических величин, как энтропия, внутренняя энергия, давление, изохорная и изобарная теплоемкости, изотермическая и адиабатическая скорости звука. Нахождение таких параметров, как температура и концентрация ионов, при которых поправки сравниваются с самими величинами, позволило ограничить рабочую область по температуре и концентрации, и в частности, сделать вывод о неприменимости модели Томаса-Ферми для вырожденной неидеальной плазмы. При этом рассмотрение поправок только к тепловой части термодинамических функций как

разности значений этих функций при конечной и нулевой температурах показывает применимость томас-фермиевской модели к тепловой части и при более низких температурах.

Вторая глава диссертации посвящена анализу влияния оболочечной структуры электронных уровней атомов на термодинамические функции. Автор использует квазиклассическое приближение: уровни энергии на электронных оболочках определяются с помощью условия квантования Бора-Зоммерфельда, а для волновых функций используется квазиклассическое решение в сферически-симметричном потенциале Томаса-Ферми. Полученные данные используются для нахождения электронной плотности дискретного спектра, пространственное распределение которой имеет осцилляции, характерные для электронных оболочек, которые отсутствуют в приближении Томаса-Ферми. При высоких температурах учет всех заполняемых при возбуждении дискретных оболочечных состояний становится слишком громоздким, поэтому дискретный оболочечный спектр ограничивается некоторой энергией, и выше нее считается непрерывным. Автор особое внимание уделяет вопросу выбора граничной энергии между дискретным и непрерывным спектром, для чего им разработана специальная процедура нахождения этой граничной энергии. Найденные таким образом значения граничной энергии и число состояний ниже этих значений проиллюстрированы на примере железа и серебра. В результате, используя разность между электронной плотностью с дискретным и непрерывным суммированием состояний ниже граничной энергии, автор использует полученную оболочечную поправку к электронной плотности для уточнения значений свободной и внутренней энергии, энтропии и давления электронов с помощью соответствующих оболочечных поправок к ним.

В третьей главе автор исследует область применимости модели по плотности и температуре с учетом введенных во второй главе диссертации оболочечных поправок и всех других поправок к модели Томаса-Ферми, рассмотренных в диссертации. Вывод, сделанный здесь, совпадает с тем, что был сделан в первой главе – модель неприменима для описания плазмы с параметром неидеальности, превышающим единицу. Результаты расчета по предложенной автором диссертации модели сравниваются с другими апробированными методами: в области разреженной плазмы с хорошо работающей здесь химической моделью Саха, а также в области нормальных плотностей с считающимся здесь эталонным методом функционала плотности. В случае разреженной плазмы получено очень хорошее совпадение результатов для лития и алюминия, что, в частности, свидетельствует о малой ошибке в определении потенциалов ионизации. Для плазмы нормальной плотности погрешность значительно уменьшается с ростом температуры, так что модель, созданная автором для расчета электронной структуры и нахождения термодинамических функций, может применяться уже при температурах выше 30 эВ. При этом переходная область между плотной и разреженной плазмой описывается в рамках единой модели.

В заключении сформулированы основные выводы из результатов диссертационной работы. Основной текст диссертации свидетельствует о том, что цели работы достигнуты, а используемые научные положения обоснованы. Материал изложен ясно, последовательно и логично и сопровождается хорошими иллюстрациями. Результаты диссертационной работы были представлены на

российских и международных конференциях (всего опубликовано 19 тезисов докладов на конференциях), а также опубликованы в 4 рецензируемых изданиях, входящих в перечень ВАК.

Текст диссертации дополняют три приложения, которые содержат полезную информацию о свойствах функций Ферми-Дирака, выводе формул для термодинамических величин в модели Томаса-Ферми, а также примеры программ для проведения типовых расчетов.

**Актуальность темы.** Широкодиапазонные термодинамические характеристики вещества востребованы во многих областях современной физики. В частности, плазменные состояния с большим диапазоном изменения плотности и температуры возникают при воздействии интенсивных потоков энергии на конденсированное вещество, когда через него пропускаются мощные импульсы тока, при облучении интенсивными потоками заряженных частиц, при воздействии интенсивного лазерного излучения. Поэтому адекватное представление термодинамических характеристик плазменного состояния вещества в таких условиях является чрезвычайно важным.

**Научная новизна.** В диссертации впервые показано, что оболочечная поправка к томас-фермиевскому числу состояний может быть получена как разница между числом состояний дискретного спектра электронных оболочек и числом состояний в приближении Томаса-Ферми ниже некоторой граничной энергии. Впервые вычислены такие оболочечные поправки к электростатическому потенциалу, электронной плотности, числу состояний, химическому потенциалу и другим термодинамическим функциям, используя квазиклассические волновые функции центрально-симметричного поля. Количественно определены границы применимости приближения Томаса-Ферми по отношению к квантовым, обменным и оболочечным поправкам.

**Обоснованность и достоверность научных положений и выводов.** В диссертационной работе Дьячкова С. А. содержатся новые важные идеи и результаты в области физики плазменного состояния, достаточно полно отраженные в публикациях автора. Обоснованность работы обусловлена применением в диссертации корректных физических моделей (моделей Томаса-Ферми, Томаса-Ферми с поправками, квазиклассического приближения), использованием их в соответствующей области параметров. Достоверность полученных результатов продемонстрирована сравнением с апробированными моделями в области параметров, где они адекватно описывают результаты экспериментов.

**Теоретическая значимость работы.** Модель, предложенная автором диссертации, применима в области, переходной между горячей плазмой нормальной плотности и сильно разреженным состоянием плазмы, важной при изучении взаимодействия ультракоротких лазерных импульсов с конденсированным веществом. Она имеет большую теоретическую значимость, т.к. может служить основой для расчета термодинамических свойств образующейся при этом плазмы в соответствующем диапазоне плотности и температуры.

**Практическая значимость работы.** Предоставленный автором комплекс программ для расчета уравнений состояния и других термодинамических функций, а также энергетического спектра электронов в потенциале Томаса-Ферми в рассматриваемой в диссертации области температур и плотностей имеет прямое

практическое приложение. Он может быть использован в интенсивно проводимых исследованиях свойств экстремального состояния вещества, в частности, в таких научных учреждениях, как в ОИВТ РАН, ФИАН, ИПХФ РАН, ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН.

**Апробация работы.** Основные результаты диссертации докладывались на российских (Долгопрудный, Москва) и международных (Эльбрус, Саров (Россия), Пардубице (Чехия), Хиршег (Австрия)) конференциях. Авторитетность этих конференций является подтверждением важности выполненной в диссертации работы.

**Публикации.** Материалы диссертации опубликованы в 25 печатных работах, из них 4 статьи в рецензируемых журналах, 2 статьи в сборниках трудов конференций и 19 тезисов докладов.

**Личный вклад автора.** Содержание диссертации и ее основные положения, выносимые на защиту, отражают личный вклад автора в опубликованные работы. Комплекс программ был полностью разработан автором диссертации, опубликован в открытом виде, все представленные результаты расчетов могут быть воспроизведены пользователями этого комплекса. На основании результатов исследования автором сформулированы и обоснованы выводы и заключения.

**Замечания.** По содержанию работы могут быть сделаны следующие замечания:

1. На стр. 11 диссертации в характеристиках созданного автором программного комплекса говорится, что он позволяет производить расчеты основных термодинамических функций электронов в диапазоне температур от 0 до  $10^8$  эВ. Можно учесть также, что в рассматриваемых в диссертации тяжелых металлах, таких, как серебро и золото даже при нулевой температуре почти для половины электронов существенен их релятивизм. Вместе с тем в рассматриваемых в диссертации моделях вопросы релятивизма никак не обсуждаются.

2. Важным достоинством модели Томаса-Ферми является ее автомодельность по зарядовому числу ядра  $Z$ . Хотелось бы, чтобы в диссертации были обсуждены скейлинговые характеристики используемых поправок к термодинамическим функциям.

3. Для диссертации характерен хороший, ясный стиль изложение, четкое написание формул.

Но на стр. 36 при описании замены в интеграле в формуле (1.19) указана совсем не та, которая использована.

То же на стр. 37 при описании замены в интеграле в формуле (1.24).

А на стр. 84 и вовсе некорректно написана энергия Ферми.

Указанные замечания, конечно, не снижают общий высокий научный уровень диссертации и значимость полученных в ней результатов.

Диссертация Дьячкова С. А. представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем требованиям, предъявляемым пунктом 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013

года к диссертациям, представляемым на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 — Физика плазмы, а ее автор заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук.

с.н.с. сектора плазмы и лазеров  
ФГБУН ИТФ им. Ландау РАН  
д. ф.-м. н.  
e-mail: [uvp49@mail.ru](mailto:uvp49@mail.ru)  
Тел.: +74957029317



Петров Ю.В.

Подпись Петрова Юрия Васильевича заверяю:  
ученый секретарь ФГБУН ИТФ им. Ландау РАН,  
к. х. н.  
e-mail: [sakr@itp.ac.ru](mailto:sakr@itp.ac.ru)  
Тел.: 8 (495) 851-88-27



Крашаков С.А.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук  
142432, Московская обл., г. Черноголовка, просп. академика Семенова, д. 1-А  
Тел.: +74957029317  
Факс: +74957029317