

ОТЗЫВ

официального оппонента **Шпатаковской Галины Васильевны**
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».

Диссертация Дьячкова Сергея Александровича посвящена исследованию характеристик электронной компоненты плазмы в квазиклассическом приближении на основе статистической модели Томаса-Ферми (ТФ). **Актуальность** этой темы связана с использованием модели ТФ и ее модификаций в качестве необходимой части всякого широкодиапазонного уравнения состояния (ШУРС), претендующего на адекватное описание свойств вещества не только вблизи нормальных состояний, но и при экстремальных значениях температуры и плотности. Такие ШУРС применяются для математического моделирования физических процессов в задачах физики высоких плотностей энергии, в частности, для описания воздействия интенсивных потоков энергии на металлы. Диапазон изменения внешних параметров в этих процессах достаточно широк, и уравнение состояния должно описывать как высоко-температурную плазму, так и вырожденный электронный газ.

Модель ТФ является наиболее простой среди моделей самосогласованного поля. Эта простота достигается за счет игнорирования дискретной структуры спектра связанных состояний электронов. В модели ТФ их спектр предполагается непрерывным. Вследствие этого термодинамические свойства по этой модели описываются усредненно, не передавая, например, ступенчатый характер ионизации Больцмановской плазмы с ростом температуры.

Учесть оболочечные эффекты, т.е. влияние дискретности спектра, можно разными способами, как в виде поправок к модели ТФ, так и согласованным образом, например, в рамках модели Хартри-Фока-Слэтера или функционала плотности. Автор выбрал вариант с поправками, однако, в отличие от существующего подхода, предлагает рассчитывать квазиклассические дискретный спектр и волновые функции в потенциале ТФ, не решая уравнение Шредингера, чтобы далее вычислять дискретную часть электронной плотности путем суммирования по состояниям.

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, который включает 113 наименований. Всего в диссертации содержится 36 рисунков и 14 таблиц.

Во **Введении** обоснована актуальность рассматриваемой проблемы, сформулированы цели и задачи исследования, выделены новые научные аспекты в проделанной работе. Также обсуждается практическая значимость полученных результатов, и перечисляются выносимые на защиту положения.

В **обзоре литературы** автор подробно излагает историю представлений об электронной компоненте вещества, начиная с теории Лоренца и заканчивая современными методами вычисления электронных волновых функций и спектров в рамках теории функционала плотности. Поскольку включение этих результатов в молекулярно - динамический эксперимент сталкивается с рядом вычислительных трудностей, востребованными оказываются более простые методы описания электронной подсистемы. Такой сравнительно про-

стой квазиклассический метод в приближении среднего атома и предлагает в своей диссертации автор.

В первой главе на основе общего подхода статистической физики к описанию термодинамики электронной подсистемы во внешнем поле ядер рассматривается квазиклассическая модель Томаса-Ферми в сферической атомной ячейке. Это приближение является базой для основного содержания работы.

При решении уравнения ТФ используется метод, позволяющий получать результаты с заданной точностью. Подобный подход использует диссертант и для вычисления квантово-обменной поправки. Термодинамические функции (свободная энергия, давление, энтропия, энергия) и квантово-обменные поправки к ним, а также их первые и вторые производные вычисляются аналогичным образом. Диссертант прямым расчетом показал, что проблемная область для модели ТФ — низкие температуры и плотности, вблизи нормальной. Показано также, что область применимости тепловой части модели ТФ для давления и энергии оказывается шире чем полной модели ТФ. Критерием области применимости в этом случае служит относительная малость соответствующей квантово-обменной поправки.

Во второй главе подробно описывается методика расчета квазиклассического дискретного спектра и его учета в термодинамике. Ключевой момент заключается именно в использовании квазиклассического приближения: таким образом нет необходимости численно решать уравнение Шредингера. Это, при внесении лишь незначительной ошибки, значительно упрощает процедуру нахождения уровней энергии и волновых функций.

Для расчёта энергий дискретного спектра в потенциале ТФ используется условие квантования Бора-Зоммерфельда, а для соответствующих волновых функций — квазиклассические выражения через функции Бесселя дробного порядка. Построенные функции непрерывны со своими производными, а суммирование квадратов их модулей по квантовым числам n, l до некоторой граничной энергии ϵ_b позволяет правильно передать поведение радиальной электронной плотности в нуле, на периферии ячейки и ее оболочечные осцилляции.

Для выбора энергии ϵ_b , границы между дискретным и непрерывным спектрами, применяется условие термодинамического равновесия [53, с. 114]. Оно сводится к равенству точного и ТФ чисел состояний при нулевой температуре. Если это условие нарушено, полное число электронных состояний может стать отличным от заряда ядра и условие электронейтральности в атомной ячейке не будет соблюдено. Соответствующее уравнение имеет множество решений. В диссертации разработан специальный алгоритм нахождения величины ϵ_b : ограничившись некоторым n_{max} , определить все уровни до него включительно из условия квантования и, решив с этим спектром уравнение для числа состояний, выбрать максимальный корень.

Оболочечная поправка к радиальной плотности определяется как разность между плотностью, рассчитанной по квазиклассическим волновым функциям, и плотностью по модели ТФ, вычисляемыми до граничной энергии ϵ_b . При этом, в отличие от существующего подхода [90], анализируемая в диссертации оболочечная поправка включает в себя и пространственные осцилляции плотности, и учет суммирования по дискретным уровням в фазовом пространстве. В подходе [90] эти зависимости рассматривались отдельно, как результат последовательного разложения по параметру квазиклассичности, и подразделялись на «осцилляционные» и «оболочечные» эффекты соответственно. Именно это позволяло сохранять свойство автомодельности всех величин по атомному номеру. В подходе С.А.

Дьячкова автомодельность оболочечных поправок по атомному номеру теряется, но эта потеря компенсируется единством и согласованностью локальных (плотность) и интегральных (число состояний) величин.

Используя выражение для оболочечной поправки к электронной плотности, автор выводит формулы для поправок к термодинамическим функциям в первом порядке разложения по малому параметру. Для практических расчетов рекомендуется, как и в [90], пренебречь изменением самосогласованного потенциала за счет оболочечных эффектов.

В третьей главе исследуется область применимости модели Томаса-Ферми по отношению ко всем типам поправок. Показано, что дополнительный учет оболочечных поправок не приводит к существенным изменениям области применимости. Не менее важно выяснить количественное согласие с экспериментом. Так как в подходе автора проводится расчет только термодинамических функций электронов, он показывает сравнение расчета термического уравнения состояния лития и алюминия в области низких плотностей с моделью Саха, используя приближение идеального газа для ионов. Учет оболочечной поправки позволяет правильно воспроизвести оболочечные эффекты и добиться хорошего согласия с полуэмпирической моделью Саха, что косвенно подтверждает соответствие экспериментальных и расчетных потенциалов ионизации.

В области нормальных плотностей проводится сравнение теплового электронного давления в меди, рассчитанного по модели автора и по методу функционала плотности Кона-Шэма-Мермина, который в этой области значительно точнее и хорошо воспроизводит экспериментальные данные. Показано, что точность модели автора существенно увеличивается с температурой: при температуре 30 эВ ошибка составляет менее 5%, не превышая 15% в области применимости. При этом именно учет оболочечной поправки обеспечивает правильный наклон кривой давления.

В приложениях приводятся полезные сведения о функциях Ферми-Дирака, используемых при численных расчетах, а также примеры программ с использованием программного комплекса, разработанного автором для расчета электронной структуры и термодинамических функций электронов по модели ТФ и всех типов поправок к ним, упомянутых в диссертации.

В Заключение подводятся итоги проделанной работы, формулируются основные выводы.

По представленной работе можно задать следующие **вопросы** и высказать некоторые **замечания и пожелания**:

1. В очень подробном обзоре литературы тем не менее не нашлось места работам Г.В. Синько, который исследовал роль оболочечных поправок к модели ТФ и их вклад в термодинамику плазмы, используя модель ССП и программный комплекс РОСА (см. его Докт. дисс.).

2. С чем автор связывает заметные осцилляции давления на рис. 3.3 и 3.4 при увеличении плотности холодного вещества? Не есть ли это следствие «выдавливания» электронных оболочек, как это предсказывалось в давних работах [36], [37]? Но, как было показано позже [53]-[55], это – артефакт, связанный с предположением о резкой границе между дискретным и непрерывным спектрами. И, например, расчеты методом присоединенных плоских волн [A.K. McMahan and M. Ross High Pressure Science and Technology (New York: Plenum, 1979) Vol. 2] показали малость этого эффекта.

3. В ЗаклЮчении диссертации в пункте 1 автор пишет: «Разработан и реализован метод расчёта с заданной точностью самосогласованного потенциала, электронной плотности и

термодинамических функций электронов при нулевой и конечных температурах в рамках приближения Томаса-Ферми для среднего атома». Как это соотносится с результатами диссертации Шемякина О.П. 2010 года «Полуэмпирические уравнения состояния плотной плазмы на основе модели Томаса-Ферми»? Метод решения уравнения ТФ и вычисления первых и вторых производных с заданной точностью был там также использован. Что нового здесь внес диссертант?

4. Каковы перспективы усовершенствования предложенной модели? Может, в термодинамических характеристиках все же следует учесть вклад оболочечной поправки к самосогласованному потенциалу? Пробовал ли автор это делать?

5. Почему автор не включил в результаты создание соответствующего программного комплекса?

Замечания по оформлению работы:

1. На стр. 71, 72, 74 появляется без пояснения обозначение $I_{3/2}^{inc}$, не хватает отсылки к Приложению А.

2. На рисунках 3.3, 3.5 в подписях к кривым (со стрелочкой) пропущено “=1”. Аналогично в автореферате.

3. В списке литературы совпадают ссылки [53] и [70], есть опечатки.

4. Слово «сперва» (сс. 92, 100) лучше было бы заменить литературным «сначала».

5. Правый рисунок В.1 никак не описан.

Перечисленные недостатки ни в коей мере не снижают общей положительной оценки работы. Здесь надо отметить, что хотя многие теоретические вопросы усовершенствования модели ТФ были поставлены и в принципе решены еще в прошлом веке, их реализация в то время мотивировалась минимизацией вычислительных затрат и поэтому осуществлялась на основе использования созданных разными авторами универсальных таблиц для водорода. Однако, стыковка этих таблиц между собой и с аналитическими асимптотиками не всегда оказывается простой, что затрудняет их использование в современных вычислительных экспериментах. В настоящее время появилась возможность на базе мощных компьютеров и технологии распараллеливания решать соответствующие задачи **на новом уровне**. Этот уровень и предложил диссертант в своей работе, попутно **решая** и оставшиеся дискутируемые **теоретические проблемы**.

Цели работы достигнуты в полном объеме, научные положения и выводы автора обоснованы. Разработанная модель имеет большую **теоретическую** ценность, так как позволяет описывать состояние электронного газа в широкой переходной области между плотной и разреженной плазмой. Для удобства ее **практического** использования автором разработан эффективный программный комплекс, так что таблицы термодинамических величин можно получить для любого элемента периодической таблицы на персональном компьютере. Таким образом, работа является законченным исследованием, дающим **практический инструментарий** для многих приложений.

Достоверность полученных результатов подтверждается сопоставлением с результатами эталонной химической модели и методом функционала плотности, точными в областях своей применимости. **Результаты** работы опубликованы в 4 статьях в журналах, входящих в перечень ВАК, а также неоднократно обсуждались на международных научных конференциях. Автореферат в полноте отражает содержание диссертации.

Диссертация Дьячкова С.А. является завершенной научно-исследовательской работой, соответствующей требованиям, предъявляемым пунктом 9 Положения о порядке при-

суждения 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. Ее автор, Дьячков Сергей Александрович, несомненно заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук.

д. ф.-м. н.

эксперт-советник ИПМ им. М. В. Келдыша РАН

Шпатаковская Галина Васильевна

тел: +74992207223

e-mail: shpagalya@yandex.ru

Подпись Шпатаковской Галины Васильевны заверяю:

Ученый секретарь ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, к. ф.-м. н.

Маслов Александр Иванович

e-mail: maslov@imamod.ru



Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр

Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук

125047, г. Москва, Миусская пл., д. 4

Тел: +74999781314

e-mail: office@keldysh.ru