

Федеральное государственное унитарное предприятие
"РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР –
Всероссийский научно-исследовательский институт
технической физики имени академика Е. И. Забабахина"
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина")

ул. Васильева, 13, г. Снежинск Челябинской области, 456770
факс: (351-46) 5-22-33, 5-55-66, 3-26-25, 5-44-99
тел: (351-46) 3-26-25, 5-43-67
E-mail: vniitf@vniitf.ru

№ _____

На № _____ от _____

УТВЕРЖДАЮ

Директор Российского Федерального
Ядерного Центра — Всероссийского
научно-исследовательского института
технической физики им. академ.
Е.И. Забабахина (РФЯЦ-ВНИИТФ)

М.Е. Железнов

« _____ » 2018 г.

ОТЗЫВ

Ведущей организации 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 С.А. Дьячкова посвящена учёту оболочечных поправок к модели Томаса-Ферми с квантовыми и обменными поправками. Оболочечные эффекты в диссертации учитываются с использованием квазиклассических волновых функций состояний электронов дискретного спектра. Рассмотренная в диссертации модель позволяет уточнить модель Томаса-Ферми с квантовыми и обменными поправками, до сих пор часто используемую на практике. По сравнению с более последовательными ячеечными моделями вещества, в которых учёт оболочечных эффектов достигается путём численного решения уравнения Шрёдингера или Дирака, модель, предложенная в диссертации, проще в реализации и существенно менее требовательна к вычислительным ресурсам. Это определяет **актуальность темы диссертации**.

Диссертационная работа С. А. Дьячкова изложена на 135 страницах, содержит 36 рисунков и 14 таблиц. Диссертация состоит из списка используемых обозначений, введения, обзора литературы, трех глав, заключения, трех приложений и библиографии.

Новизна подхода автора заключается в явном использовании автором квазиклассических волновых функций для описания оболочечных эффектов. С.А. Дьячков впервые рассчитал оболочечные поправки к термодинамическим функциям электронов, заменив непрерывные томас-фермиевские состояния на дискретные до некоторой граничной энергии. Автором детально изучена область применимости предложенной им модели и найдено, что для сильнонеидеальной плазмы с параметром неидеальности порядка единицы и более введенные поправки уже не являются малыми, и, соответственно, использование модели в таких условиях не обосновано. При своей относительной простоте предложенная в диссертации модель удовлетворительно описывает оболочечные осцилляции в процессе температурной ионизации внутренних

электронных оболочек, хотя и несколько недооценивает амплитуду осцилляций при ионизации внешних оболочек (рисунок 3.1 в диссертации). Тем не менее, для многих приложений физическая точность модели вполне приемлема, особенно для элементов с большим зарядом ядра.

Поэтому предложенная автором модель в рамках её области применимости имеет **практическую значимость** и может использоваться при построении широкодиапазонных уравнений состояния, получаемых путём сшивки результатов расчётов по различным моделям. Такие уравнения состояния могут применяться для моделирования экспериментов в области физики экстремальных состояний вещества в профильных научных организациях. Кроме того, модель, предложенная С.А. Дьячковым, позволяет провести разумные оценки термодинамических свойств электронной подсистемы за сравнительно небольшое расчетное время, что на сегодняшний день является актуальным для решения многих прикладных задач.

Практическая значимость модели, рассмотренной в диссертации, может стать ещё выше, если будет проиллюстрирована корректность описания процесса ионизации давлением, т.е. отсутствие нефизичных скачков термодинамических величин при повышении плотности и/или снижении температуры вещества. В диссертации дискретные уровни энергии формально рассматриваются как при отрицательных, так и при положительных энергиях. При больших положительных энергиях, когда внешняя граница области, разрешённой для классического движения, отсутствует, эта граница формально полагается равной радиусу атомной ячейки. В данном контексте было бы также полезно показать, что при больших положительных энергиях такой подход вместе с формальным применением условия квантования Бора-Зоммерфельда и нормировкой волновых функций в объёме ячейки на единицу даёт правильную плотность состояний свободных электронов.

В качестве **рекомендации по дальнейшему развитию модели, представленной в диссертации**, можно предложить реализацию учёта ионных корреляций. Модели среднего атома с учётом ионных корреляций, такие как упомянутая в диссертации модель Старретта и Саумона, согласованным образом описывают электронную и ионную подсистемы плазмы. Учёт ионных корреляций делает модель более последовательной, но при этом время счёта и сложность реализации заметно возрастают. На данный момент учёт ионных корреляций по методу Старретта и Саумона выполнен только на основе моделей Томаса-Ферми, Томаса-Ферми-Дирака и модели с описанием всех состояний электронов при помощи численного решения уравнения Шрёдингера. Для промежуточной по физической точности модели Томаса-Ферми с поправками (квантовыми, обменными и оболочечными) учёт ионных корреляций ещё не проводился.

По тексту диссертации следует высказать ряд замечаний.

1. На стр. 7 сделано утверждение: «Кроме того, химическая модель использует экспериментальные или рассчитанные с помощью других методов данные о потенциалах ионизации и в этом смысле является полуэмпирической». Химическая модель может использовать потенциалы ионизации, рассчитанные последовательными методами современной теории атома (см., например, P.A. Loboda, V.V. Popova, A.A. Shadrin. *Chemical-picture-based modeling of thermodynamic properties of dense multicharged-ion plasmas using the superconfiguration approach*. Contrib. Plasma Phys. **49**, 738 – 747 (2009)).

Такая химическая модель не использует эмпирических данных, и поэтому её нельзя называть полуэмпирической.

2. На стр. 8 написано: «С другой стороны, метод Хартри-Фока и его обобщения используют для прецизионных расчётов дискретного спектра с помощью решения уравнения Шрёдингера для электронов, однако при высоких температурах учесть все состояния с ненулевыми числами заполнения становится невозможно». Если дискретный спектр формально распространяется на положительные энергии при помощи условия квантования Бора-Зоммерфельда, как это сделано в диссертации, то учёт большого числа состояний с различными главными квантовыми числами действительно очень трудоёмок. Но при численном решении уравнения Шрёдингера к дискретному спектру относят только состояния с отрицательными энергиями. Число таких состояний в модели среднего атома конечно (из-за короткодействующего характера потенциала), и их можно учесть полностью.

3. На стр. 20, 21 встречаются утверждения: «... изучение проводимости металлов с примесями в работе Фриделя [29] показало, что зачастую вокруг положительного заряда возникают связанные состояния электронов, а значит, радиальное распределение электронной плотности осциллирует, образуя оболочечную структуру, схожую с атомной», «... Хоэнберг и Кон элегантно продемонстрировали, что учёт градиентных поправок любого порядка не позволит выявить осцилляции Фриделя и, соответственно, оболочечную структуру атома». Оболочечная структура электронной плотности, соответствующая связанным состояниям, и фриделевские осцилляции – это разные вещи. Хотя фриделевские осцилляции также появляются в результате решения уравнения Шрёдингера, они возникают в электронной плотности свободных, а не связанных электронов. Фриделевские осцилляции возникают даже при отсутствии связанных состояний. Плотность связанных электронов имеет конечное число максимумов, а плотность свободных электронов имеет неограниченное число максимумов и минимумов, соответствующих фриделевским осцилляциям (при удалении от центрального ядра уменьшается только амплитуда осцилляций).

4. На стр. 22 – 23 написано: «... его» (Цинка) «модель описывает эффект ионизации давлением оболочек атома, связанный с тем, что по мере уменьшения размера атомной ячейки оболочки связанных электронных состояний последовательно оказываются на её границе и пропорционально амплитуде осцилляций увеличивают вклад в давление (рис. 4)». Из рисунка 4 как раз видно, что модель Цинка неправильно описывает ионизацию давлением. В этой модели при исчезновении дискретных оболочек возникают нефизичные скачки термодинамических величин. Подробно обсуждение ионизации давлением и в том числе невозможности её корректно описать при помощи модели Цинка см. в обзоре R.M. More. *Pressure ionization, resonances, and the continuity of bound and free states*. Adv. At. Mol. Phys. **21**, 305 – 356 (1985).

5. На стр. 30 – 31 написано: «Орбитальный и безорбитальный методы, таким образом, являются соответственно низкотемпературным и высокотемпературным пределами описания электронной подсистемы». Безорбитальный метод функционала плотности не позволяет учитывать оболочечные осцилляции термодинамических величин при температурной ионизации внутренних оболочек, которые существенны при высоких температурах. Поэтому неясно, в каком смысле он назван высокотемпературным пределом описания электронной подсистемы.

6. На стр. 32 написано: «Согласованный учёт дискретного и непрерывного спектра состояний электронов в этом случае позволит существенно расширить возможности псевдоатомного подхода ...». Такая задача уже решена, см. работу С.Е. Starrett, D. Saumon. *Equation of state of dense plasmas with pseudoatom molecular dynamics*. Phys. Rev. E **93**, 063206 (2016).

7. На стр. 37 написано: «переходя к сферической ячейке радиуса r_0 и соответствующего объёма $V = 4\pi r_0^3 / 3$, в центре которой расположен точечный ион заряда Z ...». Фактически имеется в виду не ион, а ядро. В модели Томаса-Ферми можно определить ион (ионный остов) как совокупность ядра и электронов с отрицательной энергией. Такой ион не является точечным.

8. На стр. 38 в подписи к рисунку 1.1 написано: «При высоких температурах основная часть электронов локализована на границе ячейки ...». При высоких температурах электроны не локализованы на границе ячейки, а распределены почти равномерно по объёму ячейки.

9. На стр. 40 в правой части первой формулы системы (1.32) вместо $\frac{2}{3}ax\phi^{\frac{3}{2}}$ должно быть $\frac{2}{3}\frac{a}{\sqrt{x}}\phi^{\frac{3}{2}}$.

10. На стр. 44 в правой части первого уравнения системы (1.53) вместо $\frac{3}{2}aT^{\frac{3}{2}}xI_{1/2}\left(\frac{\phi(x)}{Tx}\right)$ должно быть $\frac{3}{2}aT^{\frac{1}{2}}xI_{1/2}\left(\frac{\phi(x)}{Tx}\right)$.

11. На стр. 58 неверно записано условие ортонормированности радиальных волновых функций. Вместо

$$\int_0^{r_0} R_{nl}(r)R_{n'l'}(r)dr = \delta_{nn'}\delta_{ll'}, \text{ должно быть } \int_0^{r_0} R_{nl}(r)R_{n'l}(r)dr = \delta_{nn'}.$$

— как известно, ортогональность волновых функций с различными орбитальными квантовыми числами обеспечивается не радиальными, а угловыми компонентами волновых функций.

Кроме того, волновые функции связанных электронов на внешних оболочках могут быть не локализованы в пределах атомной ячейки. В этом случае приведённое выше правильное условие ортонормированности должно заменяться на ему подобное с интегрированием не до r_0 , а до ∞ .

Далее, в диссертации проводится формальное обобщение дискретного спектра на положительные энергии. Получаемая волновая функция электрона с положительной энергией по существу представляет собой волновую функцию свободного электрона (с точностью до нормировки). Соответственно, при больших положительных энергиях квазиклассические волновые функции, используемые в диссертации, будут близки к точным решениям уравнения Шрёдингера, для которых условие ортогональности, как известно, имеет вид:

$$\int_0^{\infty} R_{\varepsilon l}(r)R_{\varepsilon' l}(r)dr = 0 \quad (\varepsilon \neq \varepsilon').$$

Здесь интегрирование также ведётся в пределах от 0 до ∞ , а не до r_0 .

12. В диссертации используются квазиклассические волновые функции в виде линейной комбинации «внутренней» функции $R_{nl}^{(i)}(r)$ и «внешней» функции $R_{nl}^{(o)}(r)$

$$R_{nl}(r) = (1 - a(r))R_{nl}^{(i)}(r) + a(r)R_{nl}^{(o)}(r),$$

отвечающих внутренней и внешней точкам поворота r_i и r_o ($p_{nl}(r_i) = p_{nl}(r_o) = 0$),

$$a(r) = \xi_i(r) / \xi_i(r_o), \quad \xi_i(r) = \left| \int_{r_i}^r p_{nl}(r') dr' \right|, \quad p_{nl}(r) = \sqrt{2 \left(\varepsilon_{nl} + U(r) - \frac{l(l+1)}{2r^2} \right)}.$$

Однако при больших положительных энергиях электрона, когда граница атомной ячейки $r = r_0$ находится в области, разрешённой для классического движения, внешняя точка поворота r_o (которая в этом случае отсутствует) в диссертации заменяется на r_0 (примеры таких расчётов приведены в таблице В.1 на стр. 102). В этом случае использовать «внешнюю» волновую функцию

$$R_{nl}^{(o)}(r) = \frac{C_o}{\pi} \sqrt{\frac{\xi_o}{p_{nl}}} (J_{-1/3}(\xi_o) + J_{1/3}(\xi_o)), \quad \xi_o(r) = \left| \int_{r_o}^r p_{nl}(r') dr' \right|$$

было бы некорректно, т.к. при этом $p_{nl}(r_0) > 0$ (точка $r = r_0$ находится в классически разрешённой области), $\xi_o(r_0) = 0$ и, соответственно, $R_{nl}^{(o)}(r_0) = 0$. А поскольку при $r = r_0$ $R_{nl}(r) = R_{nl}^{(o)}(r)$, то и $R_{nl}(r_0) = 0$. Такой результат был бы нефизичен — он означал бы искусственное зануление на границе ячейки волновой функции, которая по существу является волновой функцией свободного электрона. Поэтому в тех случаях, когда граница атомной ячейки находится в классически разрешённой области, в расчётах, приведённых в диссертации, «внешняя» волновая функция, очевидно, не используется. Это позволяет избежать искусственного зануления волновых функций на границе ячейки при больших энергиях.

В этой связи следует отметить потенциальный недостаток рассматриваемой модели, который, по-видимому, потребуется устранить в дальнейшем. Пусть при двух близких значениях температуры и плотности вещества для состояний с одними и теми же квантовыми числами в одном случае граница ячейки находится в классически разрешённой, а в другом случае — в классически запрещённой области. В этих случаях поведение волновой функции вблизи границы ячейки качественно отличается (в первом случае волновая функция не содержит «внешнюю» часть, а во втором случае — содержит). В результате возможны нефизичные скачки термодинамических величин при малых изменениях температуры и плотности (о величине этих скачков заранее судить сложно).

13. Оболочечные поправки к потенциалу δU_{sh} и химическому потенциалу $\delta \mu_{sh}$ в диссертации находятся при решении краевой задачи (2.9) (стр. 59). Энергия ε_b выбирается из условия (2.25) (стр. 65). При этом на стр. 64 ещё приводится условие (2.24):

$$N(\mu) \Big|_{\varepsilon < \varepsilon_b} = N_{TF}(\mu_{TF}) \Big|_{\varepsilon < \varepsilon_b}$$

и утверждается, что это условие должно выполняться. Однако если значения μ_{TF} (химический потенциал по модели Томаса-Ферми), $\mu = \mu_{TF} + \delta\mu_{sh}$ и ε_b уже найдены из других условий, то неясно, как можно удовлетворить условию (2.24).

14. Стр. 72 – 73. Утверждается, что если в формуле (2.34) пренебречь величиной δU_{sh} , то получится $\delta_{sh} F_{TF} = \delta\mu_{sh} Z$. Вместо этого, однако, получается

$$\delta_{sh} F_{TF} = \delta\mu_{sh} \frac{\sqrt{2}}{2\pi^2} T^{1/2} \int_0^{r_0} (\Phi_{TF}(r) - U_i(r)) I'_{1/2} \left(\frac{\Phi_{TF}(r)}{T} \right) 4\pi r^2 dr,$$

что не приводится к $\delta\mu_{sh} Z$.

15. В правой части формулы (2.41) на стр. 74 пропущено слагаемое $\frac{1}{2} \delta\mu_{sh} Z$.

16. Стр. 74. Утверждается, что формула (2.42)

$$\delta E = \left(\frac{3}{2} Z - \int_0^{r_0} \Phi_{TF} \frac{\partial \rho_{TF}}{\partial \mu} 4\pi r^2 dr \right) \delta\mu_{sh}$$

следует из (2.41), если в (2.41) пренебречь величиной δU_{sh} . Однако в таком приближении из (2.41) (если учесть пропущенное слагаемое $\frac{1}{2} \delta\mu_{sh} Z$) следует

$$\delta E = \left(\frac{3}{2} Z - \frac{1}{2} \int_0^{r_0} (\Phi_{TF} + U_i) \frac{\partial \rho_{TF}}{\partial \mu} 4\pi r^2 dr \right) \delta\mu_{sh},$$

что не совпадает с (2.42).

17. В формуле (2.45) на стр. 75 слагаемое $\frac{\delta\mu_{sh}}{2T} Z$ должно быть со знаком «+». В этом случае в формуле (2.47) на стр. 76 вместо $\frac{Z}{2}$ должно быть $\frac{3Z}{2}$.

18. На стр. 78 написано: «Химическая модель плазмы достоверно воспроизводит термодинамику разреженной плазмы, поэтому результаты расчёта по ней можно использовать в качестве эталонных». На самом деле точность химической модели сильно зависит от полноты учёта возбуждённых состояний ионов. Недостаточно полный учёт возбуждённых состояний может приводить к переоценке амплитуды оболочечных осцилляций, в том числе для разреженной плазмы.

19. На рисунке В.1 (стр. 97) потенциал имеет неправильный знак.

20. В диссертации было бы желательно привести больше результатов расчётов термодинамических величин, в том числе вдоль ударных адиабат и холодных кривых. Кроме того, было бы полезно показать, как влияет введённая оболочечная поправка к модели Томаса-Ферми на расчётные значения нормальной плотности, которые не воспроизводятся моделью Томаса-Ферми с квантовыми и обменными поправками. Хотя при низких температурах вблизи нормальной плотности модель формально неприменима (поправки не малы по сравнению с основными слагаемыми), важно знать, насколько при этом велика погрешность, которую даёт модель.

Высказанные замечания в целом не снижают общее положительное впечатление о диссертационной работе, выполненной на достаточно высоком научном уровне, и не влияют на значимость её основных результатов, которые в полной мере отражены в

отечественных и зарубежных публикациях и представлены на 19 российских и международных конференциях

Тема диссертации соответствует указанной научной специальности 01.04.08 — Физика плазмы. Автореферат правильно и полно отражает содержание диссертации.

Диссертация С.А. Дьячкова представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. Дьячков Сергей Александрович заслуживает присуждения ему учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 — Физика плазмы.

Диссертация С. А. Дьячкова и отзыв на неё обсуждены и одобрены на заседании научно-технического совета (НТС) Научно-теоретического отделения №1 (НТО-1) Федерального государственного унитарного предприятия «Российский Федеральный Ядерный Центр — Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. академ. Е.И. Забабахина (ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина»», протокол № 8 от 29.11.2018.

Отзыв составили:

начальник отдела НТО-1 ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина»

д.ф.-м.н. Лобода Петр Анатольевич

456770, г. Снежинск Челябинской обл., ул. Васильева 13, (35146) 5-63-63,
p.a.loboda@vniitf.ru,



29.11.2018

научный сотрудник НТО-1 ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина»

к.ф.-м.н. Овечкин Антон Александрович

456770, г. Снежинск Челябинской обл., ул. Васильева 13, (35146) 5-65-60,
a.a.ovechkin@vniitf.ru.

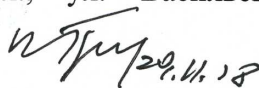


29.11.2018

Председатель НТС НТО-1 ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина»

д. ф.-м. н. Гребёнкин Константин Фридрихович

456770, г. Снежинск Челябинской обл., ул. Васильева 13, (35146) 5-53-43,
k.f.grebyonkin@vniitf.ru.

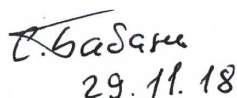


29.11.18

Секретарь НТС НТО-1 ФГУП «РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е.И. Забабахина»

к. ф.-м. н. Бабань Сергей Андреевич

456770, г. Снежинск Челябинской обл., ул. Васильева 13, (35146) 5-65-60,
s.a.baban@vniitf.ru.



29.11.18