

О Т З Ы В

официального оппонента о диссертационной работе КНЯЗЕВА Дмитрия Владимировича «Расчет электропроводности, теплопроводности и оптических свойств плотной плазмы на основе метода квантовой молекулярной динамики и формулы Кубо–Гринвуда» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04. 08 – физика плазмы

Диссертация Д.В. Князева посвящена актуальной теме – изучению электропроводности, теплопроводности и оптических свойств плотной плазмы. Подобные исследования представляют интерес как для фундаментальной физики экстремальных состояний вещества (например, при сверхвысоких давлениях и температурах), так и для технических приложений. В настоящее время поведение вещества в состоянии плотной плазмы изучается в многочисленных экспериментах по ударно-волновому сжатию, воздействию ультракоротких лазерных импульсов на вещество, электровзрыву металлов и др. Информация о переносных и оптических свойствах плотной плазмы является очень полезной при проведении таких исследований. Однако прямое измерение свойств плотной плазмы представляет значительные экспериментальные трудности. Простые теоретические модели также зачастую плохо применимы в этой области. По этой причине все более востребованными становятся численные расчеты свойств плотной плазмы из первых принципов, основанные на теории функционала плотности и компьютерном моделировании методом квантовой молекулярной динамики. В диссертации Д.В. Князева указанный подход был применен для расчета свойств плазмы алюминия и плазмы эффективного состава CH_2 при высоких температурах. Для вычисления переносных и оптических свойств была запрограммирована формула Кубо–Гринвуда.

Диссертационная работа Д.В. Князева состоит из предисловия, введения, обзора литературы, шести глав, заключения и двух приложений. Общий объем диссертации – 240 страниц машинописного текста, включая 39 рисунков и 7 таблиц. В списке литературы приведено 117 наименований.

В предисловии содержатся общие сведения о структуре диссертации.

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

В обзоре литературы на конкретных примерах продемонстрирована потребность в расчете электропроводности, теплопроводности и оптических свойств при анализе и численном моделировании различных экспериментов в области экстремальных состояний вещества. Обсуждается место подхода, используемого в диссертации, среди других методов расчета переносных и оптических свойств. Выполнен обзор расчетов, проведенных ранее по методике, используемой в диссертации Д.В. Князева.

В первой главе описан метод расчета, основанный на квантовой молекулярной динамике, теории функционала плотности и формуле Кубо–Гринвуда. Обсуждаются ограничения используемого подхода и область его применимости.

Во второй главе подробно обсуждаются некоторые модели расчета переносных и оптических свойств, которые далее (в главе 5) используются для сравнения с результатами, полученными автором для алюминия. Все рассмотренные модели, описывающие квантовую плазму, можно свести к теории Друде с различными выражениями для времени релаксации.

В третьей главе исследована зависимость полученных результатов от выбора технических параметров расчета. Выполнена оценка погрешности расчета для статической электропроводности.

В четвертой главе описана верификация используемого подхода. Результаты диссертации сравниваются с расчетами других авторов, выполненными аналогичным методом, а также с экспериментальными и справочными данными.

В пятой главе приводятся результаты расчетов переносных и оптических свойств алюминиевой плазмы при нормальной плотности в двухтемпературном случае, когда температура электронов может быть выше температуры ионов. На основе полученных результатов построена эмпирическая аппроксимация, описывающая температурные зависимости свойств алюминиевой плазмы в рассматриваемом диапазоне температур. Показано, что рассчитанные свойства можно описать теорией Друде, если использовать для времени релаксации выражение, предложенное в диссертации.

В шестой главе приведены результаты расчетов термодинамических, переносных и оптических свойств плазмы эффективного состава CH_2 при постоянной плотности. Основным результатом этой главы является полученный в расчетах скачкообразный рост электропроводности при повышении температуры от 5 кК до 10 кК. Предложено объяснение скачка электропроводности на основе анализа плотности электронных состояний.

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

В приложения вынесены таблицы, содержащие полученные в диссертации данные по переносным свойствам плазмы Al и по термодинамическим и переносным свойствам плазмы эффективного состава CH_2 .

В целом диссертационную работу Д.В. Князева можно охарактеризовать как систематическое первопринципное исследование свойств плотной плазмы Al и CH₂. Соответствие методики расчета объекту исследования, обоснованность и достоверность научных положений и выводов определяются, прежде всего, согласием полученных результатов с другими расчетами, с имеющимися справочными и экспериментальными данными. Об этом же свидетельствует выполненная автором большая методическая работа по выбору технических параметров и режимов расчета, верификация применяемого подхода и определение области его применимости, тщательная оценка вычислительной погрешности.

Результаты систематических исследований плазмы Al в двухтемпературном случае при нормальной плотности и плазмы CH₂ в широком диапазоне температур являются новыми. Научная новизна работы подтверждается публикацией результатов в международных журналах и их апробацией на научных конференциях.

Научную и практическую ценность в данной работе представляют как разработка методики расчета (в частности, написание параллельной программы), так и полученные результаты. Можно ожидать, что данные по свойствам плазмы CH₂ найдут свое применение для улучшения характеристик мощных лазерных импульсов. Результаты по свойствам алюминиевой плазмы могут быть полезными для более глубокого понимания поведения вещества в экстремальных состояниях, например, под воздействием ультракоротких лазерных импульсов.

По диссертации можно сделать следующие замечания.

Как известно, результаты расчетов в какой-то степени зависят от выбора псевдопотенциала. Поэтому было бы желательно более четко обосновать применимость использованных псевдопотенциалов в условиях, рассматриваемых в диссертации. Подходят ли эти псевдопотенциалы для расширения исследований на область более высоких плотностей, и если нет, то как они должны быть модифицированы.

Второе замечание относится к верификации методики. В диссертации приводится сравнение вычисленной оптической проводимости алюминия в твердом и жидком состоянии с экспериментальными данными. Было бы полезно также сравнить эти результаты с другими расчетами, особенно выполненными альтернативными методами. Например, согласие результатов для твердого алюминия со стандартным расчетом методами теории твердого тела могло бы стать дополнительным подтверждением справедливости используемого подхода.

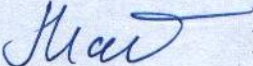
И, наконец, третье, скорее не замечание, а пожелание. Читателю диссертации было бы удобнее, если бы наряду с плотностями, при которых производится расчет, были указаны соответствующие им значения давления.

Приведенные замечания носят рекомендательный характер и не снижают общую положительную оценку диссертации Д.В. Князева. Изложение материала в диссертации ясное и логичное. Автор свободно владеет методами первопринципных расчетов, понимает их теоретические основы и хорошо разбирается в современной физике экстремальных состояний вещества.

Результаты диссертации своевременно опубликованы в виде 4 статей в рецензируемых изданиях из перечня ВАК и представлены лично автором на 13 международных и 12 российских 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 соответствует специальности 01.04.08 – физика плазмы.

Таким образом, диссертация Д.В. Князева представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным пунктом 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. Автор диссертации Князев Дмитрий Владимирович безусловно заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 – физика плазмы.

Официальный оппонент
к.ф.-м.н., старший научный сотрудник
Теоретического отдела ИФВД РАН
142190, г. Москва, г. Троицк,
Калужское шоссе, стр. 14
8-(495)-851-07-34, magnma@yandex.ru

 Магницкая М.В.

Ученый секретарь ИФВД РАН
к.ф.-м.н.
142190, г. Москва, г. Троицк,
Калужское шоссе, стр. 14
8-(495)-851-00-16, tval@hppi.troitsk.ru

  Валинская Т.В.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики
высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук (ИФВД РАН)
142190, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, стр. 14
8-(495)-851-05-82, hpp@hppi.troitsk.ru