

УТВЕРЖДАЮ

Зам. директора по научной работе
Федерального государственного бюджетного
учреждения науки Института общей физики
имени А.М. Прохорова Российской академии
наук (ИОФ РАН),

д.ф.-м.н., профессор Михалевич В.Г.



« 22 » октября 2015 г.

ведущей организации

на диссертационную работу Князева Дмитрия Владимировича
«РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ, ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И ОПТИЧЕСКИХ
СВОЙСТВ ПЛОТНОЙ ПЛАЗМЫ НА ОСНОВЕ МЕТОДА КВАНТОВОЙ
МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И ФОРМУЛЫ КУБО-ГРИНВУДА»,
представленную на соискание учёной степени
кандидата физико-математических наук по специальности
01.04.08 – Физика плазмы

Диссертация Князева Д.В. посвящена расчету электропроводности, теплопроводности и оптических свойств плотной плазмы на основе метода квантовой молекулярной динамики и формулы Кубо-Гринвуда. Безусловно, такая тема диссертации является актуальной. Это связано с тем, что теоретическое описание физических свойств неидеальной плазмы имеет как фундаментальное, так и прикладное значение для решения целого ряда практических задач. Получение новых знаний о свойствах неидеальной плазмы способствует уточнению границ применимости имеющихся теорий и дает основу для их дальнейшего развития. Об актуальности диссертации говорит и то, что для решения поставленных задач автор использовал самые современные методы расчета.

Диссертационная работа Князева Д.В. изложена на 240 страницах машинописного текста, содержит 39 рисунков и 7 таблиц. Диссертация состоит из предисловия, введения, обзора литературы, шести глав, заключения, двух приложений и списка литературы. Список литературы включает в себя 117 наименований.

В предисловии приводятся общие сведения о структуре диссертации, перечисляются разделы, представляющие наибольший интерес для стороннего читателя.

Во введении обоснована актуальность темы работы, сформулированы ее цели, задачи, научная новизна и практическая значимость, а также положения, выносимые на защиту.

В обзоре литературы рассказывается о практических приложениях, приводящих к расчету электропроводности, теплопроводности и оптических свойств. Обсуждаются различные подходы к расчету свойств неидеальной плазмы и место метода, используемого в диссертации, среди других подходов. Также производится обзор уже имеющихся работ по методике, используемой в диссертации.

В первой главе изложен метод расчета, основанный на квантовой молекулярной динамике, методе функционала плотности и формуле Кубо-Гринвуда. Приведено как общее описание метода, так и более подробное объяснение его отдельных этапов. Рассказывается об ограничениях используемого подхода; часть этих ограничений накладывается приближениями используемого метода, другая часть – лимитированными вычислительными ресурсами.

Вторая глава – это обзор теорий и моделей, с которыми сравниваются результаты, полученные в диссертации. Прежде всего, излагается теория Друде, которой в диссертации уделяется большое внимание. Также рассматриваются широкодиапазонные модели теплопроводности, которые могут использоваться при моделировании фемтосекундного лазерного нагрева. Показывается, что в низкотемпературном случае все рассмотренные широкодиапазонные модели сводятся к теории Друде с различными выражениями для времени релаксации.

В третьей главе приведены технические параметры, используемые при выполнении численных расчетов. Обсуждается, какие технические параметры нужно использовать для получения достоверных результатов с приемлемой точностью. Для одной из точек на фазовой диаграмме производится оценка погрешности расчета, связанной с зависимостью от технических параметров. Показывается, что основной вклад в погрешность вносит зависимость результатов от числа атомов и числа k -точек.

В четвёртой главе автор сопоставляет свои результаты с тем, что получено другими исследователями; производится сравнение с расчетами других авторов по аналогичной методике, справочными и экспериментальными данными. Результаты автора диссертации в полной мере согласуются с расчетными и экспериментальными данными, полученными другими исследователями.

Пятая глава содержит результаты расчета оптических характеристик, статической электропроводности и теплопроводности алюминиевой плазмы в двухтемпературном случае. На основе результатов расчета построена эмпирическая аппроксимация, переносных и оптических свойств. Показывается, что результаты расчета могут быть описаны теорией Друде с некоторым эмпирическим выражением для времени релаксации. Производится сравнение результатов с данными других моделей переносных свойств. Обсуждается, что нового дает используемый метод по сравнению с другими моделями.

В шестой главе приведены результаты расчета термодинамических, переносных и оптических свойств плотной плазмы эффективного состава CH_2 . Такая плазма возникает при использовании полиэтиленовых пленок для повышения контраста фемтосекундных лазерных импульсов. В главе произведен обзор литературы по расчету свойств углеводородных пластиков с помощью аналогичной методики. Полученные результаты по статической электропроводности объясняются с помощью анализа плотности электронных состояний.

В заключении кратко излагаются основные результаты, полученные в работе. Основные полученные результаты касаются: исследования зависимости результатов от технических параметров и оценки погрешности расчета; сравнения со справочными, экспериментальными данными и расчетами других авторов; практических расчетов по алюминиевой плазме и плазме эффективного состава CH_2 . В заключении приведены ссылки на 4 рецензируемые статьи, в которых достаточно полно изложены результаты диссертации.

В приложении А приведена таблица с рассчитанными переносными свойствами алюминиевой плазмы; **в приложении Б** – таблица с рассчитанными термодинамическими и переносными свойствами плазмы эффективного состава CH_2 .

Замечание, или скорее пожелание автору диссертации заключается в следующем. Было бы интересно использовать полученные результаты для моделирования экспериментов по определению транспортных свойств неидеальной плазмы, выполненных в Институте проблем химической физики РАН (например, работа V.B. Mintsev, N.S. Shilkin, Yu.B. Zaporoghets, S.V. Dudin, V.K. Gryaznov, V.E. Fortov. Measurements of Hall, DC and HF conductivity of nonideal plasma // Contrib. Plasma Phys. 2003. V. 43. P. 326-329).

Сделанное замечание ни в коей мере не снижает высокую оценку диссертации Князева Д.В. в целом.

Диссертационная работа Князева Д.В. является актуальным и своевременным исследованием. В настоящее время проводится большое число экспериментов, связанных

с физикой экстремальных состояний вещества: эксперименты с фемтосекундным лазерным излучением, электровзрыв металлов, эксперименты по воздействию на вещество пучков тяжелых ионов. Для моделирования таких экспериментов нужны сведения о переносных и оптических свойствах вещества в состоянии плотной плазмы. Расчеты этих свойств и производятся в диссертации Князева Д.В. Полученные результаты могут служить для уточнения уже существующих теорий неидеальной плазмы и разработки новых. Об актуальности говорит и то, что в работе используется современная методика, основанная на квантовой молекулярной динамике, методе функционала плотности и формуле Кубо-Гринвуда. Вычисления проводились с использованием современных мощных суперкомпьютеров.

К числу наиболее существенных результатов, определяющих научную новизну и личный вклад автора, можно отнести следующие:

1. В работе впервые систематически исследована зависимость результатов от используемых технических параметров расчета; произведена оценка погрешности расчета, связанной с зависимостью от технических параметров.

2. Впервые систематически исследованы переносные и оптические свойства плотной алюминиевой плазмы при постоянной плотности в двухтемпературном случае. Результаты расчета приближены эмпирической аналитической аппроксимацией. Предложено выражение для времени релаксации, при использовании которого результаты расчета могут быть описаны теорией Друде.

3. Впервые были рассчитаны термодинамические, переносные и оптические свойства плотной плазмы эффективного состава CH_2 при постоянной плотности.

Исследования зависимости результатов от технических параметров расчета могут оказаться весьма полезными при проведении аналогичных расчетов в будущем. Полученные результаты могут способствовать уточнению границ применимости существующих теорий неидеальной плазмы и стимулировать их дальнейшее развитие. Этим определяется теоретическая значимость работы.

Полученная информация по свойствам плотной плазмы может найти применение при моделировании различных экспериментов в области физики экстремальных состояний вещества. Данные по свойствам алюминиевой плазмы необходимы при моделировании фемтосекундных лазерных экспериментов. Информация о свойствах плазмы эффективного состава CH_2 может быть применена при моделировании экспериментов по улучшению контраста мощных лазерных импульсов и ударноволновых экспериментов. Этим определяется практическая значимость работы.

В диссертации приведены таблицы с рассчитанными термодинамическими,

переносными и оптическими свойствами плотной плазмы, что облегчает последующее использование этих сведений. Рассчитанные свойства могут использоваться для моделирования экспериментов в области физики экстремальных состояний вещества в следующих организациях: Институте прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук (ИПМ РАН, г. Москва), Российском федеральном ядерном центре – Всероссийском научно-исследовательском институте экспериментальной физики (РФЯЦ-ВНИИЭФ, г. Саров), Российском федеральном ядерном центре – Всероссийском научно-исследовательском институте технической физики (РФЯЦ-ВНИИТФ, г. Снежинск), Институте общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук (ИОФ РАН, г. Москва), Физическом институте им. П.Н. Лебедева Российской академии наук (ФИАН, г. Москва), Московском физико-техническом институте (государственном университете), Национальном исследовательском центре «Курчатовский институт» (г. Москва), Троицком институте инновационных и термоядерных исследований (ТРИНИТИ, г. Москва, г. Троицк).

Диссертационная работа Князева Д.В. выполнена с большим мастерством. Её уровень выше того, что требуется для присвоения ученой степени кандидата наук. По четкости поставленной задачи и используемых методов её решения явно видно, что диссертант является выпускником школы академика В.Е. Фортова.

Оформление диссертации, описание используемого метода расчета, изложение полученных результатов и обсуждение их места среди достижений других исследователей являются образцовыми для представления квалификационной работы на соискание ученой степени кандидата наук.

Диссертационную работу Князева Д.В. по своей научной значимости, объему и завершенности следует квалифицировать как решение серьезной научной проблемы, имеющей важное научное и прикладное значение для изучения свойств вещества в экстремальных условиях. Материал, изложенный в диссертации Князева Д.В., можно рекомендовать в качестве справочного по теоретическому описанию переносных и оптических свойств плотной плазмы.

Достоверность результатов, полученных в диссертации, подтверждается их признанием научным сообществом. Материал диссертации Князева Д.В. был в полной мере отражен в отечественных и зарубежных публикациях, представлен на 25 российских и международных конференциях и вызвал значительный научный интерес.

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

Диссертация Князева Д.В. и отзыв на нее обсуждены и одобрены на

заседании научного семинара отдела взаимодействия когерентного излучения с веществом Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук (руководитель семинара член-корр. РАН, д.ф.-м.н., профессор Пашинин П.П.), протокол № 8 от 14 октября 2015 г.

Диссертация Князева Д.В. представляет собой завершённую 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. Князев Дмитрий Владимирович, несомненно, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 – Физика плазмы.

Отзыв составлен заведующим отделом взаимодействия когерентного излучения с веществом Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, доктором физико-математических наук Красюком Игорем Корнелиевичем.

д.ф.-м.н.,

зав. отделом взаимодействия когерентного излучения

с веществом ИОФ РАН

119991, г. Москва, ул. Вавилова, д. 38

(499)-503-81-30, krasyuk99@rambler.ru

Красюк И.К.

Ученый секретарь ИОФ РАН,

д.ф.-м.н.

119991, г. Москва, ул. Вавилова, д. 38

(499)-503-83-27, nauka@gpi.ru

Андреев С.Н.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук (ИОФ РАН)

119991, г. Москва, ул. Вавилова, д. 38

(499)-135-41-48, postmaster@kapella.gpi.ru