

ОТЗЫВ
официального оппонента
на диссертационную работу Левашова Павла Ремировича

«Квантово–статистический расчет теплофизических свойств веществ для интерпретации ударно-волновых экспериментов и численного моделирования воздействия лазерных импульсов на вещество» на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника

В диссертации Левашова П. Р. рассмотрена актуальная, важная и трудная для реализации в моделировании проблема использования квантово-статистических подходов для расчетов теплофизических свойств конденсированных веществ. Известно, что теоретическое рассмотрение систем частиц с сильным взаимодействием и вырождением наталкивается на непреодолимые трудности, а численное моделирование требует привлечения огромных вычислительных ресурсов. В диссертации рассмотрены, созданы заново разного рода эффективные подходы для расчетов термодинамических, транспортных и оптических свойств различных веществ. Компетенция автора исследования охватывает и активно использует реально нужный в плане моделирования диапазон моделей, начиная от относительно простой модели Томаса-Ферми до сложного многочастичного квантового метода Монте-Карло с интегралами по траекториям. В работе получены новые модели уравнений состояния для ряда металлов, проведены расчеты кривых плавления, выполнена интерпретация ударно-волновых экспериментов, рассчитаны транспортные и оптические свойства. Результаты расчетов теплофизических свойств и разработанные уравнения состояния использовались для моделирования воздействия мощного фемтосекундного лазерного импульса на конденсированные мишени. Тем самым, автором предлагаемого исследования разработаны новые модели теоретического описания теплофизических и оптических свойств веществ в условиях экстремальных их состояний, полученные результаты реализованы в виде комплекса численных кодов для определения состояния вещества в неординарных физических ситуациях.

Актуальность работы. Модели теплофизических свойств веществ играют большую роль при решении широкого класса задач механики сплошных сред. К таким задачам относятся, в частности, проблемы воздействия интенсивного электромагнитного излучения, воздействия пучков заряженных частиц (электронов, позитронов, ионов), последствия на состояние вещества мощных импульсов тока, сильноточных разрядов на вещество. Для численного решения сложных систем уравнений в частных производных необходимы уравнение состояния, коэффициенты электропроводности и теплопроводности, комплексная диэлектрическая проницаемость, спектральные коэффициенты излучения и поглощения и ряд других определяющих соотношений в широком диапазоне температур и плотностей. Однако экспериментальные данные для построения подобных зависимостей существуют лишь для ограниченного круга веществ или вовсе отсутствуют, поэтому большую роль для получения данных для построения моделей теплофизических свойств играют так называемые первопринципные подходы. Под этим термином понимаются чисто теоретические модели состояния вещества. Они, конечно, являются крайне сложными, они вынуждены учитывать всю необходимую для этого физику, включающую с неизбежностью квантовое и квантово-релятивистское, и

квантово-статистическое описание вещества. Именно такие подходы и полученные с их помощью результаты теоретического анализа и численных расчетов рассмотрены в диссертации.

Научная новизна. В диссертации получен ряд новых результатов, из которых можно выделить следующие. Во-первых, в работе убедительно продемонстрирована возможность теоретического описания всей совокупности ударно-волновых экспериментов для алюминия без привлечения эмпирических зависимостей. В общем случае, полученные теоретические закономерности позволяют с высокой точностью предсказывать ударные адиабаты веществ, для которых отсутствуют экспериментальные данные. Во-вторых, получены новые данные по электронным транспортным свойствам плотной плазмы пластика эффективного состава CH_2 , а также алюминия в двухтемпературном (различная температура ионов и электронов) приближении. В частности, выявлена сложная зависимость статической электропроводности пластика от температуры, а также влияние электронной температуры на коэффициенты электропроводности и теплопроводности плотной плазмы алюминия. Эти результаты указывают на необходимость корректировки существующих моделей транспортных и оптических свойств для более точного описания процесса взаимодействия лазерного излучения с веществом.

Теоретическая и практическая значимость работы. Диссертация вносит существенный вклад в теоретические аспекты расчетов теплофизических свойств веществ. Были разработаны новые аналитические подходы для расчетов вторых производных термодинамического потенциала конечно-температурной модели Томаса-Ферми для одного атома и для смеси веществ, выполнены расчеты кривых плавления металлов, в том числе для случая нагретых электронов, дана теоретическая интерпретация всех типов ударно-волновых экспериментов для алюминия. Диссертация, несомненно, обладает и практической значимостью: разработаны общедоступные компьютерные программы для расчетов термодинамических свойств электронной подсистемы по модели Томаса-Ферми, а также для расчетов электронных транспортных свойств по формуле Кубо-Гринвуда; созданы широкодиапазонные уравнения состояния для пяти металлов, рассчитаны теплофизические свойства ряда веществ в области параметров, в которой отсутствуют экспериментальные данные.

Два результата, полученные в диссертации, хотелось бы выделить. Первый касается способа расчета теплового вклада в термодинамические функции конечно-температурной модели Томаса-Ферми, включая вторые производные термодинамического потенциала, с заданной точностью. Это позволяет рассчитывать таблицы термодинамических функций электронов и использовать их для построения широкодиапазонных уравнений состояния. При таком подходе, в отличие от модели идеального ферми-газа, учитывается взаимодействие между электронами, а также становится возможным оценить среднюю степень ионизации плазмы. Эти улучшения очень важны при моделировании воздействия лазерных импульсов на вещество, что продемонстрировано в восьмой главе диссертации. Второй результат посвящен расчетам транспортных и оптических свойств плотной плазмы. Известно, что традиционный кинетический подход для расчетов транспортных свойств применим лишь для вещества достаточно низкой плотности. Формула Кубо-Гринвуда позволяет обойти это ограничение и учесть вырождение электронной подсистемы, а преобразование Крамерса-Кронига дает

возможность рассчитать и оптические свойства плотной плазмы. В диссертации получены интересные результаты для динамической электропроводности и теплопроводности плотной плазмы алюминия и пластика эффективного состава CH_2 . Это демонстрирует большие перспективы предложенного подхода и позволяет получить ценную информацию о свойствах плотной плазмы. Следует отметить, что в исследованном диапазоне параметров в настоящий момент надежные данные по транспортным и оптическим свойствам отсутствуют.

Объем и структура работы. Диссертационная работа состоит из 8 глав, в конце каждой главы приведены выводы и список литературных источников, в которых опубликованы материалы главы. Содержание работы выглядит следующим образом.

В первой главе приведен краткий обзор существующих на сегодняшний день квантово-статистических подходов, которые привлекаются для расчетов теплофизических свойств веществ. Рассмотрены модели идеального ферми-газа, Томаса-Ферми и Хартри-Фока в сферической ячейке при ненулевой температуре, метод квантовой молекулярной динамики, безорбитальные подходы и метод Монте-Карло с интегралами по траекториям.

Вторая глава посвящена изложению конечно-температурной модели Томаса-Ферми как для одного атома, так и для смеси элементов, методам расчета производных термодинамического потенциала и их тепловых частей. Приведены примеры расчетов некоторых термодинамических функций в широком диапазоне параметров. Существенным вкладом в физическое моделирование является программа «TFmi» для вычисления термодинамических функций электронов для смеси элементов. Программа снабжена графическим интерфейсом.

В третьей главе приводится описание полуэмпирических моделей уравнений состояния с тепловым вкладом электронов по конечно-температурной модели Томаса-Ферми, а также рассматриваются разработанные уравнения состояния для пяти металлов. Демонстрируется подробное сравнение рассчитанных по уравнениям состояния ударных адиабат, изоэнтроп разгрузки и скорости звука за фронтом ударной волны с экспериментальными данными.

В четвертой главе рассматривается метод Монте-Карло с интегралами по траекториям для моделирования плотной водородно-гелиевой плазмы с двумя различными массовыми концентрациями гелия. Давление и энергия, полученные в моделировании, сравниваются с химической моделью плазмы в условиях ее применимости. Обсуждаются также обнаруженные в расчетах области плохой сходимости к равновесному состоянию при относительно низких температурах и связь этих областей с гипотетическим плазменным фазовым переходом.

Пятая глава посвящена методу функционала плотности и квантовой молекулярной динамики, расчетам холодных кривых, фононных спектров и кривых плавления металлов. Изучен вопрос об области применимости псевдопотенциалов в моделировании. Впервые проведены расчеты кривых плавления металлов для кристаллов с нагретыми электронами.

В шестой главе обсуждается моделирование ударно-волновых экспериментов методом квантовой молекулярной динамики. Рассмотрены три вещества: алюминий, дейтерий и дейтерид лития. Изложены детали расчетов различных кривых по результатам моделирования: ударных адиабат сплошных и пористых образцов, изоэнтроп расширения и сжатия, скорости звука за фронтом ударной волны. Выполнена интерпретация всех типов ударно-волновых экспериментов для алюминия, проведено обсуждение

расхождений между расчетом и экспериментом для кривых адиабатического расширения алюминия в воздух. Изучен вопрос о влиянии внутренних электронов лития на ударную адиабату дейтерида лития.

Седьмая глава посвящена расчетам транспортных и оптических свойств плотной плазмы на основе метода квантовой молекулярной динамики и формулы Кубо-Гринвуда. Рассмотрены основы метода, детали моделирования и зависимость результатов моделирования от параметров. Для статической электропроводности алюминия приведено сравнение с экспериментальными данными в области жидкости. Получены новые данные для динамической электропроводности плотной плазмы алюминия и пластика эффективного состава CH_2 , в том числе для случая различных температур электронов и ионов. Приведены также расчеты статической электропроводности и теплопроводности в зависимости от температуры.

В восьмой главе диссертации полученные в предыдущих главах теплофизические свойства и разработанные на их основе модели были использованы для моделирования воздействия мощного лазерного импульса на металлическую мишень, перед которой была установлена тонкая пленка из Al или CH_2 . Роль пленки состояла в уменьшении влияния предимпульса лазерного импульса на мишень. С помощью одномерного двухтемпературного одножидкостного численного моделирования с учетом переноса излучения было обнаружено, что пленка создает значительный радиационный поток на мишень, что может приводить к существенной модификации мишени еще до прихода основного импульса. Было установлено, что радиационный поток от пленки из CH_2 на мишень примерно в 10 раз менее мощный, чем от пленки из алюминия.

Несмотря на большой объем материала и полученные важные результаты, диссертация не лишена недостатков, которые можно сформулировать в виде следующих замечаний.

1. По главе 2. При описании расчетов по модели Томаса-Ферми для смеси элементов упоминается возможность расчета среднего заряда ионов, однако модель и формулы для расчета среднего заряда не приводятся.
2. По главе 3. На рис. 3.11 показаны ударные адиабаты образцов вольфрама различной начальной плотности. В тексте упоминается, что рассчитанные по уравнению состояния ударные адиабаты отклоняются от экспериментальных данных в сторону больших плотностей, однако объяснения этому эффекту не приводится.
3. По главе 5. При обсуждении рисунков 5.9-5.11 упоминаются факторы, которые могут повлиять на результаты расчетов кривых плавления металлов, в частности, эффекты ангармонизма, однако величина этих эффектов для рассматриваемых металлов не оценивалась. Следует отметить, что для металлов с сильными эффектами ангармонизма рассмотренный в диссертации подход, скорее всего, работать не будет.
4. На рис. 7.2 показано сравнение рассчитанной в диссертации статической электропроводности в зависимости от температуры для жидкого алюминия со справочными данными при атмосферном давлении. Из графика видно, что экспериментальные данные не описываются в пределах оценки погрешности. Обсуждение этого факта в работе отсутствует.

5. В главе 8 обсуждается моделирование воздействия мощного ультракороткого лазерного импульса на конденсированные мишени. Для моделирования используется двухтемпературное одножидкостное приближение. Однако для рассмотренных в работе интенсивностей лазерного импульса (порядка 10^{19} Вт/см²) могут наблюдаться эффекты разделения зарядов, и одножидкостное приближение становится неприменимым. Оценки этого эффекта и его возможное влияние на результаты в работе отсутствуют.

Моё мнение состоит в том, что обозначенные замечания ни в коей мере не снижают общей положительной оценки диссертационной работы Левашова П.Р. В диссертационной работе соискателя, Павла Ремировича Левашова получен значительный ряд результатов, как общефизического, в частности, теплофизического, так и существенно полезного прикладного свойства. Автор диссертационной работы заслуживает самой высокой оценки за развитие методов квантово-статистического моделирования свойств веществ, включая оригинальный метод подсчёта интегралов по траекториям. Этот значительный, развитый автором, математический аппарат позволил ему выполнить ряд уникальных, оригинальных исследований поведения веществ в экстремальных состояниях.

Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации. Результаты диссертационной работы опубликованы в двадцати пяти рекомендованных ВАК статьях в ведущих российских и зарубежных журналах, а также многократно докладывались на российских и международных конференциях. Постановка всех задач, анализ результатов и выводы были сделаны непосредственно автором работы.

Итак, можно с уверенностью констатировать, что докторская диссертация Левашова П.Р. представляет собой законченную высокосодержательную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013 г., а ее автор, Левашов Павел Ремирович, заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника.

Главный научный сотрудник

ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, д.ф.-м.н.

125047, г. Москва, Миусская пл., д.4, тел.: +7(499)220-72-23, e-mail: zmitrenko@imamod.ru

Змитренко Николай Васильевич

Подпись Змитренко Николая Васильевича заверяю:

Ученый секретарь ИПМ РАН, к.ф.-м.н.

Давыдов Александр Александрович

Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, 125047, г. Москва, Миусская пл., д.4, тел.: +7(499)978-13-14, сайт: <https://www.keldysh.ru/>, e-mail: office@keldysh.ru