



«УТВЕРЖДАЮ»

Директор ИОФ РАН,
д.ф.-м.н., чл.-корр. РАН

С.В. Гарнов

«28» декабря 2022 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации

на диссертационную работу Морозова Игоря Владимировича

«Столкновительные и релаксационные процессы в неидеальной электрон-ионной плазме»,
представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по
специальности 1.3.9 – физика плазмы

Диссертация Морозова И.В. посвящена теоретическому исследованию равновесной и неравновесной неидеальной электрон-ионной плазмы с применением компьютерного моделирования методами классической молекулярной динамики и молекулярной динамики с волновыми пакетами. В работе развиты методы расчета и получены результаты для статической и динамической проводимости равновесной неидеальной плазмы, скорости релаксационных процессов в неизотермической и пространственно-неоднородной плазме различной геометрии, характерных размеров двойного электронного слоя на границе плазмы, эмиссии электронов и колебаний в кластерной наноплазме, уравнения состояния, ударной адиабаты и изоэнтропы сжатия для плазмы водорода, дейтерия и гелия. Большое внимание уделяется обсуждению методических вопросов применения метода молекулярной динамики (МД), а также повышения точности учета квантово-механических эффектов взаимодействия частиц и расширения области применимости метода молекулярной динамики с волновыми пакетами.

Объем и структура диссертации.

Диссертация состоит из введения, 5-ти глав, включая обзор литературы, заключения и списка литературы. Полный текст диссертации изложен на 284-х страницах, список литературы содержит 557 наименований.

Во введении обоснована актуальность диссертационной работы, сформулированы цели и аргументирована научная новизна исследований, показана практическая значимость полученных результатов, представлены выносимые на защиту научные положения.

В первой главе приведен обзор литературы по методам и результатам экспериментальных исследований неидеальной электрон-ионной плазмы, включая наблюдения за астрофизическими объектами, статические эксперименты, генерацию электрических разрядов, электровзрыв проводников, ударно-волновые эксперименты, воздействие лазерных импульсов и потоков частиц на вещество, исследования ультрахолодной плазмы. Обсуждаются также существующие теоретические модели, основанные на квантово-статистическом подходе, использовании псевдопотенциалов для описания взаимодействия частиц, физической и химической моделях плазмы, формализме электронной плотности. Описаны основные методы атомистического моделирования неидеальной плазмы или разогретого плотного вещества: классическая молекулярная

динамика и Монте-Карло, квантовая молекулярная динамика, Монте-Карло в терминах интегралов по траекториям, молекулярная динамика с волновыми пакетами. Сделаны выводы о применимости указанных подходов для решения актуальных задач физики неидеальной плазмы.

Во второй главе обсуждаются способы расчета статической и динамической проводимости, а также эффективной частоты столкновений в неидеальной электрон-ионной плазме с помощью метода классической молекулярной динамики. Представлена оригинальная методика добавления в МД модель среднего поля, которая позволила провести теоретический анализ данной проблемы. Показано, что результаты, полученные в рамках этой модели, соответствуют продольной или внутренней проводимости, в то время как стандартный метод МД моделирования с периодическими граничными условиями позволяет получить поперечную или внешнюю проводимость. Предложенные аналитические выражения, связывающие как продольную, так и поперечную проводимость с эффективной частотой столкновений позволили подтвердить, что результаты обоих расчетов дают одинаковую зависимость эффективной частоты столкновений от частоты возмущающего поля, что означает соответствие их длинноволновому пределу.

С использованием указанных результатов рассчитаны значения статической и динамической проводимости неидеальной плазмы со значением параметра неидеальности 0.1 – 5, определена высокочастотная асимптотика эффективной частоты столкновений для модельного псевдопотенциала Кельбга, а также зависимость результатов от температуры, являющейся параметром данного потенциала. Дополнительно проведен анализ спектра автокоррелятора тока для системы с отражающими граничными условиями. Показано, что эти результаты могут использоваться для расчета продольной проводимости при использовании внутренней области расчетной ячейки.

В третьей главе описано моделирование релаксационных процессов в пространственно-неоднородной неидеальной плазме. Рассматриваются процессы формирования двойного электрического слоя на границе плазма-вакуум, в том числе вблизи поверхности металла в условиях униполярной дуги. Исследуется релаксация неидеальной плазмы, образованной одиночным многозарядным ионом в конденсированной мишени.

Во всех случаях показана структура установившегося двойного электрического слоя в зависимости от параметров плазмы, приведены теоретические оценки и сопоставление с экспериментом. В целом полученные результаты показывают общий для всех случаев характер релаксации и установления двойного электронного слоя на границе неидеальной плазмы с различной геометрией. Рассмотренная здесь методика моделирования релаксационных процессов и систем с открытой границей используется далее при моделировании кластерной наноплазмы.

В четвертой главе описаны исследования динамики электронов в кластерной наноплазме. Предложена схема моделирования, позволяющая отдельно рассмотреть процессы в электронной подсистеме ионизованного кластера в различные моменты разлета ионов. С ее помощью проведено исследование процесса релаксации электронов в кластерной наноплазме, получены установившиеся распределения электронов по энергиям, радиальный профиль концентрации электронов, средний заряд кластера и температура

электронов в зависимости от плотности ионов, начальной температуры и числа ионов в кластере. Показано, что заряд кластера в рассмотренной области параметров можно считать линейно зависящим от произведения конечной температуры электронов на радиус кластера. Определен коэффициент этой зависимости.

Предложен метод исследования пространственной структуры электронных колебаний в кластере, основанный на расчете пространственно-разрешенной автокорреляционной функции тока. Результатом этих исследований стала теоретическая модель коллективных колебаний электронов (поверхностных плазмонов), хорошо описывающая полученную в МД моделирования зависимость частоты этих колебаний от размера кластера с учетом неоднородного распределения электронов. Также определены декременты затухания для колебаний Ми и ленгмюровских плазменных колебаний. Приведены результаты расчета установившегося заряда кластера, частот и декрементов затухания поверхностных и объемных плазмонов, в зависимости от температуры электронов, плотности и размера кластера. Приводится описание разработанной теоретической модели.

В пятой главе рассмотрены возможности развития метода молекулярной динамики с волновыми пакетами. На различных примерах обсуждаются преимущества и недостатки данного метода. В качестве недостатков указаны: неограниченное расширение волновых пакетов со временем для электронов вне области сильного взаимодействия; невысокая точность представления связанных состояний электронов и ионов для низколежащих квантовых уровней по сравнению с другими квантово-механическими подходами; сложность или недостаточная точность существующих численных алгоритмов для учета многочастичных квантовых эффектов. Решение каждого из этих вопросов обсуждается в соответствующем разделе данной главы.

Для верификации разработанного метода МДВП-ФП приведены расчеты уравнения состояния водородной плазмы, ударной адиабаты дейтерия, а также изоэнтропы ударно-сжатых дейтерия и гелия. В результате делается заключение об эффективности и области применения данного метода. Показано, что метод МДВП-ФП обеспечивает точность расчета термодинамических свойств, сравнимую с методами квантового Монте-Карло и квантовой молекулярной динамикой, сохраняя при этом способность описывать неравновесную динамику электронов.

В заключении подводятся итог работы, обсуждаются полученные результаты, а также перспективы дальнейших исследований.

Актуальность темы диссертации.

Неидеальная электрон-ионная плазма интенсивно исследуется во всем мире как экспериментально, так и теоретически. Она характеризуется значительной энергией кулоновского взаимодействия частиц по сравнению с их средней кинетической энергией, существенным влиянием близких столкновений частиц на транспортные и релаксационные свойства плазмы, ограниченной применимостью парного приближения и теории экранирования Дебая. Такое состояние вещества встречается в астрофизических объектах, а также в лабораторных условиях, например, при воздействии на твердотельные мишени коротких лазерных импульсов или потоков заряженных частиц, в прикатодной области

электрических разрядов в вакууме и в плотном газе, на фронте мощных ударных волн в газовых и конденсированных средах, при электровзрыве проводников.

По сравнению с пылевой плазмой, в которой эффекты неидеальности также имеют место, электрон-ионная плазма является более простой моделью для теоретического исследования, так как содержит лишь электроны и однократно или многократно заряженные ионы (влиянием нейтральных частиц во многих случаях можно пренебречь). Тем не менее, процессы, происходящие в пылевой и электрон-ионной неидеальной плазме, имеют схожие черты. Таким образом, исследование электрон-ионной неидеальной плазмы имеет косвенное влияние и на решение задач пылевой (комплексной) плазмы.

При высоких плотностях или относительно низких температурах при изучении неидеальной плазмы следует учитывать эффекты ионизации и рекомбинации, а также частичное вырождение электронного газа, что существенно усложняет теоретический анализ, и делает почти невозможным вывод аналитических соотношений, доступных в случае идеальной плазмы (классической или вырожденной). Это обуславливает необходимость применения численных методов, среди которых особое место занимают атомистические подходы – методы динамики многих частиц (или молекулярной динамики), а также методы Монте-Карло. Преимущество этих подходов заключается в возможности построения моделей «из первых принципов». Развитие и совершенствование данных методов является актуальной задачей.

Научная новизна. В диссертационной работе предложен ряд новых методов для исследования неидеальной электрон-ионной плазмы, а также получены оригинальные результаты. Среди них стоит отметить следующие:

- разработана методика расчета продольной и поперечной проводимости неидеальной плазмы с помощью классической молекулярной динамики при использовании специального типа граничных условий;

- систематически исследовано влияние периодических и отражающих граничных условий на расчет уравнения состояний неидеальной плазмы и эффективной частоты столкновений;

- получены новые данные по статической и динамической проводимости равновесной плазмы при различных температурах и плотностях, показана область применимости различных вариантов МД моделирования;

- исследованы релаксационные процессы в неравновесной плазме вблизи поверхности металла в условиях формирования униполярной вакуумной дуги, в треке одиночного многозарядного иона, в кластерной наноплазме;

- предложена оригинальная методика исследования колебаний электронов в кластерной наноплазме, получены новые данные о сдвиге частоты поверхностных плазмонов в красную область спектра для кластеров малого размера, для которых предложена оригинальная теоретическая модель;

- предложено несколько модификаций метода молекулярной динамики с волновыми пакетами, позволяющих решить проблему неограниченного расплывания волнового пакета для свободного электрона, повышения точности описания связанных состояний электронов и ионов, учета обменно-корреляционных эффектов;

– получены новые результаты для уравнения состояния водородной плазмы, ударной адиабаты дейтерия, изоэнтропы дейтерия и гелия, показавший применимость предложенного нового метода МДВП-ФП для моделирования плазмы с концентрацией электронов до 10^{25} см^{-3} .

Практическая значимость работы. Результаты, изложенные в диссертации, могут быть использованы для теоретических исследований в области физики неидеальной плазмы и плотного разогретого вещества, а также для интерпретации экспериментальных данных, имеющих важное практическое значение. Например, плазма с эффектами неидеальности, полученная в результате воздействия коротких лазерных импульсов на конденсированные мишени, может использоваться как источник рентгеновских и гамма импульсов, терагерцового излучения, потоков электронов, ионов и нейтронов с высокими энергиями. Ее исследование необходимо для создания новых методов рентгеновской диагностики вещества с субпикосекундным временным разрешением, инициирования ядерных реакций, задач ядерной фотоники и методов медицинской диагностики. Модификация поверхности фемтосекундными лазерными импульсами является эффективным инструментом создания нанообъектов и поверхностных наноструктур, при этом роль неидеальной плазмы на начальном этапе взаимодействия лазера с поверхностью, может быть достаточно важна. Неидеальная плазма в прикатодной области существенным образом влияет на характер формирования разрядов и повреждения поверхностей, а исследования плазмы, образующейся в вакуумных униполярных дугах, необходимы для защиты микроволновых устройств ввода энергии в ускорительной технике. Неидеальная плазма рассматривается также в задачах метеоритной защиты, воздействия на вещество космического излучения или ускоренных пучков частиц, в частности, при моделировании аварийных ситуаций на крупных ускорителях.

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 27-ми статьях в рецензируемых научных журналах, входящих в перечень ВАК и индексируемых системами Web of Science и Scopus.

Апробация работы. Материалы диссертации представлены автором лично на 34-х всероссийских и международных научных конференциях.

Замечания. Недостатки работы сводятся к следующему:

1. На рисунке 1.1 рядом с кривой ионизации указано «Ионизация H_2 », хотя, по-видимому, речь идет об ионизации атома водорода H .

2. В разделе 2.4.3 описывается метод расчета автокорреляционной функции тока для внутренней области расчетной ячейки при использовании отражающих граничных условий (жестких стенок). Однако, представленные результаты не дают ответа на вопрос о том, совпадают ли полученные таким способом результаты для статической и динамической проводимости с указанными ранее в разделах 2.1.2 и 2.3.4 результатами для периодических граничных условий.

3. В разделе 3.2, посвященном моделированию плазмы в условиях униполярной дуги, часть рисунков, таблиц и формул содержит концентрацию электронов, измеряемую в см^{-3} , а другая часть – в м^{-3} , что затрудняет сопоставление результатов.

4. В главе 5 среди преимуществ предложенной автором модификации метода молекулярной динамики с волновыми пакетами отмечается возможность исследования

неравновесных состояний и релаксационных процессов, при том, что этот метод более точно по сравнению с классической молекулярной динамикой описывает квантово-механические эффекты столкновений частиц и вырождения электронного газа. Однако, в работе отсутствуют примеры, иллюстрирующие применение данного метода к моделированию неравновесной плазмы в той области параметров, где указанные квантовые эффекты являются существенными.

Перечисленные замечания не снижают общей высокой оценки работы. Диссертация представляет собой законченную научную квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013г., ред.01.10.2018г., а ее автор Морозов И.В. заслуживает присуждения ему ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

Диссертационная работа была обсуждена и одобрена на заседании № 1598 семинара им. А.А. Рухадзе теоретического отдела Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра «Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук» 07 декабря 2022 г. Отзыв составлен главным научным сотрудником теоретического отдела ИОФ РАН, доктором физико-математических наук, профессором А.М. Игнатовым, обсужден и одобрен на заседании Ученого совета теоретического отдела Федерального государственного бюджетного учреждения науки Федерального исследовательского центра «Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук» № 10 от 07 декабря 2022г.

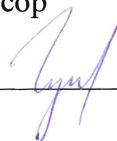
Главный научный сотрудник теоретического отдела ИОФ РАН
доктор физико-математических наук, профессор



А. М. Игнатов

E-mail: aign@fpl.gpi.ru

И.о. заведующего теоретическим отделом ИОФ РАН
Председатель Ученого совета теоретического отдела ИОФ РАН
доктор физико-математических наук, профессор



Н. Г. Гусейн-заде

E-mail: namik@fpl.gpi.ru

Ученый секретарь Ученого совета теоретического отдела ИОФ РАН
доктор физико-математических наук



В.В. Стрелков

E-mail: strelkov.v@gmail.com

«08» декабря 2022 г.

Адрес: 119991 ГСП-1, г. Москва, ул. Вавилова, д. 38
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Федеральный исследовательский центр
«Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук» (ИОФ РАН)
Тел.: +7 (499) 503 87-77, доб. 7-47