

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации 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».

Исследование электронной структуры материалов при высоких температурах **актуально** в связи с появлением новых мощных лазеров и экспериментов в области физики экстремальных состояний вещества. В общем случае расчет свойств системы электронов и ядер очень сложен, и в настоящее время не существует модели, которая бы позволила достоверно описать свойства веществ во всем диапазоне температур и плотностей, представляющих интерес у научного сообщества. Модель Томаса-Ферми, которую использует диссертант в качестве основы своего исследования, является довольно грубым решением задачи расчета электронной структуры, однако обладает замечательными свойствами автомодельности по атомному номеру и позволяет сделать хорошие качественные оценки термодинамических свойств плазмы.

В своей диссертации автор описывает, как от общей постановки перейти к упрощенной, томас-фермиевской, так что недостатки этой основной модели сразу становятся очевидны, а именно: отсутствие обменного взаимодействия, градиентных квантовых эффектов и дискретного спектра. Устраняются эти недостатки путем введения поправок, которые должны быть достаточно малы, чтобы результат расчета термодинамических свойств был корректным. Используя этот факт, автор определяет формальную область применимости подхода Томаса-Ферми с поправками: соответствующие диаграммы применимости приведены в автореферате для серебра. Помимо этого, автор обращает внимание на то, что формальную область применимости можно расширить, если учитывать только тепловой вклад электронов в термодинамические величины и показывает прямым расчетом, что это действительно так. Из полученных результатов видно, что область неприменимости модели соответствует плазме с параметром неидеальности больше единицы: такой вывод удобен для исследователей тем, что позволяет легко выяснить, подходит ли данная модель для интересующей области температур и плотностей, или нет.

Наиболее интересная часть работы изложена в Главе 2 и посвящена учету дискретного спектра состояний электронов в квазиклассическом приближении. Путем прямого расчета квазиклассических волновых функций и уровней энергии автор строит дискретную часть электронной плотности, которая имеет характерные оболочечные осцилляции, хорошо заметные в автореферате на Рис. 5(а). Диссертант предлагает заменить томас-фермиевские состояния до граничной энергии на дискретные, и, таким образом, получить оболочечную структуру атома. Для выбора граничной энергии, обеспечивающей термодинамическую согласованность после такой замены, автор также разработал специальный алгоритм.

В третьей главе приводится сравнение результатов расчета по модели автора с более точными подходами: в области разреженной плазмы с моделью Саха, а в области плотной плазмы с методом функционала плотности. В первом случае, учет оболочечных эффектов позволяет достичь почти идеального согласия, что свидетельствует о **достоверности** результатов, полученных автором диссертации. Во втором случае хорошее согласие

достигается только при высоких температурах, т. е. около 30 эВ для меди, но это можно считать хорошим результатом для подхода, в основе которого лежит модель Томаса-Ферми.

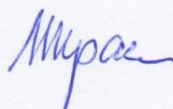
**Результаты** работы опубликованы в 4 статьях в журналах, входящих в перечень ВАК, что свидетельствует об их высоком научном уровне. Цели работы достигнуты в полном объеме, научные положения и выводы автора обоснованы. Разработанная модель имеет **теоретическую** ценность, так как показывает, что квазиклассический подход вносит лишь небольшую погрешность в расчет, а вычислительное время при этом оказывается на порядки меньше. Для **практического** использования модели автором разработан и опубликован в открытом доступе параллельный программный комплекс, с помощью которого можно легко повторить все расчеты, представленные в диссертации, а также проводить новые исследования.

Диссертация Дьячкова С. А. «**Квазиклассическая модель термодинамических свойств электронов с учетом состояний дискретного спектра и область ее применимости**» выполнена на высоком научном уровне и представляет собой завершённую научно-исследовательскую работу, соответствующая всем требованиям, предъявляемым Положением о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013 года к диссертациям, представляемым на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук. **Дьячков Сергей Александрович**, безусловно, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 — физика плазмы.

Отзыв составил заведующий отделом взаимодействия когерентного излучения с веществом ФГБУН Института общей физики им. А.М. Прохорова РАН, д.ф.-м.н. Красюк Игорь Корнелиевич.

119991, г. Москва, ул. Вавилова, д. 38, тел.: +7(499) 503-8130, e-mail: [krasyuk@kapella.gpi.ru](mailto:krasyuk@kapella.gpi.ru).

д.ф.-м.н.

 Красюк И.К.

19 декабря 2018 г.

Подпись Красюка Игоря Корнелиевича заверяю:

ученый секретарь ФГБУН ИОФ им. А.М. Прохорова РАН,

д.ф.-м.н.

Андреев С.Н.

119991, г. Москва, ул. Вавилова, д. 38, тел.: (499) 503-83-27, e-mail: [nauka@gpi.ru](mailto:nauka@gpi.ru)

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук (ФГБУН ИОФ им. А.М. Прохорова РАН), 119991, г. Москва, ул. Вавилова, д. 38, тел.: +7 (499) 135-2366, факс: +7(499) 135-0270, e-mail: [director@gpi.ru](mailto:director@gpi.ru)

