

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Дьячкова Сергея Александровича «Квазиклассическая модель термодинамических свойств электронов с учетом состояний дискретного спектра и область ее применимости», представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 – «Физика плазмы».

Диссертация Дьячкова С. А. посвящена разработке модели термодинамических свойств электронов для плазмы с плотностью ниже нормальной, где вклады состояний дискретного и непрерывного спектра в статистическую сумму сопоставимы. В модели используется приближение Томаса-Ферми для среднего атома, дискретный спектр рассчитывается в квазиклассическом приближении и учитывается в виде поправок к термодинамическим функциям. Область применимости такой модели определяется исходя из малости величины этих поправок.

В обзоре литературы приводится краткий исторический обзор основных способов расчета самосогласованного поля электронов и ядер: модели Томаса-Ферми, Хартри-Фока, Хартри-Фока-Слетера, теория функционала электронной плотности. Обсуждаются преимущества и недостатки этих подходов, их применимость для расчета состояния вещества в экстремальных условиях сильного нагрева, сжатия и разрежения. Приводятся сведения об актуальных исследованиях в этом направлении, в частности, результаты, полученные с помощью перспективной модели псевдоатомов.

В первой главе автором описывается общая постановка задачи нахождения статистической суммы и уравнения состояния системы электронов и ядер, далее последовательно вводятся упрощения: модель Томаса-Ферми, приближение среднего атома. Рассматривается вариант учета квантовых и обменных эффектов в виде поправки к электронной плотности. Приводятся основные формулы и схема расчета термодинамических величин. Эти величины и поправки к ним сопоставляются в широком диапазоне параметров, на основании чего делаются два важных вывода:

- 1) модель Томаса-Ферми неприменима для вырожденной неидеальной плазмы;
- 2) тепловая часть термодинамических функций электронов в модели Томаса-Ферми применима при более низких температурах.

Вторая глава посвящена определению дискретного спектра состояний электронов и анализу его влияния на термодинамические функции. Автор использует квазиклассическое приближение: уровни энергии определяются с помощью условия квантования Бора-Зоммерфельда, а для волновых функций используется квазиклассическое решение в сферически-симметричном потенциале. Полученные данные используются для нахождения электронной плотности дискретного спектра, пространственное распределение которой имеет характерные осцилляции – электронные оболочки, которые отсутствуют в приближении Томаса-Ферми. При высоких температурах учет всех дискретных состояний с ненулевыми числами заполнения

становится затруднителен, поэтому дискретный спектр ограничивается некоторой энергией, и выше нее считается непрерывным. Особое внимание уделяется вопросу выбора граничной энергии между дискретным и непрерывным спектром, для чего автор разработал специальную процедуру и исследовал ее сходимость. В результате, вычислив разность между электронной плотностью с дискретным и непрерывным суммированием состояний до граничной энергии, автор использует полученную оболочечную поправку к электронной плотности для уточнения значений термодинамических функций электронов с помощью соответствующих поправок.

В третьей главе исследуется формальная область применимости модели как по отношению к введенным во второй главе оболочечным поправкам, так и к сумме всех типов поправок, представленных в диссертации. Главный вывод, впрочем, оказывается схожим с тем, что был сделан в первой главе – модель неприменима для описания плазмы с параметром неидеальности больше единицы. Далее результаты расчета по модели автора сравниваются с более точными методами: в области разреженной плазмы с химической моделью Саха, а в области нормальных плотностей с методом функционала плотности. В первом случае достигается практически идеальное согласие, что свидетельствует о малой ошибке в определении потенциалов ионизации. Во втором случае погрешность значительно падает с ростом температуры, и при температурах выше 30 эВ уже вполне можно применять модель автора для расчета электронной структуры и уравнения состояния. Основное преимущество подхода автора состоит в том, что переходная область между плотной и разреженной плазмой может быть описана в рамках одной модели.

В заключении сформулированы основные выводы по результатам работы.

Таким образом, текст автореферата свидетельствует о том, что цели работы достигнуты, а научные положения обоснованы. Материал изложен последовательно и логично и сопровождается высококачественными иллюстрациями. Результаты работы были представлены на российских и международных конференциях, и опубликованы в 4 рецензируемых изданиях, входящих в перечень ВАК.

В работе содержатся новые важные идеи и результаты, которые достаточно полно отражены в публикациях автора. Достоверность полученных результатов продемонстрирована путем сравнения с более точными моделями в области их доказанной применимости для описания экспериментов. Модель, предлагаемая автором, заполняет переходную область между горячей плазмой при нормальной плотности и сильно разреженным веществом, которая представляет существенный интерес для моделирования взаимодействия ультракоротких лазерных импульсов с металлами, и имеет большую теоретическую ценность. Таким образом, предоставленный автором программный комплекс для расчета уравнений состояния в этой области температур и плотностей имеет прямое практическое приложение.

Диссертация Дьячкова С. А. представляет собой законченную научно-исследовательскую работу, которая соответствует требованиям,

предъявляемым пунктом 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013 года к диссертациям, представляемым на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 — Физика плазмы, а ее автор заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук.

к. ф.-м. н.

н.с. сектора плазмы и лазеров

ФГБУН ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН

e-mail: v_a_kh@mail.ru

Тел.: +74957029317

Хохлов Виктор Александрович.

Подпись Хохлова Виктора Александровича заверяю:

ученый секретарь ФГБУН ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН

к.х.н.,



Крашаков С.А.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук

142432, Московская обл., г. Черноголовка, просп. академика Семенова, д. 1-А

Тел.: +74957029317

Факс: +74957029317