

В диссертационный совет Д002.110.02  
при ФГБУН "Объединенный институт  
высоких температур РАН" (ОИВТ РАН)  
125412, г. Москва, ул. Ижорская, 13/2

## ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию Кадатского Максима Алексеевича «Квантово-статистический расчёт термодинамических свойств простых веществ и смесей при высоких плотностях энергии», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических по специальности 01.04.08 – «Физика плазмы»

Диссертация Кадатского М.А. *посвящена актуальной и фундаментально важной теме* разработки физико-математических моделей для расчета термодинамических свойств простых веществ и их смесей. Физико-математические модели строятся на основе квантово-статистических моделей среднего атома: Томаса – Ферми (ТФ), Томаса – Ферми с поправками (ТФП) и Хартри – Фока – Слэтера (ХФС). Хотя эти модели предложены достаточно давно и работ по ним чрезвычайно много, актуальность и новизна выбранной темы диссертации не вызывает сомнений, поскольку всё еще оставался открытым вопрос в модели ХФС об обеспечении гладкости термодинамических зависимостей в области перехода состояний электронов от дискретного к непрерывному спектрам без введения свободного параметра (например, значения номера корня уравнения, обеспечивающего сохранение числа рассматриваемых состояний, которое для конкретных элементов определялось из дополнительных физических соображений). Кроме того, поскольку в большинстве работ по расчету термодинамических свойств используется адиабатическое приближение Борна – Оппенгеймера, при котором электронные и ионные подсистемы рассматриваются независимо, то одним из интересных и неисследованных вопросов был выбор сочетания моделей поведения этих подсистем для обеспечения наилучшего описания имеющихся экспериментальных данных. Решение этого вопроса возможно, если имеются численные реализации всех широко используемых моделей электронной подсистемы (по крайней мере, ТФ, ТФП и ХФС) и нескольких достоверных моделей ионной подсистемы (у автора

это модели идеального газа (ИГ) Больцмана и заряженных твердых сфер (ЗТС)). Располагая всеми этими моделями автор детально исследовал особенности поведения их сочетаний и точность воспроизведения экспериментальных данных.

По нашему мнению, наиболее существенными результатами, полученными соискателем и определяющими *научную новизну, фундаментальную и практическую значимости работы*, являются следующие.

1. Модернизированы и численно реализованы три основные квантово-статистические модели среднего атома (ТФ, ТФП, ХФС) для электронной подсистемы. Причем в модель ХФС были внесены принципиальные изменения, позволившие убрать из неё свободный параметр. Достоверность моделей и их численных реализаций подтверждается сравнением с расчетами и экспериментальными данными других авторов. Следует отметить, что количество этих сравнений более чем достаточно.
2. В рамках всех четырех моделей (ТФ, ТФП, ХФС в двух вариантах реализации) рассчитаны для алюминия и молибдена зависимости изохорических и изобарических электронных теплоемкостей от температуры (в широком диапазоне изменения  $T=1...10^5$  эВ). Эти данные требуются при построении широкодиапазонных уравнений состояния (УРС). Отметим, что расчеты по модели ХФС электронной теплоемкости молибдена при нормальной плотности и в широком диапазоне изменения температуры проведены впервые.
3. С использованием сочетаний моделей для электронной (ТФП и ХФС) и ионных (ИГ и ЗТС) подсистем рассчитаны ударно-волновые характеристики представительного набора веществ. Сравнение результатов расчетов с имеющимися экспериментальными данными позволили определить области применимости рассмотренных сочетаний. Эти фундаментальные результаты важны также для практического использования предлагаемых моделей при построении широкодиапазонных УРС.
4. Полученные в диссертации ударно-волновые эталоны алюминия, железа, меди и молибдена с гладким переходом на расчетную кривую, полученную на основе модели ХФС+ЗТС, имеют практически важное значение для трактовки

результатов экспериментов, в которых эти вещества служили в качестве эталонов.

5. Рассчитанные относительные изменения скорости фронта ударной волны на границе двух веществ позволили локализовать область предсказываемых в теории осцилляций, что является весьма полезным для постановки экспериментов, подтверждающих теорию.

Достоверность научных результатов и выводов диссертации Кадатского М.А. обусловлена: корректной физико-математической постановкой рассматриваемых задач; использованием современных численных методов; многоплановым сравнением с расчетными и экспериментальными данными других авторов.

Диссертация Кадатского М.А. объемом 120 страниц состоит из введения, двух глав, заключения, трех приложений и списка литературы. В работе содержатся 35 рисунков, 19 таблиц и 199 библиографических ссылок.

*Во введении* обоснована актуальность исследований, сформулированы цель и задачи работы, показаны ее научная новизна, а также теоретическая и практическая значимости, сформулированы положения, выносимые на защиту.

*В первой главе* описаны физико-математические модели электронных (ТФ, ТФП, ХФС в двух вариантах реализации) и ионных (ИГ и ЗТС) подсистем простых веществ. Рассмотрен алгоритм расчета самосогласованных потенциалов для смеси химических элементов. Наибольшим достижением этой главы являются изменения в модели ХФС. Детальному изложению этой модели и уделено наибольшее внимание в первой главе. Представленные в главе результаты показывают, что автор численно реализовал все рассматриваемые модели среднего атома.

Реализация моделей ионной подсистемы, по нашему мнению, затруднений не представляет и поэтому диссертант ограничился лишь изложением основных положений и соотношений.

Достаточно сложным оказывается задача построения самосогласованных атомных потенциалов для смеси химических элементов. Алгоритм расчета таких потенциалов подробно описан в заключительной части главы.

*Вторая глава* посвящена изложению и обсуждению результатов расчетов, а также их сравнению с расчетными и экспериментальными данными других авторов. В качестве исследуемых простых веществ взяты практически важные металлы (Al, Fe, Cu, Mo, Pb), а в качестве смеси на атомарном уровне рассматривался кварц ( $\text{SiO}_2$ ), являющийся распространенным и, соответственно, хорошо изученным минералом земной коры.

В первой части главы приведены результаты расчетов изохорической и изобарической теплоемкостей электронной подсистемы, полученные по всем рассматриваемым в первой главе моделям среднего атома в широком диапазоне изменения температуры. Проведен сравнительный анализ результатов, даваемых различными моделями.

Проводилось также сравнение с данными, полученными методами теории функционала плотности, которые более адекватно описывают поведение вещества. Важным представляется вывод, что модель ХФС может быть альтернативой этим более вычислительно трудоемким методам.

Во второй части главы приведены результаты расчетов ударных адиабат сплошных и пористых образцов простых веществ и смесей. Построение ударных адиабат является основным методом представления результатов динамических экспериментов и поэтому эта часть работы имеет важное значение для обоснования разработанного научно-методического аппарата посредством сравнения с экспериментальными данными. Как уже упоминалось, построенные в этой части ударно-волновые эталоны с учетом оболочечных эффектов могут оказаться весьма полезными.

В третьей части главы представлены и обсуждены результаты расчетов энтропии разгрузки ударно-сжатых металлов (алюминия и молибдена). Получено согласие экспериментальных данных с расчетами по модели ХФС+ЗТС.

Заключительная часть второй главы посвящена интерпретации результатов относительных измерений сжимаемости в сильных ударных волнах. Проведенное в работе детальное сравнение расчетных и экспериментальных данных показывает что комбинации моделей ХФС+ИГ, ХФС+ЗТС лучше описывают

экспериментальные данные, чем ТФП+ИГ, ТФП+ЗТС. Этот вывод имеет фундаментальное значение для дальнейшего развития теории.

**В заключении** к диссертации кратко изложены основные результаты диссертации. Намечен план дальнейшей работы.

Таблицы ударно-волновых характеристик в различных переменных вынесены в приложения А, Б, В, что, по нашему мнению, сократило общий объем основной части диссертации и упростило её изучение.

Таким образом, диссертационная работа Кадатского М.А. выполнена на высоком научном уровне, содержит ряд новых фундаментальных результатов, имеющих важное значение для практики. Выводы диссертации, сделанные на основе полученных расчетных результатов, являются обоснованными и их достоверность не вызывают сомнений. Результаты диссертации неоднократно докладывались на международных и всероссийских конференциях. Опубликованные в 27 печатных изданиях (6 – статьи, рекомендованные ВАК, 21 – тезисы докладов) данные содержат полную информацию о полученных результатах. Приведенная в диссертации библиография отражает современный уровень проблемы. Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации.

В качестве замечания следует отметить, что, хотя соискатель и упоминает о необходимости учета равновесного излучения при построении УРС при высоких температурах, но последовательно игнорирует его вклад во внутреннюю энергию и давление.

Сделанные замечания не изменяют общей положительной оценки диссертации Кадатского М.А. и имеет характер рекомендации для дальнейших исследований.

**Общая оценка работы.** В целом, диссертация Кадатского М.А. представляет собой завершенную *научно-квалификационную работу*, выполненную на актуальную тему и на высоком фундаментальном уровне. Достоверность полученных результатов сомнений не вызывает.

*Рекомендации по использованию результатов и выводов диссертации.*

Полученные результаты могут быть использованы в практической деятельности научно-исследовательских учреждений, занимающихся физикой высоких плотностей энергий, таких как: ФГБУН "Институт проблем химической физики РАН"; ФГБУН "Объединенный институт высоких температур РАН", РФЯЦ "Всероссийский НИИ экспериментальной физики" и др.

**Заключение.** Диссертационная работа Кадатского Максима Алексеевича «Квантово-статистический расчёт термодинамических свойств простых веществ и смесей при высоких плотностях энергии» полностью удовлетворяет квалификационным требованиям, изложенным в пункте 9 "Положения о порядке присуждения ученых степеней", утвержденным постановлением Правительства РФ № 842 от 24 сентября 2013 г., а ее автор, Кадатский Максим Алексеевич, заслуживает присуждения ей ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 – «Физика плазмы».

Содержание диссертации докладывалось автором и обсуждалось на заседании Секции №7 ученого совета Отдела экстремальных состояний вещества и получило единогласное одобрение.

Официальный оппонент,  
г.н.с. отдела Экстремальных состояний вещества  
Института проблем химической физики РАН,  
доктор технических наук по специальности 20.00.14 «Вооружение и военная техника. Комплексы и системы военного назначения», профессор

“\_4\_” декабря 2019  
e-mail: ostrik@icp.ac.ru

служебный телефон: +7 (496-52) 2-52-44, моб. телефон +7 (926) 981-32-43  
служебный адрес: 142432, г. Черноголовка, просп. Акад. Н.Н. Семенова, д. 1, ИПХФ РАН  
домашний адрес: 142432, г. Черноголовка, ул. Коммунальная 3-А, кв. 31.

Я, Острик Афанасий Викторович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой диссертации Кадатского М.А. и их дальнейшей обработкой.

Подпись А.В. Острика заверяю,  
ученый секретарь ИПХФ РАН,

доктор химических наук



Б.Л. Психа