

## ОТЗЫВ

официального оппонента **Шпатаковской Галины Васильевны**  
на диссертационную работу **Кадатского Максима Алексеевича**  
«КВАНТОВО-СТАТИСТИЧЕСКИЙ РАСЧЁТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ  
ПРОСТЫХ ВЕЩЕСТВ И СМЕСЕЙ ПРИ ВЫСОКИХ ПЛОТНОСТЯХ ЭНЕРГИИ»,  
представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по  
специальности 01.04.08 – «Физика плазмы».

Диссертация **Кадатского Максима Алексеевича** посвящена теоретическому исследованию термодинамических характеристик электронной компоненты горячей плотной плазмы на основе квантово-статистических моделей среднего атома в приближении самосогласованного поля разного уровня сложности: Томаса-Ферми (ТФ), Томаса-Ферми с квантовыми и обменными поправками (ТФП), Хартри-Фока-Слэтера (ХФС).

**Актуальность** темы. В настоящее время накоплен большой экспериментальный материал по состояниям вещества с высокой плотностью энергии, в частности, результатов подземных ядерных испытаний. Для их интерпретации и интерпретации других относительных измерений необходимы теоретические модели уравнения состояния вещества в области плотной горячей плазмы. Экспериментальные исследования свойств вещества под действием интенсивных фемтосекундных лазерных импульсов также требуют теоретической базы для своей интерпретации. Кроме того, для численного моделирования процессов, происходящих с веществом в современных энергетических проектах, уравнение состояния вещества в этой области является необходимой физической характеристикой.

Для описания свойств электронной компоненты вещества в обсуждаемом диапазоне температур и плотностей уже десятки лет применяются квантово-статистические модели среднего атома в приближении самосогласованного поля (ТФ, ТФП, ХФС). Однако, их последовательное сравнение и возможность их адекватного применения к описанию термодинамических свойств различных элементов и веществ в сочетании с разными моделями термодинамики ионов в соответствующей области фазовой диаграммы изучена сравнительно мало. Необходимость такой информации определила **цель** диссертационной работы Кадатского, которая состоит в получении новых расчётных данных по термодинамическим свойствам простых веществ и смесей в области плотной плазмы.

**Объем и структура работы.** Диссертация объемом 120 страниц состоит из Списка сокращений, Введения, Обзора литературы, 2 Глав, Заключения, 3 Приложений и Списка литературы.

Во **Введении** обоснована актуальность рассматриваемой проблемы, сформулированы цели и задачи исследования, выделены новые научные аспекты в проделанной работе. Также обсуждается практическая значимость полученных результатов, и перечисляются выносимые на защиту положения.

В **Обзоре литературы** автор излагает историю возникновения и развития метода самосогласованного поля в приближении среднего атома, начиная с простейшей модели Томаса-Ферми, обсуждает преимущества и недостатки этой и улучшенных за счет учета различных эффектов (обменных, квантовых, градиентных, корреляционных и оболочечных) моделей. Рассматривая методы более высокого уровня, подразумевающие решение уравнения Шрёдингера (или Дирака в релятивистском случае) для волновых функций, автор останавливается на проблеме оптимального учета дискретного, промежуточного (зонного) и непрерывного спектров. В результате обсуждения существующих моделей диссертант выбирает для описания термодинамических свойств плотной горячей плазмы отдельных элементов ранее разработанные другими авторами следующие модели: три модели – ТФ, ТФП и ХФС [28] – для электронной компоненты плазмы и две модели – ИГ и ЗТС [28] – для ионов. В работе используется также один из предложенных ранее методов [29] для расчета термодинамических свойств смеси.

В сравнительно небольшой по объёму **первой главе** кратко рассмотрены выбранные для расчетов модели, приведены необходимые формулы. Большая часть первого раздела этой главы посвящена модели ХФС. Обсуждается проблема выбора значения границы непрерывного спектра  $\epsilon_{0i}$  и предложен простой алгоритм ее решения, позволяющий автоматизировать эту процедуру. Приводится иллюстрация результатов применения этой методики для расчета показателя адиабаты электронной компоненты на изохорах алюминия и молибдена нормальной плотности в широком диапазоне температур. Во втором разделе рассматриваются модели расчета УРС ионной компоненты, а третий посвящен используемому методу расчета самосогласованных атомных потенциалов в случае смеси.

Во **второй главе** описанные выше модели применяются для расчетов различных характеристик металлов (Al, Fe, Cu, Mo) и диоксида кремния ( $\text{SiO}_2$ ).

В первом параграфе приводятся результаты вычисления электронной теплоемкости алюминия и молибдена по всем трем моделям. Полученные в расчетах по модели ХФС характерные осцилляции в зависимости теплоемкости от температуры связаны с проявлением оболочечных эффектов. Для алюминия проводится также сопоставление с другими моделями в экспериментальном диапазоне температур и делается вывод об областях применимости модели ХФС с различным учетом границы непрерывного спектра  $\epsilon_{0i}$ .

Второй раздел второй главы посвящен расчетам ударных адиабат сплошных и пористых образцов металлов и смесей. Наибольшее внимание уделено теоретическому исследованию **алюминия**. Анализируется зависимость результатов от выбора значения границы непрерывного спектра  $\epsilon_{0i}$ , от вида ионной модели, сравниваются соответствующие ударные адиабаты в координатах  $P$ - $\rho$ ,  $D$ - $U$ . Проводится также сравнение с имеющимися абсолютными и относительными экспериментальными данными и с первопринципным расчетом, комбинирующим квантовые методы Монте-Карло и молекулярной динамики. Из близости последнего к результатам по модели ХФС+ЗТС делается вывод об адекватности этой модели в соответствующей области параметров. Расчеты ударных адиабат пористых образцов и успешное сравнение с имеющимися экспериментальными данными позволяют автору подтвердить превосходство модели ХФС+ЗТС среди других рассматриваемых моделей и еще более расширить область ее применимости. Для нормальной ударной адиабаты алюминия построена полуэмпирическая квадратичная зависимость  $D(U)$ , гладко сшитая с результатами модели ХФС+ЗТС, которые представлены в табличном виде в Приложении А. Эти данные предлагается использовать как эталонные.

Для **железа**, **меди** и **молибдена** проводится аналогичное сравнение с экспериментальными данными и расчетами из других работ, строится полуэмпирическая зависимость  $D(U)$ . При этом указывается, что большая погрешность имеющихся экспериментальных данных по-прежнему не позволяет уверенно подтвердить или опровергнуть наличие оболочечных осцилляций на ударной адиабате. На основании расчетов делаются суждения об адекватности и области применимости других рассмотренных моделей. Ударные адиабаты **кварца** и **стишовита**, рассчитанные по используемым в работе моделям, сравниваются с экспериментальными данными. Продемонстрировано радикальное отличие ударных адиабат кварца и усредненного элемента  $\langle \text{Ne} \rangle$  по модели ХФС+ЗТС, тогда как модель ТФП дает для них близкие результаты.

Третий раздел второй главы посвящен результатам расчетов по модели ХФС+ЗТС изоэнтропической разгрузки ударно-сжатых образцов алюминия и молибдена и их сравнению с имеющимися экспериментальными данными.

Интерпретация относительных измерений сжимаемости в сильных ударных волнах рассмотрена в последнем параграфе второй главы. Особенный интерес к этим экспериментам связан с тем, что именно в них были получены максимальные давления в ударных волнах. В работе исследованы 8 пар эталон - исследуемый образец из перечисленных выше металлов, диоксида кремния и свинца. На основе построенных по моделям ТФП и ХФС ударных адиабат, изоэнтроп разгрузки и ударных адиабат повторного сжатия для эталонов и ударных адиабат исследуемого образца построены зависимости  $D_{smp} = f(D_{std})$ , проявляющие

осциллирующее поведение. Наилучшее соответствие экспериментальным данным во всем диапазоне дает модель ХФС, что по мнению автора является косвенным подтверждением влияния оболочечных эффектов на термодинамические свойства горячей плотной плазмы. Согласие ХФС+ЗТС с экспериментальными данными «в обе стороны» были получены для пар Fe-Al, Mo-Al, Al-Mo, для других пар это не удалось.

В **Заключении** формулируются основные результаты работы.

В трех **Приложениях** приводятся таблицы ударных адиабат металлов, кварца и стишовита и таблицы с интерпретацией данных относительных измерений ударной сжимаемости алюминия в сильных ударных волнах с молибденовым и железным эталонами.

**Замечания и вопросы** по представленному материалу:

1. Как автор может объяснить результаты по парам веществ, для которых не удалось получить согласие с экспериментальными данными «в обе стороны»?

2. Градиентные эффекты связаны не с конечным значением электронной плотности в нуле, как утверждает автор на стр.15, а с учетом неоднородности в системе. Бесконечная плотность в нуле является уже следствием пренебрежения ими в модели ТФ, которая получается в результате локального применения формул идеального электронного газа к заведомо неоднородной системе атомной ячейки.

3. Формулировка периодических условий на границе сферической ячейки была дана не в работе 1975 года [81], как указывает диссертант на стр. 33, а в статье Г.М. Гандельмана с соавторами 1962 года (см. обзор в УФН, 1970, т. 100, с. 193 - на эту статью ссылка дана в книге [28]).

4. Обратное положение полос  $4p$  и  $4d$  на рис. 1.3 на стр. 34 все же кажется не объяснимым. Правильна ли их идентификация?

5. Почему приведенная на стр. 36 формула (1.30а) для электронного давления в модели ХФС не совпадает с той формулой (4), что приведена в работе [28] на стр.297 и на которую автор сам ссылается? Или это опечатка?

6. В работе встречаются стилистически неудачные обороты: «наблюдаемая регулярность ... наблюдается» (с.18), «классифицируются на ...» (с. 30), «Под  $\epsilon_{nl}$  и  $R_{nl}(r)$  обозначены...» (с. 32), «путем аддитивного сложения...» (с. 40).

Перечисленные недостатки ни в коей мере не снижают общей положительной оценки работы. Диссертант решил все поставленные **задачи**. Рассчитанная электронная теплоёмкость может быть использована для оценки электронной температуры в экспериментах по взаимодействию фемтосекундных лазеров с веществом. Практически значимы полученные автором аппроксимации ударных адиабат рассмотренных четырех металлов (Al, Fe, Cu, Mo), рекомендованных в качестве ударно-волновых эталонов. **Новые**

**теоретические** результаты получены для интерпретации относительных измерений для шести пар веществ (Fe–Al, Mo–Al, SiO<sub>2</sub>–Al, Al–Mo, Fe–Mo и Pb–Cu), в которых было продемонстрировано наличие оболочечных осцилляций. Таким образом, работа является законченным исследованием, дающим **практический** инструментарий для многих приложений.

**Достоверность** полученных результатов подтверждается теоретическим обоснованием использованных моделей, сопоставлением с результатами экспериментов. Материалы по теме диссертации **опубликованы в 6** печатных работах из перечня **ВАК**, имеется 21 публикация в виде тезисов докладов на конференциях. Автореферат в полноте отражает содержание диссертации.

Диссертация Кадатского М.А. является завершенной научно-исследовательской работой, соответствующей 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. Ее автор, Кадатский Максим Алексеевич, заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук.

д. ф.-м. н.

эксперт-советник ИПМ им. М. В. Келдыша РАН

Шпатаковская Галина Васильевна

тел: +74992207223

e-mail: shpagalya@yandex.ru

Подпись Шпатаковской Галины Васильевны заверяю:

Ученый секретарь ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, к. ф.-м. н.

Маслов Александр Иванович

e-mail: maslov@imamod.ru



Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр

Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук

125047, г. Москва, Миусская пл., д. 4

Тел: +74999781314

e-mail: office@keldysh.ru