

МИНИСТЕРСТВО
НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

**«Национальный
исследовательский ядерный
университет «МИФИ»
(НИЯУ МИФИ)»**

Каширское шоссе, д.31, г. Москва, 115409
Тел. (499) 324-77-77, факс (499) 324-21-11
<http://www.mephi.ru>

04.12.2019 № 004/2
На № _____ от _____

УТВЕРЖДАЮ

Ректор НИЯУ МИФИ, д. ф.-м. н., профессор



Стриханов М.Н.

» _____ 2019 г.

ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

**федерального государственного автономного образовательного учреждения
высшего образования**

**Национального исследовательского ядерного университета «МИФИ»
(НИЯУ МИФИ)**

на диссертационную работу **КАДАТСКОГО Максима Алексеевича «Квантово-статистический расчёт термодинамических свойств простых веществ и смесей при высоких плотностях энергии»**, представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 – «Физика плазмы» в диссертационный совет Д002.110.02 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (125412, г. Москва, ул. Ижорская, 13, стр. 2)

Диссертационная работа посвящена теоретическому исследованию термодинамических свойств простых веществ и соединений сложного химического состава, находящихся в состояниях с высокой плотностью энергии. Целью диссертационной работы Кадатского М.А. является получение новой теоретической информации о термодинамических свойствах металлов и смесей в области состояний горячей плотной плазмы.

Тема диссертационной работы является актуальной, т.к. в последние годы идёт активное экспериментальное и теоретическое исследование процессов, в которых происходит переход вещества в состояния с высокими плотностями энергии, с характерным значением, превышающим 10^{11} Дж/м³. В частности, эти состояния реализуются в экспериментах с использованием генераторов сильных ударных волн, магнитным ускорением металлических ударников, воздействием интенсивных лазерных импульсов, взрывом ме-

таллических проводников в X- и Z-пинчах. Для проведения численного моделирования этих и других физических процессов, в частности, с помощью методов вычислительной гидродинамики, необходимо знание уравнений состояния вещества. Для расчёта уравнений состояний широкого класса веществ в этой области параметров успешно применяется квантово-статистический подход, использующий приближение среднего атома.

В рамках этого подхода в диссертационной работе были осуществлены расчёты уравнений состояния различных веществ по ранее предложенным моделям Томаса–Ферми, Томаса–Ферми с поправками и Хартри–Фока–Слэтера. Кроме того, автором был предложен и реализован новый вариант модели Хартри–Фока–Слэтера, в котором самосогласованным способом определяется число электронных состояний, учитываемых в рамках приближения зонной структуры, что позволило получить гладкие термодинамические зависимости при широкодиапазонных расчётах. С помощью перечисленных моделей автором были проведены широкодиапазонные расчёты теплоёмкости электронной подсистемы для плазмы алюминия и молибдена при нормальной плотности вещества. Проведено сравнение результатов квантово-статистических расчётов с результатами расчётов по другим моделям. Кроме того, по предложенному варианту модели Хартри–Фока–Слэтера с учётом ионной подсистемы по моделям идеального газа Больцмана и заряженных твёрдых сфер рассчитаны ударно-волновые зависимости для сплошных и пористых образцов алюминия, железа, меди, молибдена и диоксида кремния. Было проведено сравнение результатов расчётов ударных адиабат и изоэнтроп разгрузки с доступными экспериментальными данными.

Объем и структура работы. Диссертация состоит из списка сокращений, введения, обзора литературы, 2 глав, заключения, 3 приложений и списка литературы. Полный объём диссертации составляет 120 страниц, включая 35 рисунков и 19 таблиц. Список литературы включает 199 наименований.

Во введении обосновывается актуальность исследований, проводимых в диссертационной работе, формулируются цель и задачи работы, излагается научная новизна и практическая значимость работы, представлены выносимые на защиту научные положения.

В обзоре литературы приводится краткий обзор возникновения и развития метода самосогласованного поля среднего атома. Перечислены основные модели этого метода. Приведены основные результаты работ, в том числе последних лет, где данный метод использовался для решения задачи построения ударных адиабат различных веществ в широком диапазоне параметров. *Первая глава* посвящена описанию использованных в диссертации методов расчёта термодинамических состояний термодинамических зависимостей.

Последовательно излагаются способы расчёта электронного вклада в термодинамику простых веществ. Показано, как с использованием рассчитанной электронной структуры, можно описать термодинамику полной системы, в том числе и для веществ сложного химического состава.

Вторая глава посвящена обсуждению результатов расчётов термодинамических зависимостей, полученных с помощью описанных в первой главе моделей. В этой главе представлены и обсуждаются результаты расчётов изохорической и изобарической теплоёмкостей электронной подсистемы алюминия и молибдена; ударных адиабат сплошных и пористых образцов алюминия, железа, меди, молибдена и диоксида кремния; изоэнтропы разгрузки ударно-сжатых образцов алюминия и молибдена. На основе полученных ударно-волновых зависимостей предложены полуэмпирические аппроксимации ударных адиабат сплошных образцов алюминия, железа, меди, молибдена и проведена интерпретация относительных измерений сжимаемости алюминия в сильных ударных волнах.

В заключении сформулированы основные результаты работы.

Научная новизна работы. В диссертационной работе впервые проведены широкодиапазонные расчёты уравнения состояния алюминия, меди, железа, молибдена и диоксида кремния по версии модели Хартри–Фока–Слэтера, в которой учитывается зонная структура для всех значимых состояний электронов с высокой энергией, а число отнесённых к дискретному и промежуточному спектру состояний подбирается автоматически. Впервые по модели Хартри–Фока–Слэтера проведён широкодиапазонный (при температурах от 10^{-1} до 10^4 эВ) расчёт значений электронных теплоёмкостей алюминия (с плотностью $\rho = 2.712$ г/см³) и молибдена ($\rho = 10.22$ г/см³). Впервые по модели Хартри–Фока–Слэтера с учётом вклада ионной подсистемы по модели заряженных твёрдых сфер рассчитаны изоэнтропы разгрузки алюминия и молибдена. Впервые по модели Хартри–Фока–Слэтера с учётом вклада ионной подсистемы по модели идеального газа Больцмана рассчитаны ударные адиабаты диоксида кремния в модификациях кварца и стишовита. Впервые показано влияние оболочечных эффектов на относительное изменение скорости фронта ударных волн при прохождении границы раздела двух веществ.

Практическая и научная значимость работы состоит в следующем:

1. Разработанный алгоритм расчёта термодинамических зависимостей позволяет получить новую информацию об уравнении состояния различных веществ в области горячей плотной плазмы, необходимую при моделировании различных теплофизических процессов в области неидеальной плазмы при высоких ударно-волновых сжатиях вещества.

2. Рассчитанные значения изохорической электронной теплоёмкости алюминия и молибдена позволяют оценить значения электронной температуры, получаемой в экспериментах по изучению взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с веществом. Полученные автором результаты могут быть использованы при интерпретации экспериментов проводимых в НИЯУ МИФИ.

3. Предложенные аппроксимации ударных адиабат алюминия, железа, меди и молибдена могут быть использованы для интерпретации ударно-волновых экспериментов в области экстремально высоких давлений и температур, где ударные адиабаты перечисленных веществ используются в качестве эталонных ударных адиабат.

4. Рассчитанные зависимости относительного изменения скорости фронта ударных волн при прохождении границы раздела двух веществ позволяют определить область параметров, в которой возможно экспериментальное подтверждение наличия наблюдаемых в расчетах осцилляций. Необходимая относительная точность измерения волновых скоростей для экспериментального подтверждения этого эффекта автором оценивается в 0.5%.

Апробация работы. Основные результаты работы докладывались на 28 международных и российских конференциях.

Публикации. Основные результаты по теме диссертации опубликованы автором достаточно полно в 27 печатных изданиях, 6 из которых — статьи в журналах, рекомендованных ВАК, 21 — тезисы докладов.

Замечания. По содержанию работы Кадатского М.А. имеются следующие замечания:

1. В заключении работы на основе сравнения результатов расчётов с экспериментальными данными по ударно-волновым свойствам алюминия, железа, меди и молибдена приводится вывод о хорошем описании моделью Хартри-Фока-Слэтера с учётом ионов по модели заряженных твёрдых сфер поведения вещества в состояниях с высокой плотностью энергии, но при этом в работе не приводится сравнение результатов расчётов с доступными экспериментальными данными по статическим измерениям сжимаемости веществ на алмазных наковальнях.

2. В пункте 2 практической и научной значимости во введении работы отмечается, что рассчитанные значения изохорической электронной теплоёмкости алюминия и молибдена позволяют оценить значения электронной температуры, получаемой в экспериментах по изучению взаимодействия фемтосекундных лазерных импульсов с веществом. Однако расчетных значений электронной температуры алюминия или молибдена не приводится.

3. В пункте 4 практической и научной значимости введения отмечается, что, рассчитанные зависимости относительного изменения скорости фронта ударных волн при прохождении границы раздела двух веществ позволяют найти область параметров, в которой возможно экспериментальное подтверждение наличия наблюдаемых в расчетах осцилляций. Указана относительная точность измерения волновых скоростей для экспериментального подтверждения этого эффекта 0.5%. Но таких экспериментальных данных с указанной точностью не приводится.

Отмеченные замечания не влияют на общую положительную оценку рассматриваемой диссертации. Полученные в ней **результаты и выводы обоснованы и достоверны**, что подтверждается сравнением полученных результатов с большим массивом доступных экспериментальных данных и с результатами аналогичных расчётов по другим теоретическим моделям, зарекомендованным в научном сообществе. **Личный вклад** Кадатского М.А. представляется определяющим, все основные результаты диссертации получены лично автором. **Автореферат и опубликованные работы** в полной мере отражают содержание диссертации.

Диссертация Кадатского М.А. представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая удовлетворяет всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней ВАК (№ 842 от 24 сентября 2013 г.) Кадатский Максим Алексеевич заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 – «Физика плазмы».

Диссертация рассмотрена на научном семинаре института лазерных и плазменных технологий (ЛаПлаз) НИЯУ МИФИ 29.11.2019 г. Отзыв был одобрен по результатам голосования участников заседания. Присутствовало на заседании 11 чел. Результаты голосования: «за» – 11 чел., «против» – 0 чел., «воздержалось» – 0 чел.

Директор института лазерных и плазменных технологий (ЛаПлаз) НИЯУ МИФИ,
д. ф.-м. н., профессор



А.П. Кузнецов

Председатель совета по аттестации и подготовке научно-педагогических кадров НИЯУ МИФИ,
д. ф.-м. н., профессор



Н.А. Кудряшов