



ПРЕДПРИЯТИЕ ГОСКОРПОРАЦИИ "РОСАТОМ"

Федеральное государственное унитарное предприятие
"РОССИЙСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ ЯДЕРНЫЙ ЦЕНТР –
Всероссийский научно-исследовательский институт
технической физики имени академика Е. И. Забабахина"
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИТФ им. академ. Е. И. Забабахина")

ул. Васильева, 13, г. Снежинск Челябинской области, 456770
факс: (351-46) 5-22-33, 5-55-66, 3-26-25, 5-44-99
тел: (351-46) 3-26-25, 5-43-67
E-mail: vniitf@vniitf.ru

20.11.2015 № 010-10/341

На № _____ от _____

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Князева Дмитрия Владимировича
«РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТИ, ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ И
ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ПЛОТНОЙ ПЛАЗМЫ НА ОСНОВЕ МЕТОДА
КВАНТОВОЙ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ
И ФОРМУЛЫ КУБО-ГРИНВУДА»

на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук
по специальности 01.04.08 («Физика плазмы»)

Диссертация Д.В. Князева посвящена расчётам переносных и оптических характеристик тёплой плотной плазмы при помощи квантовой молекулярной динамики, основанной на методе функционала плотности. Исследование таких характеристик в области параметров вещества, рассмотренной в диссертации, является весьма сложной задачей как в экспериментальном, так и в теоретическом отношении и поэтому ещё далеко от завершения. Тема работы продиктована необходимостью получения новых теоретических данных о свойствах плотной плазмы и практической востребованностью получаемых результатов для моделирования различных экспериментов (взаимодействие лазерного излучения или пучков быстрых ионов с веществом, электровзрыв металлов и др.).

Метод расчёта, использованный диссертантом (квантовая молекулярная динамика), относится к так называемым первопринципным методам и в пределах своей области применимости позволяет получать наиболее достоверные данные о свойствах веществ, в том числе имеющих сложный химический состав. При дальнейшем росте вычислительных мощностей и развитии численных методов роль расчётов методом квантовой молекулярной динамики, по-видимому, будет только возрастать. Поэтому актуальность работы сомнений не вызывает.

Для практических расчётов переносных и оптических величин диссертант использовал формулу Кубо-Гринвуда. Данный подход хорошо зарекомендовал себя применительно к расчётам статических коэффициентов электропроводности и теплопроводности, но имеет некоторые ограничения при вычислении высокочастотных динамических характеристик высокотемпературной плазмы. Эти ограничения связаны с тем, что при больших энергиях фотонов (особенно при высоких температурах) необходим учёт большого числа квантовых состояний ионов с различным числом электронов. Такой учёт не сводится к формуле Кубо-Гринвуда, оперирующей одноэлектронными состояниями со средними числами заполнения. Тем не менее, в диапазонах температур и плотностей веществ и энергий фотонов, рассмотренных в диссертации, указанное ограничение практически не проявляется.

В работе уделено должное внимание теоретическим основам применяемого метода и присущим ему численным погрешностям. Проведённое диссертантом систематическое исследование численных погрешностей представляет большой интерес, хотя и ограничивается в основном одним значением температуры и плотности алюминия.

В расчётах по формуле Кубо-Гринвуда с равновесного участка моделирования методом квантовой молекулярной динамики (КМД-моделирования) Д.В. Князевым выбираются некоторые представительные конфигурации ионов. Для таких конфигураций рассчитывается электронная структура с техническими параметрами, обеспечивающими бóльшую точность,

чем при самом КМД-моделировании. Для некоторых технических параметров, например, числа зон, правомерность такого подхода достаточно очевидна, так как расчёт оптических характеристик при больших энергиях фотонов требует учёта высоколежащих зон, которые несущественны при КМД-моделировании. Тем не менее, чтобы лучше обосновать данный подход, для некоторых параметров (числа k -точек в зоне Бриллюэна, энергии обрезания в разложении волновой функции по плоским волнам) было бы полезно иметь оценку погрешности (при различных значениях температуры и плотности вещества), связанной с тем, что значения этих параметров при КМД-моделировании могут отличаться от их значений при расчётах по формуле Кубо-Гринвуда.

Важным достоинством работы является то, что Д.В. Князев не ограничился случаем термодинамического равновесия и рассчитал переносные и оптические характеристики алюминия в двухтемпературном случае (при температуре электронов, большей температуры ионов). Такие данные необходимы для моделирования фемтосекундного лазерного нагрева алюминиевых мишеней. В связи с этим в дальнейшем было бы интересно изучить влияние ионной температуры на электронную структуру (в том числе плотность состояний) и получить термодинамические функции (например, теплоёмкость) в двухтемпературном случае. Кроме того, в двухтемпературном случае особенно важно исследовать вопрос об учёте электрон-электронного рассеяния в рамках рассматриваемого подхода.

Более высокая точность квантовой молекулярной динамики по сравнению с широко используемыми моделями среднего атома ещё в большей мере проявляется для веществ сложного химического состава. Несомненный интерес представляют выполненные Д.В. Князевым расчёты для плазмы эффективного состава CH_2 . Д.В. Князев достаточно убедительно объяснил относительно быстрый рост электропроводности при $T < 10$ кК изменением плотности электронных состояний вблизи значения химического потенциала. При этом для теплоёмкости получен нетривиальный результат – при $T < 15$ кК теплоёмкость при постоянном объёме возрастает с уменьшением температуры. При существенно более высоких температурах такое поведение теплоёмкости

встречается часто и объясняется быстрым изменением средней степени ионизации при изменении температуры, однако в рассмотренном Д.В. Князевым интервале температур увеличение теплоёмкости с уменьшением температуры выглядит несколько необычно. Поэтому в дальнейшем было бы интересно проинтерпретировать эту зависимость теплоемкости от температуры: связана ли она с поведением плотности состояний, с изменением некоторой эффективной средней степени ионизации, с началом образования химических связей или обусловлена другими факторами.

Высказанные замечания носят характер пожеланий и не умаляют впечатления о высоком качестве работы. Ознакомление с авторефератом не оставляет сомнений в том, что диссертация Д.В. Князева представляет собой завершённую научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным пунктом 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24 сентября 2013 г. Князев Дмитрий Владимирович заслуживает присуждения ему учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 («Физика плазмы»).

Научный сотрудник РФЯЦ-ВНИИТФ,
кандидат физико-математических наук

Овечкин

А.А. Овечкин

20.11.2015

Подпись научного сотрудника РФЯЦ-ВНИИТФ,
кандидата физико-математических наук

Антон Александрович Овечкина подтверждаю

Ученый секретарь Диссертационного совета
РФЯЦ-ВНИИТФ,

доктор физико-математических наук



П.А. Лобода