

ОТЗЫВ

об автореферате диссертационной работы **Князева Дмитрия Владимировича** «**Расчет электропроводности, теплопроводности и оптических свойств плотной плазмы на основе метода квантовой молекулярной динамики и формулы Кубо-Гринвуда**», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 – физика плазмы


Диссертационная работа посвящена применению первопринципного подхода методом квантовой молекулярной динамики с использованием пакета VASP для расчета электропроводности и теплопроводности плотной двухтемпературной плазмы. В качестве объектов исследования выбраны Al и вещество эффективного состава CH_2 . Если для исследования структурных и кинетических свойств подобный подход применялся, то его использование для изучения электронных переносных свойств является актуальным. Диссертанту удалось осуществить нетривиальные расчеты с использованием формализма Кубо-Гринвуда, для чего им была написана программа, реализующей эти расчеты на основе данных, полученных при моделировании методом VASP. В диссертационной работе Князева Д.В. получены новые научные результаты. Оценена точность расчета статической электропроводности от параметров модели, а также показано, что она не зависит от температуры электронов. Найдено, что время релаксации с ростом температуры ионов убывает значительно медленнее, чем считалось в теории Друде. Получены немонотонные зависимости свойств вещества органического состава.

Имеются следующие замечания и вопросы:

1. Как следует из рис. 1, результаты, полученные для электросопротивления алюминия для системы из 108 атомов лучше согласуются с опытом, чем для системы из 256 атомов. С чем это связано? Как изменятся результаты при расчете с максимальным числом атомов, равным 1372, которое использовалось в работе?
2. В автореферате не приводится сравнение расчетных данных с опытом для теплопроводности алюминия. Почему теплоемкость рассчитана для CH_2 и не рассчитана для Al?

Указанные замечания не умаляют научной и практической значимости диссертационной работы Князева Д.В., которая является законченным самостоятельным научным исследованием, его актуальность, новизна и практическая значимость не вызывает сомнений. В работе развит новый подход к расчету электронных переносных и оптических свойств плотной двухтемпературной плазмы на основе совместного использования метода квантовой молекулярной динамики и формализма Кубо-Гринвуда. Представленная диссертационная работа полностью отвечает квалификационным требованиям, установленным в п. 9 «Положения о присуждении учёных степеней» от 24.09.2013 г. № 842, а ее автор, Князев Дмитрий Владимирович, безусловно, заслуживает присуждения ему ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 – физика плазмы.

11.11.2015


Гельчинский Борис Рафаилович

д.ф.-м.н., заведующий лабораторией порошковых, композиционных и наноматериалов Института металлургии УрО РАН, 620016, Екатеринбург, ул. Амундсена, 101, рабочий телефон: (343) 267-89-14, e-mail: brg47@list.ru


Юрьев Анатолий Аркадьевич

к.ф.-м.н., старший научный сотрудник лаборатории порошковых, композиционных и наноматериалов Института металлургии УрО РАН, 620016, Екатеринбург, ул. Амундсена, 101, рабочий телефон: (343) 232-90-78, e-mail: yurev-anatolii@mail.ru

Подписи Гельчинского Б.Р. и Юрьева А.А. удостоверяю,
Ученый секретарь Института металлургии УрО РАН, к.х.н.


В.И. Пономарев

