

## ОТЗЫВ

официального оппонента Брантова Андрея Владимировича  
на диссертационную работу Морозова Игоря Владимировича  
«Столкновительные и релаксационные процессы в неидеальной электрон-ионной плазме»,  
представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по  
специальности 1.3.9 – физика плазмы

Диссертационная работа Морозова И. В. посвящена исследованию неидеальной (плотной) электрон-ионной плазмы, возникающей при воздействии коротких лазерных импульсов умеренной интенсивности на твердотельные и наноструктурированные мишени, взаимодействии потоков заряженных частиц с веществом, в электрических разрядах, при электровзрыве проводников. Неидеальная плазма встречается также в некоторых астрофизических объектах, таких как компактные звезды и недра крупных планет.

### **Актуальность темы исследования**

Как правило, для описания плазмы, четвертого состояния вещества, определяемого как квазинейтральный ионизированный газ, состоящий из большого числа заряженных частиц, используется газовое приближение, предполагающее малость средней потенциальной энергии частиц по сравнению с их кинетической энергией. Именно такое приближение позволяет обосновать кинетическую теорию и гидродинамические модели, являющихся основой для описывания идеальной плазмы. Для изучения неидеальной плазмы, где газовое приближение неприменимо, устоявшейся теории до сих пор не существует, что объясняется сложностью последовательного учета столкновительных процессов, во многом определяющих динамику частиц в плазме и наблюдаемый отклик среды в виде излучения или выхода заряженных частиц. Развитие теоретических подходов и методов компьютерного моделирования неидеальной плазмы, учитывающих близкие столкновения частиц, квантово-механические эффекты их взаимодействия, процессы ионизации и рекомбинации атомов, частичное или полное вырождение электронного газа, является, таким образом, актуальной задачей как с точки зрения накопления фундаментальных знаний о свойствах вещества в «экстремальных» состояниях, к которым с уверенностью можно отнести неидеальную плазму, так и с практической точки зрения ввиду значимости влияния неидеальности плазмы на результаты экспериментальных исследований и технологических процессов. На этом пути следует отдельно выделить разработку методов компьютерного моделирования, которым в диссертационной работе

уделяется большое внимание. Современное развитие компьютерных технологий сделало возможным моделирование достаточно сложных процессов, происходящих в плазменных средах. Методы молекулярной динамики (МД), рассматривающие вещество на уровне отдельных электронов и ионов и не претендующие в большинстве случаев на полномасштабное описание плазменной системы, позволяют описать столкновительные процессы в неидеальной плазме и получить характеристики плазмы (например, уравнение состояния вещества), весьма востребованные для численных методов более высокого порядка, таких как гидродинамическое моделирование.

### **Научная новизна и достоверность результатов**

Научная новизна представленных в диссертации результатов определяется набором оригинальных методик компьютерного моделирования электрон-ионной плазмы, разработанных Морозовым И. В., включающих: метод классической МД с учетом среднего поля для расчета продольной проводимости, метод исследования колебаний электронов в кластерной наноплазме на основе анализа пространственно-разрешенной автокорреляционной функции тока; метод ограничения ширины волновых пакетов в молекулярной динамике с волновыми пакетами (МДВП), основанный на вычислении энергии взаимодействия электрона с ближайшим ионом; модификация метода МДВП с использованием нескольких волновых пакетов на электрон для повышения точности описания связанных состояний электронов и ионов; модификация метода МДВП с учетом обменно-корреляционных эффектов взаимодействия электронов на основе формализма электронной плотности для моделирования плазмы за границей вырождения электронов.

С помощью указанных методик впервые рассмотрено влияние неидеальности плазмы на характеристики двойного электрического слоя вблизи поверхности металла в условиях формирования униполярной вакуумной дуги и предложены полуэмпирические формулы для зависимостей ширины слоя и напряженности электрического поля от средней концентрации электронов; впервые с учетом эффектов неидеальности определены скорости установления равновесного распределения электронов по скоростям, пространственного распределения электронов и плавления ионной решетки в плазме, образованной в треке тяжелого многозарядного иона; впервые детально исследованы моды колебаний электронов в квазиравновесной кластерной наноплазме; получены новые уточняющие результаты для статической и динамической проводимости неидеальной плазмы, включая ее высокочастотную асимптотику.

Также в диссертации представлены оригинальные теоретические модели расчета продольной и поперечной проводимости по результатам МД моделирования с учетом граничных условий, релаксации электронов в кластерной наноплазме и сдвига частоты

поверхностных плазмонов в неидеальной кластерной наноплазме в зависимости от размера кластера.

Все полученные результаты сопоставлены с имеющимися теоретическими моделями, результатами экспериментальных исследований и компьютерного моделирования, проведенными различными методами. Так, например, результаты для частот поверхностных плазмонов в кластерной наноплазме, полученные методом классической МД сравниваются с расчетом на основе уравнения Власова, а результаты модифицированного метода МДВП сопоставляются с результатами, полученными методами квантовой молекулярной динамики и методом Монте-Карло в терминах интегралов по траекториям. Причины выявленных различий подробно обсуждается в тексте работы. Результаты работы не противоречат современным представлениям статистической физики, классической и квантовой механики. Таким образом, достоверность представленных результатов не вызывает сомнения.

#### **Степень обоснованности научных положений**

Научные положения, выводы и рекомендации, сформулированные в диссертационной работе, хорошо аргументированы и обоснованы результатами проведенного компьютерного моделирования, представленными в диссертации в форме графиков и таблиц, сравнением с опубликованными, в том числе экспериментальными, данными. Полученные аналитические выражения снабжены необходимыми выкладками и ссылками на литературные источники. Положения, выносимые на защиту, являются логически непротиворечивыми и обоснованными.

#### **Теоретическая и практическая значимость**

Теоретическая значимость работы определяется в первую очередь развитием методов компьютерного моделирования, которые могут быть применены в различных областях исследований неидеальной плазмы и плотного разогретого вещества: ударно-сжатой плазмы, плазмы в условиях лазерного нагрева и воздействия пучков частиц, кластерной наноплазмы, различного типа пространственно неоднородных и неравновесных плазменных структур, астрофизических объектов.

Практическое значение имеют разработанная модель релаксации плазмы в треке тяжелого многозарядного иона (необходима, например, для медицинских приложений и задач управляемого термоядерного синтеза); полученные данные о начальном этапе формирования повреждения поверхности при возникновении униполярной вакуумной дуги (необходимы для разработки методов защиты стенок микроволновых устройств в ускорительной технике); результаты расчета динамической проводимости и диэлектрической проницаемости неидеальной плазмы (необходимые, например, для более

точного описания начальной стадии лазерной абляции).

### **Объем и структура диссертации**

Диссертация состоит из пяти основных глав, введения, заключения и списка литературы. Общим объемом работы составляет 284 страницы, из них 223 страницы текста и 50 страниц списка литературы, состоящего из 557 ссылок.

*Во введении* изложены актуальность темы исследования, цели и задачи работы, новизна, теоретическая и практическая значимость полученных результатов, методы исследования, положения, выносимые на защиту, степень достоверности и апробация результатов, описание личного вклада автора.

*Первая глава* содержит обзор имеющихся теоретических и экспериментальных результатов, а также методов компьютерного моделирования. Среди теоретических методов выделены химическая и физическая модели неидеальной плазмы, квантово-статистический подход для расчета ее термодинамических свойств, модели взаимодействия частиц на основе псевдопотенциалов, способы построения уравнений состояния вещества, статистические методы, основанные на формализме электронной плотности (метод Томаса-Ферми). Наибольшее внимание уделяется методам компьютерного моделирования. В частности, подробно описана история возникновения и развития методов классической молекулярной динамики и Монте-Карло, а также их модификации – метода TreeMD. Также обсуждаются метод частиц в ячейке, метод квантовой молекулярной динамики и квантового Монте-Карло в терминах интегралов по траекториям, метод молекулярной динамики с волновыми пакетами. Приводятся экспериментальные данные результатов астрофизических исследований, экспериментов с алмазными наковальнями, в том числе подогреваемыми лазерными импульсами, ударно-волновых экспериментов, экспериментов по воздействию лазерных импульсов и потоков частиц на конденсированные мишени, в том числе наноструктурированные, данные о электрических разрядах и электровзрыве проводников. Большое внимание уделяется актуальной проблеме фазового перехода в разогретом плотном водороде и дейтерии.

*Вторая глава* посвящена методам расчета статической и динамической проводимости неидеальной плазмы с помощью классической МД. Эта глава имеет важное методическое значение, и ее результаты используются в последующих главах. В главе представлены методы расчета траекторий в периодической системе с учетом и без учета среднего поля, а также в системе с отражающими границами, проводится анализ спектров автокоррелятора тока для систем с различными граничными условиями и обсуждается способ перехода к длинноволновому пределу. Результатом данной главы является теоретическое обоснование возможности применения метода классической молекулярной

динамики для расчета динамической проводимости неидеальной электрон-ионной плазмы в длинноволновом пределе, а также методика определения внутренней и внешней динамической проводимости при использовании различного типа граничных условий. Приведены зависимости динамической проводимости и эффективной частоты столкновений в неидеальной плазме от параметра неидеальности плазмы, температуры плазмы и частоты возмущающего поля.

*Третья глава* дает описание методов и результатов моделирования релаксационных процессов неидеальной плазме с различным типом пространственной неоднородности. Рассматриваются процессы формирования двойного электрического слоя на границе плазма-вакуум, а также вблизи поверхности металла в условиях униполярной дуги (металл-плазма). Исследуется релаксация неидеальной плазмы, образованной одиночным многозарядным ионом в конденсированной мишени. Основными результатами данной главы являются общие выводы о характере и структуре установившегося двойного электрического слоя в зависимости от параметров плазмы. В частности приведены времена установления пространственное распределение заряда и напряженности электрического поля в неидеальной плазме вблизи поверхности металла в условиях формирования униполярной вакуумной дуги, зависимости ширины приповерхностного слоя и напряженности поля от концентрации зарядов при различных температурах электронов; времена установления равновесного распределения электронов и установившееся пространственное распределение заряда в цилиндрическом слое неидеальной плазмы, образованной под воздействием одиночного многозарядного иона на конденсированную мишень. Результаты компьютерного моделирования сопоставлены с экспериментальными данными.

*Четвертая глава* связана с исследованиями электронной подсистемы в неидеальной плазме, полученной в результате воздействия фемтосекундных лазерных импульсов на наноразмерные кластеры. В начале главы описан метод исследования равновесной наноплазмы, основанный на остановке ионов и термализации электронов, а также метод исследования релаксации электронов и зарядки кластера. Далее изложен оригинальный подход к исследованию колебаний электронов в кластерной наноплазме на основе расчета пространственно-разрешенной автокорреляционной функции тока. В качестве результатов приведены данные для установившегося заряда кластера, частот и декрементов затухания поверхностных и объемных плазмонов в зависимости от температуры электронов, плотности и размера кластера. Показано, что произведение величины установившегося заряда ионизованного наноразмерного кластера на температуру электронов линейно зависит от размера кластера. Описано несколько

теоретических моделей, объясняющих характер зависимости частоты поверхностных плазмонов от размера кластера с учетом неоднородного распределения электронов в ионизованном кластере.

**Пятая глава** описывает предложенные автором дополнения к методу МДВП в применении к моделированию электрон-ионной плазмы. Данный метод основан на представлении электронов в виде гауссовских волновых пакетов и имеет ряд преимуществ по сравнению с классической МД. Однако, ему свойственны и существенные недостатки, такие как неограниченное расширение волновых пакетов со временем для электронов вне области сильного взаимодействия; невысокая точность представления связанных состояний электронов и ионов для низколежащих квантовых уровней по сравнению с другими квантово-механическими подходами; сложность или недостаточная точность существующих численных алгоритмов для учета многочастичных квантовых эффектов. Решение каждого из этих вопросов обсуждается в соответствующем разделе данной главы: в первом подразделе предложены оригинальные способы ограничения ширины волновых пакетов; во втором подразделе описано повышение точности представления волновых функций за счет использования линейной комбинации из нескольких гауссовских волновых пакетов на электрон; в третьем подразделе описан метод расчета обменно-корреляционных эффектов, основанный на использовании функционала электронной плотности, традиционно применяемого в квантовой молекулярной динамике. Для верификации разработанного подхода приведены расчеты уравнения состояния водородной плазмы, ударной адиабаты дейтерия, а также изоэнтропы ударно-сжатых дейтерия и гелия.

**Заключение** подводит итог работы, показывает взаимосвязь и значимость полученных результатов, содержит перспективы дальнейших исследований.

#### **Замечания**

Несмотря на хорошее по большей части качество изложение материала, диссертация не лишена недостатков:

1. В классической теории плазмы диэлектрическая проницаемость и проводимость определяются как отклик плазмы на малые возмущения внешнего электрического поля и вычисляются через токи, вызванные этим полем. В диссертационной работе проводимость вычисляется через корреляционные функции токов, связь которых с диэлектрической проводимостью определена для идеальной плазмы, но не столь очевидна для рассматриваемого случая неидеальной плазмы. Более подробное обсуждение этого подхода с обоснованием его выбора хотелось бы увидеть в тексте работы.

2. Из текста диссертации не ясна роль ионов в описываемых релаксационных процессах. В большинстве расчетов используются неподвижные ионы или ионы с модельной массой (почти в 20 раз меньше реальной). Это может быть оправдано, если релаксационные процессы определяются только электрон-электронным взаимодействием, в то время как электрон-ионная релаксация зависит от массы ионов. Было бы полезно провести хотя бы несколько расчетов с реальным соотношением масс (или другими модельными соотношениями), чтобы доказать возможность использования перенормировки в конечных результатах.
3. В диссертационной работе описываются тонкие процессы релаксации температуры электронов. Вероятно стоило бы оценить характерные потери энергии, затрачиваемые на возможное излучение исследуемой плазмы.
4. В третьей главе при описании процесса формирования двойного слоя рассматривается квазинейтральная плазма, граничащая с нейтральным металлом. Не ясно как такая ситуация может быть реализована в эксперименте, где плазма создается, как правило, за счет эмиссии электронов с металлической поверхности, что приводит как к заряду поверхности металла, так и отсутствию нейтральности в приповерхностной плазме.
5. Есть ряд замечаний по оформлению диссертационной работы, связанных с встречающимися в тексте опечатками (например, стр. 6 Введения и в автореферате единицы измерения интенсивности лазерного излучения приводятся как Вт/см<sup>3</sup>, вместо Вт/см<sup>2</sup>; стр. 70 «которое оказывается неприменимым работать при», стр. 71 «схоластичности системы» и т.д.), неточностями (на стр. 141 указывается, что «времена установления распределений электронов внутри ячейки примерно соответствуют описанным в таблице 3.2», однако там эти данные не приведены. На стр. 154 при обсуждении Рис. 3.16 написано, «излом кривой при  $t = 1.5$  пс...», а рисунок показан только до 1.2 пс и т. д.), а также неудачным расположением рисунков значительно ниже текста, где они обсуждаются (иногда даже в других разделах как Рис. 2.3).

Отмеченные недостатки не умаляют достоинств диссертационной работы, оценивая которую в целом, следует отметить, что она выполнена на высоком научном уровне и демонстрирует определяющий личный вклад соискателя в разработку обсуждаемых проблем. Полученные результаты, относящиеся к теме диссертации, опубликованы в 27 статьях в ведущих мировых рецензируемых журналах, докладывались

автором лично на многих российских и международных конференциях и известны научной общественности.

Автореферат полностью отражает содержание диссертации.

Таким образом, диссертация Морозова Игоря Владимировича «Столкновительные и релаксационные процессы в неидеальной электрон-ионной плазме», представленная на соискание ученой степени доктора физико-математических наук является научно-квалификационной работой, в которой на основании выполненных автором исследований разработаны теоретические положения, совокупность которых можно квалифицировать как научное достижение в области физики плазмы, позволяющее значительно улучшить описание неидеальной плазмы, что соответствует требованиям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации № 842 от 24.09.2013 г., ред. 01.10.2018 г., предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени доктора физико-математических наук, а ее автор заслуживает присуждения искомой ученой степени по специальности 1.3.9 - физика плазмы.

Я, Брантов Андрей Владимирович, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой диссертации Морозова Игоря Владимировича, и их дальнейшую обработку.

Официальный оппонент:

Доктор физико-математических наук по специальности 01.04.21 – лазерная физика, ведущий научный сотрудник Сектора лазерно-плазменной физики высоких энергий Отдела квантовой радиофизики Федерального государственного бюджетного учреждения науки Физического института им. П. Н. Лебедева Российской академии наук

Адрес: 119991, ГСП-1, г. Москва, Ленинский проспект, д. 53

Тел. +7 (499) 132-69-06, веб сайт: <https://www.lebedev.ru>, e-mail: [brantovav@lebedev.ru](mailto:brantovav@lebedev.ru)

5 декабря 2022 г.



Брантов Андрей Владимирович

Подпись Брантова А.В. заверяю:  
Ученый секретарь ФИАН, к.ф.-м.н.  
(499) 132-62-06 [scilpi@mail.ru](mailto:scilpi@mail.ru)



Колобов Андрей Владимирович