

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Парамонова Михаила Анатольевича «Исследование термодинамических свойств плотной плазмы W, Mo и Zr методом квантовой молекулярной динамики», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – «Физика плазмы».

Диссертация Парамонова Михаила Анатольевича рассматривает применение метода функционала плотности с целью получения новых данных о термодинамических свойствах вольфрама, молибдена и циркония при высоких температурах, что является актуальной темой в физике плазмы. Задача получения точных согласованных данных о теплофизических свойствах веществ в широком диапазоне температур и давлений, в том числе в околокритической области, стала привлекать особенное внимание с момента появления надежных численных методов решения уравнений механики сплошной среды. За прошедшие полвека произошел впечатляющий рост доступных вычислительных ресурсов и заметный прогресс в методах численного моделирования. К настоящему времени моделирование воздействия мощных потоков энергии на вещество в трехмерной геометрии является уже привычным. Развитие моделей теплофизических свойств за то же время оказалось значительно более скромным. Это связано, в первую очередь, с недостатком экспериментальных и первопринципных расчетных данных при высоких давлениях и температурах, которые необходимы для разработки подобных моделей, а в случае с металлами еще и с необходимостью учета влияния сильных электронных корреляций. В диссертации Парамонова М.А. убедительно продемонстрировано, что метод квантовой молекулярной динамики (КМД) может с успехом применяться для расчетов теплофизических свойств тугоплавких металлов, в том числе в условиях, недоступных для эксперимента.

Автором диссертации получен ряд новых результатов. Так, Михаилом Анатольевичем были вычислены скорость звука, теплоемкость и коэффициент Грюнайзена в различных точках фазовой диаграммы исследуемых металлов. Следует отметить впервые выполненную автором теоретическую интерпретацию всех типов ударно-волновых и импульсных экспериментов для W, Mo и Zr методом КМД; этот результат подтверждает принципиальную возможность использования численного моделирования как замену дорогостоящим опытам с ударными волнами и импульсным нагревом металлов. Интересные результаты получены и в ходе оценки параметров критических точек вольфрама, молибдена и циркония методом последовательного приближения к критической изотерме. Возможность прямого расчета теплофизических свойств жидкости и плотной плазмы металлов создает перспективу для уточнения существующих и построения новых широкодиапазонных моделей уравнений состояния.

По автореферату диссертации имеются следующие замечания/вопросы:

1. Из текста автореферата остается неясен ответ на вопрос, возможно ли в ходе квантового молекулярно-динамического расчета достоверно определить, что моделируемое состояние является метастабильным, и, таким образом, обозначить границы метастабильной области на фазовой диаграмме.
2. Почему точность рассчитанных критических параметров вольфрама примерно в 2 раза хуже, чем для молибдена и циркония?

Данные замечания не снижают положительной оценки представленной работы. Результаты диссертации опубликованы в рецензируемых журналах, индексируемых в Scopus/Web of Science (6 статей) и прошли апробацию на многочисленных международных и всероссийских конференциях. Автореферат написан грамотным и ясным научным языком, а диссертационная работа выполнена на высоком научном уровне.

По объему проведенной работы, актуальности тематики, научной новизне и практической значимости результатов диссертационная работа Парамонова М. А. удовлетворяет критериям, установленным п.9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства РФ № 842 от 24.09.2013 г. (ред. 07.06.2021 г.), а сам диссертант заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – «Физика плазмы».

Согласен на включение персональных данных в документы, связанные с работой диссертационного совета, и их дальнейшую обработку.

Кандидат физико-математических наук,
Ведущий научный сотрудник отдела математического моделирования №174
Федерального государственного унитарного предприятия «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики имени Н. Л. Духова» (ФГУП «ВНИИА»)

Жаховский Василий Викторович
тел. +7-964-799-8254
basi1z@gmail.com

В.В. Жаховский (Жаховский В.В.)

Подпись к.ф.-м.н. Жаховского В.В. заверяю:

Личную подпись
г. Жаховского В.В.
Заверяю. Нач. канцелярии
ФГУП «ВНИИА» *Слонов* **К.С. Слонов**

Федеральное государственное унитарное предприятие «Всероссийский научно-исследовательский институт автоматики имени Н. Л. Духова»

127030, г. Москва, ул. Сущевская, д. 22

(499) 978-7803

vniia@vniia.ru