

ОТЗЫВ

официального оппонента **Губина Сергея Александровича**

на диссертационную работу **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 М.А. посвящена исследованию теплофизических свойств плазмы тугоплавких металлов вольфрама, молибдена и циркония первопринципным методом квантовой молекулярной динамики (КМД). Несмотря на большую практическую значимость этих металлов для промышленности, имеется существенная неопределенность в теплофизических свойствах плотной плазмы W, Mo и Zr, которую экспериментальные методы не могут восполнить. Поэтому КМД моделирование оказывается наиболее эффективным инструментом для прогнозирования теплофизических свойств плотной плазмы этих металлов.

Применение метода КМД, основанного на теории функционала плотности в псевдопотенциальном приближении, позволяет лучше понять сложное поведение металлов, обусловленное особенностями строения электронной подсистемы, исследовать структурные изменения на атомарном уровне при различных температурах и давлениях.

Актуальность. Исследуемые металлы являются важными конструкционными материалами атомной промышленности. Исследование высокотемпературных термодинамических свойств материалов атомной энергетики важно для развития и совершенствования ядерных технологий, повышения их безопасности и эффективности.

Цель работы состояла в применении метода КМД для получения надежных данных о теплофизических свойствах тугоплавких металлов при высоких температурах в окрестности границы двухфазной области жидкость-газ вплоть до критической точки.

Новизна. Расчеты по методу квантовой молекулярной-динамики позволили:

а) интерпретировать эксперименты по изобарическому расширению для W, Mo и Zr и эксперименты по изоэнтропическому расширению ударно-сжатых сплошных и пористых образцов W и Mo;

б) рассчитать удельную энтальпию вдоль изобары нормального давления для W, Mo и Zr;

в) восстановить зависимости изобарной и изохорной теплоемкостей, параметра Грюнайзена и скорости звука от температуры и плотности для Mo и Zr;

г) оценить критические параметры для W, Mo и Zr без привлечения экспериментальных данных.

Диссертационная работа изложена на 138 страницах машинописного текста и состоит из списка сокращений и обозначений, введения, 3-х глав, заключения, приложения и списка литературы, включающего 270 наименований.

Во введении диссертационной работы обсуждается актуальность, научная новизна и практическая значимость задач, решаемых в диссертации.

Первая глава содержит обзор методов первопринципного моделирования термодинамических свойств веществ. Поясняется метод КМД, который учитывает изменение электронной структуры атомов в зависимости от их окружения.

Рассматриваются экспериментальные методы изучения термодинамических свойств кристаллов и плотной плазмы: статические, ударно-волновые эксперименты и опыты с электрическим взрывом проводников. Из обзора экспериментальных методов определения параметров критической точки металлов следует, что для большинства жидких металлов нахождение критических параметров пока недоступно. Обсуждаются теоретические подходы к оценке параметров критических точек металлов.

Во второй главе рассматриваются методы интерпретации динамических экспериментов и оценки критических параметров: метод расчета ударных адиабат, три различных метода расчета изоэнтроп: подход Ферми–Зельдовича, метод повторных ударных адиабат и прямой метод восстановления изоэнтропы на основе двухфазной термодинамической модели.

Методом последовательного приближения к критической изотерме оценивались критические параметры для W, Mo и Zr с применением аппроксимации полиномами расчетных данных КМД и минимизацией вычислительной погрешности расчетных точек методом Монте-Карло.

В третьей главе приводятся и обсуждаются результаты моделирования термодинамических свойств плотной плазмы тугоплавких металлов W, Mo и Zr методом КМД в диапазоне: плавление – критическая точка. Для каждого металла описывается и объясняется выбор параметров моделирования.

Проводится интерпретация ударно-волновых экспериментов для сплошных и пористых образцов W и Mo.

Рассчитываются температурные зависимости энтальпии вдоль изобар нормального давления в окрестности точки плавления для трех металлов. Методом

последовательного приближения к критической изотерме оцениваются критические параметры для W, Mo и Zr.

На основе аппроксимаций первопринципных КМД расчетов находятся критические изобары металлов и оцениваются положения кривых сосуществования жидкость – газ на фазовых диаграммах W, Mo и Zr.

В заключительной части главы на основе данных КМД рассчитываются термодинамические коэффициенты (вторые производные термодинамического потенциала) во всем диапазоне температур и плотностей от плавления до критической точки для Mo и Zr. Результаты расчетов сопоставляются с экспериментальными данными и теоретическими оценками и обсуждаются.

Выводы отражают основное содержание работы. **Приложение А** содержит таблицы: оценки критических параметров W, Mo и Zr из различных работ и тесты сходимости КМД-расчетов по числу k-точек, числу атомов и т.д.

Особое внимание в диссертации направлено на обсуждение точности расчетов КМД. Показано, что вычислительная погрешность расчетного среднего давления составляет менее 2 кбар вблизи кривой плавления и еще меньше при более низких плотностях при выборе длины траектории от 3000 до 5000 шагов.

Для минимизации вычислительной ошибки при оценке критических параметров тугоплавких металлов выполнялось моделирование по методу Монте-Карло для каждой расчетной точки КМД.

Для уменьшения вычислительных ошибок в расчете изобар использовались соотношения, полученные при аппроксимации полиномиального сглаживания изохор и изотерм.

Замечания к диссертационной работе Парамонова М.А.

1. Шаг интегрирования - 2 фс, используемый в расчетах, может оказаться слишком большим для адекватного описания молекулярных и атомных колебаний. В обычном МД моделировании рекомендуется применять шаг 0.1фс.
2. В диссертации указывается важность и необходимость учета в расчетах КМД теплового возбуждения электронов. Однако, сравнения расчетов параметров жидкой плазмы тугоплавких металлов с возбуждениями электронов с расчетами без электронного возбуждения нет.
3. Для определения расчетных областей и точности расчетов КМД проведены расчеты с разными потенциалами и обменно-корреляционными функционалами (для W, Zr – GGA-PBE, LDA-CA; для Mo – дополнительно рассмотрен функционал AM05; видны небольшие различия в результатах

моделирования). Однако, точность КМД находится из сопоставления с полноразмерными расчетами, которые не проводились.

4. Во введении отмечается, что особое значение имеет точное знание параметров, при которых происходит фазовый переход в рассматриваемой системе, такой как изменение типа кристаллической решетки, плавление или испарение. Однако, плавление металлов не рассчитывалось, а в расчете испарения не учитывалась теплота испарения.
5. Ошибок и опечаток в диссертации мало, но они есть. Так в подписи к рис. 3.23 указана штрихпунктирная линия, которой нет на этом рисунке.

Сделанные замечания носят рекомендательный характер и не снижают высокую оценку диссертации Парамонова М.А. Все результаты, полученные в работе, являются **новыми** и опубликованы в виде 6 статей в рецензируемых журналах из списка ВАК (из них 5 статей – в высокорейтинговых зарубежных научных журналах). Основные результаты диссертации прошли **апробацию** на конференциях, семинарах и симпозиумах (всего опубликовано 18 тезисов докладов).

В целом диссертационная работа выполнена на высоком научном уровне и содержит новые результаты, которые отражены в публикациях.

Достоверность полученных результатов обоснована сравнением с имеющимися экспериментальными данными и другими теоретическими моделями. Помимо этого, в работе приведены значения расчетных параметров и подробно описана методика расчетов, в связи с чем обоснованность, выдвигаемых автором научных положений и выводов не вызывает сомнений.

Тема диссертации соответствует научной специальности 1.3.9 – физика плазмы. Автореферат соответствует содержанию диссертации

Диссертация Парамонова М.А. представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013 г. (ред. 07.06.2021 г.), а её автор **Парамонов М.А.**, заслуживает присвоения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – «Физика плазмы» за решение научной задачи определения теплофизических свойств плотной плазмы тугоплавких металлов W, Mo и Zr в широком диапазоне температур, включая область критических точек на основе первопринципного метода квантовой молекулярной динамики.

Отзыв составил заведующий кафедрой Химической физики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования

«Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», д.ф.-м.н., профессор Губин Сергей Александрович.

115409, г. Москва, Каширское шоссе, д. 31, тел.: +7 (495) 788 56 99, e-mail: sagubin@mephi.ru.

Диссертация Парамонова М.А. и отзыв на нее обсуждены и одобрены на заседании научного семинара кафедры Химической физики Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ» 19 сентября 2023 г.


Официальный оппонент,
зав. кафедрой Химической физики
НИЯУ МИФИ,
д.ф.-м.н., профессор



Губин С.А.

Подпись Губина Сергея Александровича заверяю.

Подпись заверяю
ДИРЕКТОР ПО ПЕРСОНАЛУ
НИЯУ МИФИ
Л. В. Васильченко



115409, г. Москва, Каширское шоссе, д. 31 тел.: +7 (495) 788 56 99, e-mail: info@mephi.ru

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ».



Подпись удостоверяю
Заместитель начальника отдела
документационного обеспечения
НИЯУ МИФИ

В.М. Самородов