

ОТЗЫВ

официального оппонента **Николаева Дмитрия Николаевича**

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».

В диссертации Парамонова М. А. была рассмотрена актуальная и важная проблема определения теплофизических свойств металлов в области жидкой фазы и плазмы. С одной стороны, область прецизионных измерений термических и калорических свойств в статических экспериментах ограничена температурой около 2500 К. С другой стороны, теоретическое исследование систем частиц с сильным взаимодействием и вырождением также сталкивается с серьезными трудностями. Поэтому в диссертации были рассмотрены различные эффективные подходы численного моделирования, основанные на теории функционала плотности, для расчета термодинамических свойств различных веществ. В работе выполнена интерпретация ударно-волновых экспериментов и экспериментов по изобарическому расширению, рассчитаны зависимости удельной энтальпии от температуры, получены оценки критических параметров и рассчитаны производные термодинамического потенциала для ряда тугоплавких металлов с использованием результатов моделирования методом квантовой молекулярной динамики (КМД). Тем самым, автором предлагаемого исследования использованы современные теоретические подходы к описанию теплофизических свойств веществ без привлечения эмпирических данных в условиях экстремальных состояний.

Актуальность. В настоящее время существует ограниченное количество экспериментальных данных о термодинамических свойствах плотной плазмы тугоплавких металлов. Между тем знание таких свойств материалов, используемых в атомной энергетике при высоких температурах, крайне важно для оценки безопасности и эффективности атомных реакторов, включая анализ возможных критических ситуаций, предсказание потенциальных аварий и их последствий. Однако в экспериментах по изоэнтропическому расширению редко измеряется температура, а интерпретация экспериментов по изобарическому расширению часто затруднена из-за сложных сопутствующих физических явлений, что может объяснить расхождение в экспериментальных данных различных авторов.

Метод квантовой молекулярной динамики предоставляет возможность заполнить этот пробел и получить более полное понимание поведения этих материалов в экстремальных условиях.

Научная новизна. В диссертации получен ряд новых результатов, из которых можно выделить следующие. Во-первых, в работе убедительно продемонстрирована возможность расчетного описания всей совокупности ударно-волновых экспериментов для вольфрама и молибдена без привлечения эмпирических зависимостей. В общем случае, полученные моделированием закономерности позволяют с высокой точностью предсказывать ударные адиабаты и изоэнтропы веществ, для которых наблюдается недостаток или полное отсутствие экспериментальных данных. Во-вторых, представлен и реализован метод оценки критических параметров и их погрешностей последовательным приближением сверхкритическими изотермами на основе результатов квантовых молекулярно-динамических расчетов для трех металлов. В-третьих, получены новые данные по удельной энтальпии вдоль изобар нормального и критического давления для вольфрама, молибдена и циркония, также получены зависимости изобарной и изохорной теплоемкостей, параметра Грюнайзена и скорости звука от температуры и плотности для молибдена и циркония.

Объем и структура работы. Диссертационная работа состоит из 3 глав, в конце каждой главы приведены выводы и список литературных источников, в которых опубликованы материалы главы. Содержание работы выглядит следующим образом.

Введение диссертационной работы посвящено актуальности, цели и научной новизне данной диссертационной работы.

В первой главе приведен краткий обзор существующих на сегодняшний день экспериментальных, теоретических и численных методов, которые привлекаются для расчетов теплофизических свойств веществ. Рассмотрен метод квантовой молекулярной динамики и проведен обзор подходов для теоретической интерпретации экспериментальных данных по ударно-волновому сжатию и расширению, по изобарическому расширению, а также обзор подходов по оценке критических параметров.

Вторая глава диссертации посвящена анализу методологии для построения ударных адиабат; рассмотрено три различных подхода к восстановлению изоэнтроп разгрузки, а также изложена методика оценки параметров критической точки, базирующаяся на вычислениях методом КМД.

В третьей главе диссертации представлено детальное описание результатов численного моделирования термодинамических свойств высокотемпературной плазмы тугоплавких металлов: вольфрама, молибдена и циркония. Моделирование проводилось с использованием метода КМД и охватывает широкий диапазон параметров, начиная с области плавления и заканчивая критической областью рассматриваемых металлов.

В первую очередь в этой обсуждаются детали выбора расчетных параметров, используемых в моделировании для каждого из указанных металлов. Затем представлена интерпретация ударно-волновых экспериментов с использованием сплошных и пористых образцов вольфрама и молибдена. Далее автором приводятся графики зависимости энтальпии от температуры при постоянном давлении вблизи точки плавления для всех трех металлов.

В следующей части главы используется метод последовательного приближения сверхкритическими изотермами для оценки критических параметров (температуры, плотности, давления и фактора сжимаемости) для вольфрама, молибдена и циркония.

В заключительной части этой главы на основе рассчитанных изохорических зависимостей проводится расчет термодинамических коэффициентов (вторых производных термодинамического потенциала) в широком диапазоне температур и плотностей, начиная с точки плавления и заканчивая критической точкой для молибдена и циркония. Для всех полученных результатов представлено сравнение с доступными экспериментальными данными и теоретическими оценками.

В диссертации Парамонова М.А. получены важные теоретические результаты, однако она не лишена недостатков, которые можно сформулировать в виде следующих замечаний.

1. В диссертации недостаточно раскрыта взаимосвязь между «плазмой», фигурирующей в названии работы, и расчетами методом КМД для металлов в жидком состоянии.
2. В главах 3.1.1, 3.2.1 и 3.3.1 диссертации используется параметр «к-точка» для зоны Бриллюэна, но в первой главе, где обсуждаются теоретические основы работы, это понятие не объясняется.
3. В главах 3.1.2 и 3.2.2 с интерпретацией ударно-волновых экспериментов следовало бы пояснить причину возникновения «загиба» на кривых изоэнтропического расширения по уравнению состояния Ломоносова и для экспериментальных

данных при, предположительно, переходе в двухфазную область жидкость-газ. А также дать более подробное объяснение отсутствия «загиба» на рассчитанных автором изоэнтропах.

4. Автор не объясняет в работе с чем связано значительное расхождение по температуре результатов описания ударно-волновых экспериментов методом КМД и с помощью УРС Ломоносова.
5. Из текста диссертации остается неясным ответ на вопрос: можно ли из КМД расчета получить кривую кипения и насколько ее положение будет отличаться от критической изобары?

Мое мнение состоит в том, что обозначенные замечания ни в коей мере не снижают общей положительной оценки диссертационной работы Пармонова М.А.

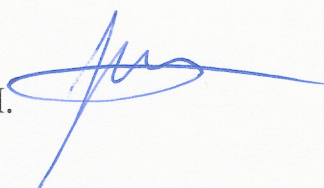
В диссертационной работе соискателя, Михаила Анатольевича, получен ряд результатов, важных как с точки зрения фундаментальной науки, так и для прикладного использования. Автор диссертационной работы заслуживает высокой оценки за развитие теоретических подходов по исследованию термодинамических свойств жидких металлов с использованием квантовой молекулярной динамики, включая предложенный метод оценки критических параметров. Предложенные и реализованные автором методики позволили выполнить ряд уникальных исследований свойств металлов в экстремальных состояниях.

Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации. Результаты диссертационной работы получены лично автором и опубликованы в шести статьях в рекомендованных ВАК ведущих зарубежных журналах, а также многократно докладывались на российских и международных конференциях.

Можно с уверенностью констатировать, что диссертация Пармонова 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 ее автор, Пармонов Михаил Анатольевич, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

Заведующий лабораторией,

ФИЦ ПХФ и МХ РАН, к.ф.-м.н. Николаев Д.Н.



142432, Московская область, г. Черноголовка, г.о. Черноголовка, Проспект академика Семенова, 1, тел: +7 (49652) 2-13-93, www.icp.ac.ru, e-mail: nik@fcp.ac.ru

Подпись Николаева Дмитрия Николаевича заверяю:
ученый секретарь ФИЦ ПХФ и МХ РАН,

д.х.н.



Психа Б.Л.

142432, Московская область, г. Черноголовка, г.о. Черноголовка, Проспект академика Семенова, 1, тел.: +7(49652) 2-19-32, e-mail: psi@icp.ac.ru.
Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии Российской академии наук, 142432, Московская область, г. Черноголовка, г.о. Черноголовка, Проспект академика Семенова, 1, тел: +7 (49652) 244-74, www.icp.ac.ru, e-mail: office@icp.ac.ru