

УТВЕРЖДАЮ



Директор ИФВД им. Л.Ф. Верещагина РАН

Академик РАН

В.В. Бражкин

«20» ноября 2023 г.

М.П.

ОТЗЫВ

ведущей организации,

Федерального государственного бюджетного учреждения науки

Института физики высоких давлений им. Л. Ф. Верещагина РАН

на диссертационную работу Парамонова Михаила Анатольевича

«Исследование термодинамических свойств плотной плазмы W, Mo и Zr методом квантовой молекулярной динамики» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

Общая характеристика диссертации

Диссертационная работа изложена на 139 страницах машинописного текста и состоит из списка сокращений и обозначений, введения, трех глав, заключения, приложения и списка литературы, включающего 272 цитируемых источника. Диссертация включает 42 рисунка и 5 таблиц.

Актуальность работы. Диссертация Парамонова Михаила Анатольевича посвящена исследованию задачи, важной как для фундаментальной науки, так и для практических приложений – численному моделированию термодинамических свойств W, Mo и Zr при высоких температурах в окрестности границы двухфазной области жидкость-газ и критической точки.

Знание высокотемпературных термодинамических свойств конструкционных материалов ядерной энергетики имеет критическое значение для обеспечения безопасности и эффективности атомных реакторов. При работе атомных реакторов высокие температуры могут вызвать сложные физические и химические процессы, которые могут повлиять на работоспособность и надежность реактора и привести к негативным последствиям. Исследование поведения материалов в

окрестности фазовых переходов, а также в экстремальных условиях позволяет разрабатывать меры обеспечения безопасности, оптимизировать процессы внутри реактора для достижения максимальной эффективности и надежности, помогает планировать техническое обслуживание и замену оборудования, чтобы избежать потенциальных проблем, а также создавать точные математические модели и симуляции поведения атомных реакторов в аварийных режимах работы. В целом, глубокое понимание высокотемпературных термодинамических свойств материалов является основой для обеспечения безопасной и эффективной работы атомных реакторов, а также для разработки новых технологий и материалов в области атомной энергетики.

В данной работе представлены результаты расчетов методом квантовой молекулярной динамики, который совмещает в себе достоинства метода молекулярной динамики и теории функционала плотности. Данная модель позволяет проводить расчеты в области твердой фазы вещества, плотной плазмы вещества и в области сверхкритического состояния.

Научная новизна диссертационной работы заключается в использовании метода квантовой молекулярной динамики для анализа и определения термодинамических свойств тугоплавких металлов W, Mo и Zr. Данное исследование представляет собой неэмпирический подход к анализу таких свойств в широком диапазоне температур, включая область критических параметров, что до настоящего времени не проводилось в рамках современных научных исследований. Полученные результаты вносят значительный вклад в понимание поведения тугоплавких металлов при высоких температурах и могут быть применены в технологиях ядерных реакторов, а также в разработке новых материалов с уникальными свойствами.

Теоретическая и практическая значимость работы. Полученные результаты для плотной плазмы W, Mo и Zr, охватывающие широкий диапазон параметров, предоставляют возможность создания таблиц теплофизических свойств, которые могут быть использованы для анализа и интерпретации результатов экспериментов, а также для калибровки полуэмпирических уравнений состояния. Предложенный метод расчета параметров критической точки на основе квантового молекулярно-динамического моделирования также может быть применен для определения критических параметров различных веществ.

Результаты, полученные в диссертации, представляют существенную значимость для развития теплофизики, демонстрируя возможности квантового молекулярно-динамического моделирования термодинамических свойств веществ при высоких температурах и давлениях. Это позволяет осуществлять интерпретацию экспериментальных данных для плотной плазмы веществ, а в некоторых случаях полностью заменять эксперимент численным моделированием. Таким образом, современные подходы, основанные на функционале плотности, вносят существенный вклад в разработку широкодиапазонных моделей термодинамических свойств веществ, что убедительно продемонстрировано в диссертации.

Во введении обосновывается актуальность темы диссертационной работы, формулируются ее цели, научная новизна и практическая значимость, перечислены положения, выносимые на защиту. Указано, что все представленные в диссертации результаты, их интерпретация, выводы и заключение сформулированы автором лично, а содержание диссертации и положения, выносимые на защиту, отражают личный вклад автора в опубликованные работы по теме диссертации.

Первая глава посвящена краткому обзору метода КМД, используемого для моделирования систем частиц вещества на атомистическом уровне, обзору экспериментальных методов по изучению термодинамических свойств твердого и жидкого вещества, а также обзору имеющихся данных по определению параметров критической точки вещества.

Во второй главе автором приводится описание методов интерпретации ударно-волновых экспериментов и оценки критических параметров. В основе метода получения ударной адиабаты лежит уравнение Гюгонио, а скорость ударной волны и массовой скорости за ударно-волновым фронтом находятся с помощью законов сохранения массы и импульса. Изоэнтропы разгрузки рассчитываются тремя методами: методом повторных ударных адиабат, подходом Ферми-Зельдовича и прямым методом восстановления изоэнтропы на основе двухфазной термодинамической модели. Для оценки параметров критической точки жидкость–газ используется метод последовательного приближения к критической изотерме, на которой критическая точка – стационарная точка перегиба. Рассчитанное критическое давление используется в дальнейшем для восстановления критической изотермы и оценки местоположения кривой сосуществования жидкость–газ.

В третьей главе излагаются результаты моделирования методом КМД термодинамических свойств W, Mo и Zr при высоких температурах в

окрестности границы двухфазной области жидкость-газ вплоть до критической точки. Приводятся параметры расчетов, исследование эволюции давления во время КМД-моделирования и анализ вычислительных погрешностей для каждого металла. Далее приведены результаты интерпретации ударно-волновых экспериментов для сплошных и пористых образцов W и Mo, для которых отмечено хорошее согласие с экспериментом, но расхождение по температуре с полуэмпирическим уравнением состояния. Для трех металлов проводится интерпретация экспериментов по импульсному нагреву, а также приводятся графики зависимости удельной энтальпии от температуры. Следующим разделом главы для каждого металла является оценка параметров критической точки и кривой сосуществования жидкость-газ, результаты наглядно отражены на фазовой диаграмме. В *Приложении А* в виде таблиц приведены тесты сходимости по расчетным параметрам для металлов, а также указаны оценки критических параметров веществ из различных работ для сравнения. Наконец, по полученным табличным данным из КМД моделирования исследовано поведение производных термодинамического потенциала для Mo и Zr в области плотной плазмы, в том числе теплоемкости при постоянном давлении и объеме, параметра Грюнайзена, а также представлены данные по скорости звука в жидкости. Каждый раздел главы завершается списком опубликованных автором работ.

Выводы, приведенные автором в *заключении* диссертации, кратко излагают основные результаты, полученные автором в диссертационной работе, и находятся в соответствии с содержанием диссертации.

Замечания по диссертационной работе.

Диссертационное исследование имеет следующие недостатки:

1. На рисунках 3.21, 3.22, 3.31 автор помимо сверхкритических изотерм изобразил несколько кривых для докритических температур. Однако возможность воспроизвести в расчете «петлю Ван-дер-Ваальса» и таким образом оценить границы метастабильной области и спинодали в дальнейшем не обсуждается.
2. В диссертации много расчетов выполнено в окрестности плавления. Однако само равновесное плавление в работе не моделировалось, и температура плавления на основе КМД расчета не оценивалась. Между тем в недавно вышедших работах [Phys. Rev. B. 2020. V. 101. №. 14. P. 144108, Phys. Rev. B. 2017. V. 96. №. 22. P. 224202] было продемонстрировано, что выбор обменно-корреляционного

функционала серьезным образом влияет на воспроизведение в расчете методом функционала плотности экспериментальной температуры плавления и может давать ошибку до 10%, что относится в том числе и к используемому автором функционалу GGA-PBE. В работе этот факт не упоминается, а также не приводится анализ того, как могут измениться некоторые полученные результаты, например, скачок энтальпии и объема при плавлении, если использовать не справочную температуру плавления, а полученную в рамках той же теоретической модели.

Отмеченные недостатки не являются принципиальными и не снижают значимости полученных результатов. Все поставленные в диссертационной работе цели достигнуты и соответствуют положениям, выносимым на защиту.

Диссертационная работа Парамонова Михаила Анатольевича *«Исследование термодинамических свойств плотной плазмы W, Mo и Zr методом квантовой молекулярной динамики»* представляет собой законченное научное исследование на актуальную тему, и содержит **новые** важные результаты, которые **могут применяться для решения различных теоретических и прикладных задач физики плазмы** в следующих организациях: ФИЦ ПХФ и МХ РАН, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ», АО «ГНЦ РФ – ФЭИ», РФЯЦ-ВНИИЭФ, РФЯЦ-ВНИИТФ им. Е.И. Забабахина, ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН.

Достоверность результатов продемонстрирована путем их сравнения с экспериментальными данными и теоретическими оценками. Материалы диссертации **опубликованы** в 6 (шести) статьях в научных журналах, рекомендованных ВАК для опубликования материалов диссертационных исследований и индексируемых базой данных «Web of Science». Материалы диссертации **докладывались** на 18 (восемнадцати) всероссийских и международных конференциях, начиная с 2016 года.

Автореферат полностью соответствует содержанию диссертации.

Диссертация Парамонова М.А. была обсуждена и одобрена на семинаре ИФВД РАН под председательством академика РАН Бражкина В.В 26 октября 2023 г.

Результаты представляются достоверными и научно обоснованными, обладают научной новизной, теоретической и практической значимостью. Диссертация 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 Михаил Анатольевич, заслуживает присвоения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9– «Физика плазмы».

Отзыв составил:

Главный научный сотрудник

Д.ф.-м.н.

Рыжов Валентин Николаевич

108840, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, стр. 14, +7(495) 851-00-13,

ryzhov@hppi.troitsk.ru

Подпись Рыжова Валентина Николаевича заверяю.

Ученый секретарь ИФВД РАН

К.ф.-м.н.



Валянская Татьяна Валентиновна

108840, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, стр. 14, +7(495)851-00-16,

tval@hppi.troitsk.ru

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук (108840, г. Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, стр. 14, +7(495)851-05-82, сайт: <http://www.hppi.troitsk.ru/>, e-mail: hpp@hppi.troitsk.ru)