

## ОТЗЫВ

Официального оппонента на диссертацию Жилиева Петра Александровича «Атомистическое моделирование воздействия импульсных энергокладов на конденсированную фазу: нагрев электронов и откольное разрушение», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности-01.04.07 физика конденсированного состояния

Исследование материи в экстремальных состояниях представляет существенный научный интерес. В частности, большой интерес вызывает изучение веществ в условиях высоких давлений и температур. Наиболее высокие давления можно получить с помощью интенсивных ударных волн и ультракоротких лазерных импульсов. Однако, экспериментальное изучение свойств веществ в условиях, получающихся в ударных волнах или под воздействием ультракоротких лазерных импульсов, сопряжено с существенными трудностями. Это приводит к тому, что во многих экспериментах характеристики изучаемого вещества измеряются косвенными методами, а, значит, возникает необходимость в применении теоретических схем для интерпретации полученных данных. Поэтому в данной области физики крайне важны теоретические и компьютерные методы исследования, которые позволяют дополнить, понять и обобщить экспериментальные данные.

Работа П.А. Жилиева посвящена всестороннему изучению механизмов откольного разрушения монокристалла алюминия и расчету транспортных свойств алюминия и золота в экзотическом двухтемпературном состоянии, когда температура электронов существенно превышает температуру ионов. В работе применяются методы классической молекулярной динамики и теории функционала плотности.

Работа состоит из введения, четырех глав и заключения.

Во введении приводится краткое описание задач, рассматриваемых в работе. Обосновывается актуальность работы, и приводятся положения, выносимые на защиту.

Первая глава диссертации посвящена литературному обзору. Приводится описание методов, применявшихся при проведении исследований (метод молекулярной динамики и теория функционала плотности) и рассматривается применение этих методов к близким по тематике задачам.

Во второй главе диссертации изучаются прочностные свойства монокристалла алюминия при высокоскоростной деформации. К наиболее интересным результатам этой части работы следует отнести следующее:

- Разработана оригинальная модель откола, в которой учитывается эффект дефектной подструктуры, сгенерированной первичной волной сжатия.

- Показано, что в рамках этой модели появляется зависимость откольной прочности от скорости деформирования. Предыдущие молекулярно-динамические модели такой зависимости не давали. Рассчитанная откольная прочность монокристалла алюминия хорошо согласуется с экспериментальными данными.

Третья глава диссертации посвящена исследованию давления «горячих» электронов в двухтемпературном состоянии для гранцентрированных (ГЦК) фаз алюминия и золота. В данной главе показано, что для правильного вычисления электронного давления необходимо разделить давление электронов на два вклада, один из которых обусловлен локализованными электронами, тогда как другой - делокализованными. Предложена схема, позволяющая произвести такое разделение. На основе анализа температурного вклада в электронное давление, показано, что в случае ГЦК алюминия рост электронного давления с увеличением электронной плотности обусловлен вкладом свободных (делокализованных) электронов. В случае ГЦК золота температурный рост электронного давления связан не только со свободными электронами, но и изменением потенциала взаимодействия, вызванным увеличением электронной температуры. Этот результат является основным в этой части диссертации.

В последней главе П.А. Жилиев предлагает и апробирует метод расчета коэффициента теплопроводности в двухтемпературном состоянии. Произведена верификация метода в изотермическом случае (температура электронов равна температуре ионов) для расплава алюминия. Рассчитан двухтемпературный коэффициент теплопроводности для алюминия при ионной температуре  $T_i = 2000$  К и для золота при  $T_i = 300$  К.

Достоверность результатов и обоснованность выводов, представленных в диссертационной работе П.А. Жилиева, подтверждается проведением большого числа численных экспериментов на современных вычисленных комплексах и анализом результатов этих экспериментов, тщательной отработкой методики компьютерного исследования, а также, когда это возможно, сопоставлением своих результатов с результатами других авторов.

Новизна полученных результатов подтверждается анализом работ других авторов, а также публикацией результатов, представленных в диссертации, в рецензируемых журналах. Научная и практическая ценность состоит в разработке моделей для расчета откольной прочности и двухтемпературной теплопроводности, что приближает нас к пониманию механизмов высокоскоростной деформации и лазерной абляции.

Естественно, в работе имеются определенные недостатки:

1. Во-первых, в диссертации наблюдается некоторая небрежность, ухудшающая понимание читателем результатов работы. Например, на рис. 2.8 приведены три серии кривых, но из подписи к указанному рисунку не понятно, в чем разница между этими сериями. Это делает рисунок непонятным для читателя.
2. При описании образования полостей в алюминии, автор приходит к выводу, что критический зародыш для образования полости имеет размер порядка 1 Ангстрема. Известно, что постоянная решетки алюминия при нормальном давлении порядка 4 Ангстрем, то есть в 4 раза больше критического значения, полученного автором. Поэтому полученное значение размера критической полости требует пояснения.
3. Автор сравнивает результаты для монокристалла алюминия и кристаллов с различными видами дефектов. При этом получившиеся в численном эксперименте (P,T) точки наносятся на фазовую диаграмму. Автор приходит к выводу, что наличие дефектов изменяет поведение системы. Например, в поликристаллическом алюминии не наблюдается перегрева кристалла. В этой связи возникает вопрос о самой кривой плавления: кривая плавления была рассчитана для монокристалла или для кристалла с наличием дефектов?
4. В четвертой главе приводится описание вычисления оптических свойств и теплопроводности алюминия и золота в двухтемпературном режиме. Вычисления разбиваются на две части. В первой части автор получает ряд конфигураций частиц, а во второй - с использованием этих конфигураций производит вычисление свойств системы. При этом первая часть работы выполняется в вычислительном пакете VASP, тогда как вторая - в пакете ABINIT. В третьей главе диссертации приводится сравнение результатов пакетов VASP и ABINIT при вычислении электронного давления в золоте и алюминии. Из результатов третьей главы видно, что хотя конечные результаты давления, полученные в разных пакетах и совпадают, то ряд промежуточных

результатов (кинетическая и нелокальная компоненты электронного давления) могут отличаться. Поэтому необходимо обосновать правомерность перехода с одного пакета на другой. Требовались ли при этом какие-то дополнительные действия, например, релаксация структуры, полученной в VASP'e при начале вычислений в ABINIT'e?

Тем не менее перечисленные замечания не снижают общую высокую оценку диссертационной работы П.А. Жилиева.

Автореферат правильно отражает содержание диссертации.

Диссертация Жилиева Петра Александровича является законченным научным исследованием. Основные результаты диссертационной работы опубликованы полно и своевременно. Они докладывались на семинарах в России и за рубежом.

Диссертация выполнена на высоком научном уровне. Полученные в диссертационной работе результаты представляют большой интерес для изучения вещества в условиях высоких температур и давлений. П.А. Жилиев продемонстрировал высокую квалификацию, а выполненный им анализ численных экспериментов свидетельствует о хорошей научной эрудиции автора. Представленная диссертация удовлетворяет требованиям Положения ВАК РФ, предъявляемым к диссертациям на соискание степени кандидата физико-математических наук, а соискатель заслуживает присвоения искомой ученой степени по специальности 01.04.07 – физика конденсированного состояния

Старший научный сотрудник,  
кандидат физико-математических наук

 Фомин Ю.Д.  
29.09.2015

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт физики высоких давлений им. Л.Ф. Верещагина Российской академии наук (ИФВД РАН), лаборатория фазовых переходов в сильно коррелированных и неупорядоченных системах.

142190, г.Москва, г. Троицк, Калужское шоссе, стр. 14  
тел. +7(495)-851-05-82, e-mail: [fomin314@mail.ru](mailto:fomin314@mail.ru)

Подпись Ю.Д. Фомина заверяю:  
ученый секретарь ИФВД РАН  
кандидат физико-математических наук



Т. В. Валянская

29.09.2015

Основные публикации Ю.Д. Фомина по методу молекулярной динамики за последние пять лет

1. **Yu. D. Fomin**, V.N. Ryzhov, E.N. Tsiok and V.V. Brazhkin, *Thermodynamic properties of supercritical carbon dioxide: Widom and Frenkel lines*, Phys. Rev. E **91**, 022111 (2015).
2. Brazhkin V.V., **Fomin Yu.D.**, Ryzhov V.N., Tareyeva E.E., Tsiok E.N. *True Widom line for a square-well system* // Physical Review E, **89(4)**, 042136 (2014).
3. Dudalov D.E., **Fomin Yu.D.**, Tsiok E.N., Ryzhov V.N. *Anomalous melting scenario of the two-dimensional core-softened system* // Physical Review Letters, **112**, 157803 (2014).
4. **Fomin Yu.D.**, Ryzhov V.N. *Viscosity anomaly in core-softened liquids* // Physics Letters A, **377**, 1469-1473 (2013).
5. **Fomin Yu.D.**, Ryzhov V.N., Brazhkin V.V. *Properties of liquid iron along the melting line up to Earth-core pressures* // Journal of Physics: Condensed Matter, **25**, 285104 (2013).
6. **Fomin Yu.D.**, Ryzhov V.N. *Water-like anomalies of core-softened fluids: dependence on the trajectories in (PpT) space* // Advances in Chemical Physics, **152**, 81-100 (2013).
7. **Fomin Yu.D.**, *Molecular dynamics simulation of benzene in graphite and amorphous carbon slit pores* // Journal of Computational Chemistry, **34**, 2615-2624 (2013).
8. Brazhkin V.V., **Fomin Yu.D.**, Lyapin A.G., Ryzhov V.N., Tsiok E.N., Trachenko K. *"Liquid-gas" transition in the supercritical region: fundamental changes in the particle dynamics* // Physical Review Letters, **111**, 145901 (2013).
9. Mendonça A.C.F., Malfreyt P., Pádua A.A.H., **Fomin Yu.D.** *Novel ionic lubricants for amorphous carbon surfaces: molecular modeling of the structure and friction* // Soft matter, **44**, 10606-10616 (2013).
10. Бражкин В.В., Ляпин А.Г., Рыжов В.Н., Траченко К., **Фомин Ю.Д.**, Циок Е.Н. *Где находится область сверхкритического флюида на фазовой диаграмме?* // УФН, **182(11)**, 1137-1156 (2012).

Старший научный сотрудник  
институт физики высоких давлений РАН,  
кандидат физико-математических наук



Фомин Ю.Д.  
29.09.2015

Подпись Ю.Д. Фомина заверяю:  
ученый секретарь ИФВД РАН  
кандидат физико-математических наук



Т. В. Валянская  
29.09.2015