

ЗАКЛЮЧЕНИЕ ДИССЕРТАЦИОННОГО СОВЕТА Д 002.110.02  
НА БАЗЕ ФЕДЕРАЛЬНОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО БЮДЖЕТНОГО  
УЧРЕЖДЕНИЯ НАУКИ ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ВЫСОКИХ  
ТЕМПЕРАТУР РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК ПО ДИССЕРТАЦИИ  
НА СОИСКАНИЕ УЧЕНОЙ СТЕПЕНИ КАНДИДАТА НАУК

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 17.10.2018 протокол № 17

О присуждении Ларкину Александру Сергеевичу, гражданину Российской Федерации, ученой степени кандидата физико-математических наук.

Диссертация «Численное моделирование термодинамических свойств кулоновских систем частиц в вигнеровской формулировке квантовой механики» в виде рукописи по специальности 01.04.08 — Физика плазмы, принята к защите 27.06.2018г., протокол № 10, диссертационным советом Д 002.110.02 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук (125412, г. Москва, ул. Ижорская, д. 13, стр.2, <https://jiht.ru>, (495) 485-8345), утвержденного Приказом Министерства образования и науки Российской Федерации от 11.04.2012г. № 105/нк.

Соискатель Ларкин Александр Сергеевич 1990 года рождения, в 2014 году окончил Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)» («МФТИ»).

В 2018 году окончил очную аспирантуру Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (государственный университет)» («МФТИ»).

Диссертация выполнена в Лаборатории № 1.2.1.1 — плазменно-пылевых процессов НИЦ-1 ТЭС Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

Работает научным сотрудником Лаборатории № 1.2.1.1 – плазменно-пылевых процессов НИЦ-1 ТЭС Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук.

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник, Филинов Владимир Сергеевич, Федерального государственного бюджетного учреждения науки Объединенного института высоких температур Российской академии наук, НИЦ-1, Лаборатория №1.2.1.1.

Официальные оппоненты:

- доктор физико-математических наук, начальник лаборатории ЦТФиВМ Акционерного общества Государственного научного центра Российской Федерации Троицкого института инновационных и термоядерных исследований (142190, г. Москва, г. Троицк, ул. Пушкиных, вл. 12, тел.: (495) 841-5776, triniti.ru, e-mail - liner@triniti.ru) Петрушевич Юрий Васильевич;

- доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник сектора плазмы и лазеров Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук (142432, МО., г. Черноголовка, просп. Академика Семенова, д. 1-А, тел.: (495) 702-9317, itp.ac.ru, e-mail: office@itp.ac.ru) Петров Юрий Васильевич;

дали положительные отзывы на диссертацию.

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт спектроскопии Российской академии наук

(ИСАН), г. Москва, г. Троицк, в своем положительном заключении (утвержденном директором ИСАН д.ф.-м.н., профессором Задковым В.Н.), составленном заведующим лабораторией спектроскопии наноструктур, кандидатом физико-математических наук, профессором Лозовиком Юрием Ефремовичем (диссертационная работа Ларкина А.С. заслушана и одобрена на заседании лаборатории спектроскопии наноструктур Института спектроскопии РАН, протокол N 2, 05.09.18г.), указала, что диссертационная работа Ларкина А.С. является самостоятельным исследованием целого ряда актуальных проблем физики плазмы, квантовой статистической механики и численного моделирования. Разработанные численные методы могут быть полезны при изучении термодинамических свойств как плазменных сред, так и прочих многочастичных систем. Полученные результаты для распределений по импульсам представляют несомненный интерес как с точки зрения термодинамики, так и для вопросов кинетики реакций в плазме. Диссертация «Численное моделирование термодинамических свойств кулоновских систем частиц в вигнеровской формулировке квантовой механики» представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013г.

Результаты диссертационного исследования могут быть рекомендованы для использования в следующих организациях: ИПХФ РАН, ГНЦ РФ ТРИНИТИ, РФЯЦ-ВНИИТФ, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, МГУ им. М.В. Ломоносова, СпбГУ, МФТИ.

Соискатель имеет 9 статей, опубликованных в рецензируемых научных изданиях из списка ВАК Минобрнауки РФ:

1. Larkin A.S., Filinov V.S., Fortov V.E. *Path Integral Representation of the Wigner Function in Canonical Ensemble* // Contributions to Plasma Physics. 2016. Vol. 56. P. 187-196.

2. Larkin A.S., Filinov V.S., Fortov V.E. *Momentum distribution functions of strongly correlated systems of particles: Wigner approach and path integrals* // Journal of Physics: Conference Series. 2016. Vol. 774. P. 012146.
3. Larkin A.S., Filinov V.S. *Phase Space Path Integral Representation for Wigner Function* // Journal of Applied Mathematics and Physics. 2017. Vol. 05. P. 392-411.
4. Larkin A.S., Filinov V.S, Fortov V.E. *Solution of the sign problem in pair approximation* // Mathematica Montisnigri. 2017. Vol XXXIX. P. 30-41.
5. Larkin A.S., Filinov V.S. *Momentum distribution functions of weakly-degenerate hydrogen plasma* // Mathematica Montisnigri. 2017. Vol XL. P. 55-67.
6. Larkin A.S., Filinov V.S., Fortov V.E. *Peculiarities of momentum distribution functions of strongly correlated charged fermions* // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. 2017. Vol 51. P. 035002.
7. Larkin A.S., Filinov V.S, Fortov V.E. *Pauli blocking by effective pair pseudopotential in degenerate Fermi systems of particles* // Contributions to Plasma Physics. 2017. Vol 57. P. 506-511.
8. Larkin A.S., Filinov V.S. *Quantum tails in the momentum distribution functions of non-ideal Fermi systems* // Contributions to Plasma Physics. 2018. Vol 58. P. 107—113.
9. Filinov V.S, Larkin A.S. *Electrical conductivity of strongly correlated plasma media* // Mathematica Montisnigri. 2017. Vol XLI. P.112-122.

**На автореферат поступили отзывы:**

1. **Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова»** (профессор физического факультета, доктор физико-математических наук Бычков Владимир Львович) – отзыв положительный, с замечаниями:

- Недостаточно подробное освещение термодинамических свойств электрон-дырочной плазмы, а именно, не представлены зависимости давления и внутренней энергии от плотности и температуры.
- В работе было проведено тестирование обменного псевдопотенциала только для фермионов. Бозонный псевдопотенциал, хотя и был предложен, на практике проверен не был.

**2. Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет»** (профессор физического факультета, доктор физико-математических наук Воронцов-Вельяминов Павел Николаевич) - отзыв положительный, с замечаниями:

- Недостаточное освещение исследования сходимости разработанных численных методов в зависимости от числа частиц в расчётной ячейке, её размеров и дискретизации траектории, представляющей частицу.
- Не было проведено тестовых расчётов для проверки бозонного «обменного потенциала».

**3. Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт электрофизики Уральского отделения Российской академии наук** (Главный научный сотрудник лаборатории нелинейной динамики, доктор физико-математических наук Волков Николай Борисович) - отзыв положительный, с замечанием:

- На с. 10 не лишне было бы пояснить физический смысл функционала  $J_{a,i}[q,z(t)]$  (формула (10) автореферата).

**4. Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Национальный исследовательский университет "МЭИ"** (Заведующий главный научный сотрудник кафедры Общей Физики и Ядерного Синтеза, доктор физико-математических наук, профессор Елецкий Александр Валентинович) - отзыв положительный, с замечанием:

- Автору следовало бы продемонстрировать действие развитых им методов и

выполнить расчёты практически значимых параметров, таких как пороговые энергии и константы скоростей реакций горения, детонации и ядерного синтеза при высоких давлениях в плазменных средах.

**5. Федеральное государственное бюджетное учреждение «Институт физики высоких энергий имени А.А. Логунова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»** (Старший научный сотрудник Отдела Теоретической Физики, кандидат физико-математических наук Роголёв Роман Николаевич) - отзыв положительный, с замечанием:  
- Отсутствие ссылок на общую теорию квантования с использованием символов операторов, где конструкции типа функции Вигнера возникают естественным образом (например, Ф.А. Березин «Метод вторичного квантования»).

**6. Валенсийский политехнический университет**

(доктор физико-математических наук Ткаченко Игорь Михайлович) - отзыв положительный, с замечаниями:  
- Недостаточно подробное освещение разработанных численных методов. Не представлены (хотя бы кратко) их алгоритмы и исследования сходимости.  
- В автореферате приведены только графики функций распределения по импульсам в водородной и электрон-дырочной плазме. Прочие термодинамические величины, вычисленные в работе, здесь не представлены.

**7. Кильский университет имени Кристиана Альбрехта** (профессор Михаэль Бонитц) - отзыв положительный, с замечаниями:

- На стр. 3 утверждается, что существующие методы РМС в координатном пространстве не позволяют рассчитывать средние величины операторов, зависящих от импульса. Это неверно. Методы в координатном пространстве позволяют вычислить матрицу плотности, которая через преобразование Фурье приводит к функции Вигнера.  
- На стр. 4 утверждается, что одной из целей данной диссертационной работы

было «преодоление фермионной проблемы знака» при расчёте функции Вигнера. Однако, это не показано. В автореферате нет ни одного графика, на котором было бы показано среднее значение знака.

- Существует другой метод РИМС в координатном пространстве (РВ-РИМС), который также позволяет моделировать сильно неидеальную квантовую плазму и не имеет проблемы знака для температур вплоть до половины температуры Ферми. Это следовало бы упомянуть, а также желательно сопоставить результаты с существующими точными результатами РВ-РИМС.

- Автореферат содержит значительное количество численных результатов. К сожалению, не приводится никакой информации о точности — ни систематических ошибок разработанных аппроксимаций, ни статистических ошибок. Также неясно, сколько «бусин» [число промежуточных координат, аппроксимирующих траекторию — прим. Переводчика] было использовано в расчётах и как результаты изменяются при изменении числа «бусин». Для демонстрации точности и надёжности новых методов желательно провести тестовые расчёты и сравнить результаты с существующими результатами других методов, например, для некоторых модельных систем.

#### **Выбор официальных оппонентов обосновывается тем, что:**

- Д.ф-м.н. Петрушевич Ю.В. является известным учёным в области физики плазмы и лазерной физики, теоретического исследования и численного моделирования процессов переноса излучения в веществе, моделирования процессов кинетики и газодинамики;

1. Дракон А.В., Емельянов А.В., Еремин А.В. , Ю.В. Петрушевич, Старостин А.Н., Таран М.Д., Фортов В.Е. *Влияние квантовых эффектов на иницирование процессов воспламенения и детонации // ЖЭТФ. 2014. Т. 145. Вып. 5, С. 943.*
2. Кочетов И.В., Напартович А.П., Петрушевич Ю.В., Старостин А.Н., Таран М.Д. *Расчёт времени теплового воспламенения водородно-*

*воздушных смесей с учётом квантовых поправок // Теплофизика высоких температур. 2016. Т. 54. № 4. С. 563-568.*

3. Старостин А.Н., Грязнов В.К., Петрушевич Ю.В. *Развитие теории распределения частиц по импульсам с учётом квантовых эффектов // ЖЭТФ. 2017. Т. 152. Вып. 6(12). С.1104-1112.*

- Д.ф-м.н. Петров Ю.В. является известным учёным в области квантовой термодинамики и кинетики, физики плазмы, взаимодействия лазерного излучения с конденсированным веществом;

1. Анисимов С.И., Петров Ю.В. *Энергии диссоциации и потенциалы ионизации молекул в неидеальной водородной плазме // Письма в ЖЭТФ. 1997. Т. 65. Вып. 5. С. 397-401.*
2. Петров Ю.В., Иногамов Н.А., Мигдал К.П. *Теплопроводность и коэффициент электрон-ионного теплообмена в конденсированных средах с сильно возбужденной электронной подсистемой // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т. 97. Вып. 1. С. 24-31.*
3. Петров Ю.В., Мигдал К.П., Иногамов Н.А., Анисимов С.И. *Процессы переноса в металле с горячими электронами, возбужденными лазерным импульсом // Письма в ЖЭТФ. 2016. Т. 104. Вып. 6. С. 446-454.*

**Выбор Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Институт спектроскопии Российской академии наук» («ИСАН») в качестве ведущей организации** обусловлен тем, что «ИСАН» является многопрофильной организацией, проводящей обширные исследования, в том числе в области компьютерного моделирования сложных неидеальных квантовых систем. В лаборатории спектроскопии наноструктур проводится математическое моделирование методами молекулярной динамики, Монте-Карло, квантового Монте-Карло, квантовой молекулярной динамики, что близко к теме диссертационного исследования соискателя.

1. Voronova N.S., Elistratov A.A., Lozovik Yu.E. *Detuning-controlled internal oscillations in an exciton–polariton condensate* // Physical Review Letters. 2015. Vol. **115**. P. 186402.
2. Elistratov A.A., Lozovik Yu.E. *Coupled exciton-photon Bose condensate in path integral formalism* // Physical Review B. 2016. Vol. 93, P. 104530.
3. Elistratov A.A., Lozovik Yu.E. *Polariton Bose condensate in an open system: Ab initio approach* // Physical Review B. 2018. Vol. 97. P. 014525.

Диссертационный совет отмечает, что **на основании выполненных соискателем исследований:**

- Впервые было получено представление функции Вигнера для канонического  $(N, V, T)$ -ансамбля в виде интеграла по траекториям.
- Впервые эффекты статистики Ферми удалось учесть с помощью парного псевдопотенциала в фазовом пространстве, реализующего принцип Паули. Это позволяет в ряде случаев избежать «фермионной проблемы знака» при расчёте термодинамических свойств вырожденных систем.
- Впервые для учёта эффектов статистики Бозе-Эйнштейна был предложен парный псевдопотенциал в фазовом пространстве, реализующий эффективное притяжение тождественных бозонов.
- Были разработаны новые квантовые методы Монте-Карло, позволяющие рассчитывать для неидеальных многочастичных систем фермионов средние значения произвольных квантовых операторов, парные корреляционные функции и функции распределения по импульсам.
- Проведён анализ влияния квантовых эффектов на функции распределения по импульсам протонов и электронов в сильнонеидеальной водородной плазме с умеренным вырождением.
- Впервые исследовано влияние квантовых эффектов на функции распределения по импульсам электронов и дырок в модели электрон-

дырочной плазмы при изменении отношения отношения массы дырки к массе электрона.

**Теоретическая значимость исследования** обоснована тем, что:

- Полученное в работе представление функции Вигнера в виде интеграла по траекториям может быть полезным как для численного моделирования, так и для аналитического исследования функции Вигнера в квазиклассическом пределе и её асимптотического поведения.
- Предложенный в работе обменный псевдопотенциал позволяет в ряде случаев избежать «фермионной проблемы знака» и более эффективно исследовать сильнонеидеальные вырожденные фермионные системы.
- Учёт обменного взаимодействия бозонов и фермионов в виде псевдопотенциалов позволяет существенно сократить время расчёта по сравнению с известными методами (RPIMC, DPIMC, SPIMC, PB-PIMC) в условиях слабого и умеренного вырождения.
- В работе детально описаны численные методы SMPIMC, LAPIMC и NAPIMC, подбор технических параметров расчёта и влияние этих параметров на результат. Эта информация может быть полезной при проведении расчётов указанными методами, а также при усовершенствовании этих методов.
- В работе были рассчитаны энергия, давление и парные корреляционные функции в сильнонеидеальной водородной плазме при  $0.4 \leq \Gamma \leq 2.0$ ,  $0.3 \leq \chi_e \leq 5.0$ . Эти данные необходимы для построения уравнения состояния и изучения структуры водородной плазмы в указанной области состояний и могут быть использованы для проверки других независимых расчётов.
- В работе были исследованы равновесные функции распределения по импульсам в сильнонеидеальных двухкомпонентных кулоновских системах. Эти данные необходимы для расчёта пороговых энергий и

констант скоростей реакций в плазменных средах, что необходимо при изучении процессов горения, детонации и ядерного синтеза при высоких давлениях.

Результаты диссертационного исследования могут быть рекомендованы для использования в следующих организациях: ИПХФ РАН, ГНЦ РФ ТРИНИТИ, РФЯЦ-ВНИИТФ, ИПМ им. М.В. Келдыша РАН, ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН, МГУ им. М.В. Ломоносова, СпбГУ, МФТИ.

**Оценка достоверности результатов** исследования выявила:

- Теоретический формализм, лежащий в основе диссертационной работы, основывается на общих принципах квантовой механики и статистики и не содержит внутренних противоречий.
- Соответствие результатов тестовых расчётов формальных термодинамических свойств одночастичных систем с результатами численного решения исходных уравнений квантовой механики.
- Качественное и количественное согласие результатов расчёта энергии, давления и парных корреляционных функций в водородной плазме с результатами, полученными другими авторами.
- Качественное согласие результатов расчёта функций распределения по импульсам в водородной плазме с результатами, полученными другими авторами для слабонеидеальной плазмы методами теории возмущений.

**Личный вклад соискателя** состоит в непосредственном участии в разработке формализма и численных методов, описанных в работе, а также в выполнении расчётов методами SMPIMC и NAPIMC и интерпретации полученных данных. Апробация результатов исследования проводилась на 12 российских и международных конференциях, в которых соискатель принимал личное участие. Основные публикации по выполненной работе также подготовлены лично автором.

Диссертационным советом сделан вывод о том, что диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, соответствует критериям пункта 9, установленным Положением о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013г.

На заседании от 17.10.2018г. диссертационный совет принял решение присудить Ларкину А.С. ученую степень кандидата физико-математических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 22 человек, из них 10 докторов наук по специальности 01.04.08 – физика плазмы и 11 докторов наук по специальности 01.04.14 – теплофизика и теоретическая теплотехника, участвовавших в заседании, из 31 человека, входящих в состав совета, дополнительно введены на разовую защиту 0 человек, проголосовали: за 22, против 0, недействительных бюллетеней 0.

Зам. председателя диссертационного совета Д 002.110.02

д.ф.-м.н., профессор

Андреев Н.Е.

Ученый секретарь диссертационного совета Д 002.110.02

к.ф.-м.н.

Васильев М.М.



17.10.2018г.