

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации
Демьянова Георгия Сергеевича

«Эффективный учет дальнего действия в моделировании классических и квантовых кулоновских систем с помощью усредненного по углам потенциала Эвальда»,

представленной на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук
по специальности **1.3.9 – «Физика плазмы»**

Автореферат диссертации посвящен теоретическому и численному исследованию классических и квантовых кулоновских систем, в частности, однокомпонентной и невырожденной водородной плазмы. Основное внимание уделено корректному учету дальнего действующего кулоновского взаимодействия, построению эффективных потенциалов и псевдопотенциалов, а также расчету термодинамических и структурных свойств плазмы методами Монте-Карло и молекулярной динамики.

Тематика работы является несомненно актуальной, поскольку аккуратное описание дальнедействующих кулоновских систем важно для всех разделов физики плазмы, а также статистической физики. Наиболее последовательный учет дальнего действия достигается при использовании периодических граничных условий, при этом эффективным подходом к вычисления кулоновских сумм является так называемый метод Эвальда. К сожалению, несмотря на хорошую физическую обоснованность, этот метод остаётся весьма ресурсоёмким с вычислительной точки зрения, а рассчитанный эффективный потенциал оказывается зависящим от направления внутри базовой ячейки моделирования. В качестве эффективного пути преодоления этих трудностей диссертантом используется усреднённый по углам потенциал Эвальда. При этом им производится как существенное развитие теоретических основ этого подхода, так и его применение к численному моделированию конкретных физических систем.

В автореферате достаточно полно отражена структура диссертации, которая состоит из пяти глав. При этом последовательно рассматриваются теоретические основы описания классических и квантовых кулоновских систем, численные методы моделирования, а также результаты расчетов для однокомпонентной и водородной плазмы.

Научная новизна работы связана с разработкой и применением усредненного по углам потенциала Эвальда, позволяющего упростить учет эффектов дальнего действия при сохранении физически обоснованной постановки задачи. Существенными результатами являются получение выражений для энергии и давления, построение кулоновской высокотемпературной матрицы плотности с учетом дальнего действия и соответствующего псевдопотенциала для водородной плазмы.

Практическая значимость работы заключается в том, что она открывает возможности эффективного моделирования кулоновских систем с большим числом частиц и анализа выхода к термодинамическому пределу. В качестве дополнительного достоинства можно упомянуть реализацию программного пакета KelbgLIP, предназначенного для расчета матрицы плотности, действия, энергии и псевдопотенциалов взаимодействия двухкомпо-

нентных систем. Достоверность результатов подтверждается их сопоставлением с известными предельными случаями и ранее опубликованными данными.

Автореферат изложен последовательно, написан корректным научным языком и достаточно полно отражает содержание диссертации. Поставленные задачи, используемые методы и полученные выводы согласуются между собой. Основные результаты прошли серьёзную апробацию, т.к. были опубликованы в 20 печатных работах, включая 9 статей в ведущих рецензируемых журналах по физике плазмы, статистической и вычислительной физике.

Замечания к работе:

1. В автореферате широко используются различные аббревиатуры, при этом некоторые из них расшифровываются при первом употреблении (например, МК – метод Монте-Карло), а другие – нет (например, МД – молекулярная динамика). В то же время далеко не очевидно, что термин “молекулярная динамика” хорошо известен каждому специалисту по физике плазмы. То же самое относится и к употреблению диссертантом своеобразного научного жаргона. Например, на протяжении всего автореферата многократно используется фраза “учёт дальнего действия”, но при этом её точный смысл не всегда достаточно понятен (так как, в принципе, все рассматриваемые в работе системы являются дальнедействующими).
2. Включённые в автореферат рисунки, в принципе, очень хорошо иллюстрируют основные положения работы; однако оформление рисунков не всегда является достаточно аккуратным. В ряде случаев отсутствуют необходимые пояснения к обозначениям (например, на Рис. 10 и 11 не мешало бы пояснить, что такое r_s и r_a). По-видимому, это связано с тем, что при переносе из диссертации в автореферат были потеряны некоторые необходимые комментарии.

Все перечисленные замечания носят рекомендательный характер и не снижают общей значимости диссертационной работы. Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013г., а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

Отзыв составил
старш. научн. сотр. ИКИ РАН

Думин Юрий Викторович
20 мая 2026 г.

Федеральное государственное бюджетное
научно-исследовательское учреждение
Институт космических исследований
и географии Российской академии наук
(ИКИ РАН)

117997, г. Москва, ул. Профсоюзная, 84/32

Тел.: +7-495-333-20-88
+7-495-333-52-12 канцелярия
Факс: +7-495-333-12-48
Эл. почта: iki@cosmos.ru
Веб-сайт: iki.cosmos.ru