

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Ларкина Александра Сергеевича «Численное моделирование термодинамических свойств кулоновских систем частиц в вигнеровской формулировке квантовой механики» на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 – физика плазмы

Диссертационная работа Ларкина А.С. посвящена исследованию термодинамических свойств квантовых систем частиц в условиях, когда межчастичное взаимодействие не может рассматриваться как малое возмущение. Такая ситуация может возникать, когда вещество подвергается действию высоких давлений и температур: в недрах звёзд и планет-гигантов, сильных взрывах, экспериментах по ударному сжатию и т. д. В некоторых случаях аналогично ведут себя носители зарядов в металлах и полупроводниках.

Для исследования систем такого рода, а именно квантовых и неидеальных, в настоящее время широко применяются методы Монте-Карло, основанные на интегралах по траекториям (PIMC). Существующие методы, однако, позволяют вычислять далеко не все термодинамические свойства, так как работают только с координатным пространством. В частности, им недоступен расчёт равновесных функций распределения по импульсам. Кроме того, расчёт фермионных систем даже при умеренном вырождении методами PIMC сильно затруднён и требует значительных вычислительных ресурсов из-за «фермионной проблемы знака», связанной с необходимостью антисимметризовать матрицу плотности на каждом шаге алгоритма для учёта обменного взаимодействия.

В данной диссертационной работе разработаны методы PIMC, основанные на представлении функции Вигнера в виде интегралов по траекториям. Так как функция Вигнера имеет смысл распределения в импульсно-координатном пространстве, то проблема расчёта функций распределения по импульсам решается естественным образом.

Кроме того, при этом оказывается возможным учесть обменное взаимодействие с помощью эффективных фермионных и бозонных псевдопотенциалов, зависящих от импульсов и координат частиц. В работе выведены явные выражения для таких псевдопотенциалов в парном приближении и исследованы границы их применимости. Показано, что при умеренных вырождениях разработанные методы PIMC адекватно учитывают обменное взаимодействие и требуют значительно меньших вычислительных ресурсов, чем стандартные методы.

Наконец, в работе проведено численное моделирование некоторых термодинамических свойств водородной и электрон-дырочной плазмы. Впервые были рассчитаны функции распределения по импульсам таких систем в условиях значительной неидеальности и слабого и умеренного

вырождения. Было обнаружено нетривиальное поведение функций распределения при больших импульсах (т. н. «хвосты»), ранее предсказанное только для слабонеидеальных кулоновских систем. Несомненно, эти результаты представляют большой интерес при изучении кинетики реакций в плотной плазме.

Из недостатков работы следует отметить недостаточно подробное освещение термодинамических свойств электрон-дырочной плазмы, а именно, не представлены зависимости давления и внутренней энергии от плотности и температуры.

Кроме того, в работе было проведено тестирование обменного псевдопотенциала только для фермионов.

Бозонный псевдопотенциал, хотя и был предложен, на практике проверен не был.

Все перечисленные замечания носят рекомендательный характер и не снижают общей значимости диссертационной работы.

Считаю, что 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 Ларкин Александр Сергеевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 - физика плазмы.

Отзыв составил д. ф.-м. н., в.н.с. физического ф-та МГУ Бычков Владимир Львович

Д.ф.-м.н., в.н.с.
кафедры физической электроники
физического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова

Подпись Бычкова В.Л. заверяю

Ученый секретарь физического факультета МГУ,
профессор

Тел.: +7 495 939 31 60 , e-mail: info@physics.msu.ru



Бычков
В.Л. Бычков

Караваяев
В.А. Караваяев

Адрес: 119991, Москва, ГСП-1, ул. Ленинские горы, д. 1, стр. 2
Тел.: +7 (495) 939-38-85
e-mail: bychvl@gmail.com