

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 посвящена разработке численных методов для исследования равновесных термодинамических свойств квантовых многочастичных систем, причём особое внимание уделяется системам с кулоновским межчастичным взаимодействием. Знание свойств таких систем необходимо при изучении свойств веществ при высоких давлениях и температурах. Проведение физического эксперимента в таких условиях часто затруднено, поэтому существенную роль играет эксперимент компьютерный. Квантовый характер таких систем требует использовать для их изучения методы Монте Карло, основанные на интегралах по траекториям (методы РИМС), новые варианты которых (SMPИМС, LAPИМС и NAPИМС) и рассмотрены в диссертации.

Первым существенным недостатком существующих на данный момент методов РИМС, основанных на координатном пространстве, является принципиальная невозможность расчёта равновесных функций распределения по импульсам. В данной работе предлагается преодолеть эту трудность, комбинируя интегралы по траекториям с Вигнеровской формулировкой квантовой механики.

В диссертационной работе разработан формализм, представляющий функцию Вигнера (совместное распределение в фазовом импульско-координатном пространстве) в виде интеграла по траекториям. На его основе предложены три новых метода Монте-Карло — SMPИМС, LAPИМС и NAPИМС, позволяющих в рамках различных приближений рассчитывать функцию Вигнера неидеальных квантовых систем частиц с произвольным взаимодействием, и, следовательно, различные термодинамические свойства и функции распределения по импульсам в таких системах.



Вторым существенным недостатком методов РІМС является так называемая «фермионная проблема знака», связанная с учётом обменного взаимодействия и существенно затрудняющая моделирование вырожденных ферми-систем. В данной работе показано, что в рамках Вигнеровского формализма обменное взаимодействие как между фермионами, так и между бозонами можно учесть с помощью эффективных «обменных потенциалов», зависящих от импульсов и координат частиц. В парном приближении предлагаются явные формулы для этих фермионных и бозонных «обменных потенциалов». Показано на ряде тестовых расчётов, что фермионный парный «обменный потенциал» позволяет правильно учесть обменное взаимодействие при умеренных вырождениях, причём вычислительная сложность методов LARІМС и NARІМС оказывается значительно меньшей, чем у стандартных фермионных методов РІМС.

Разработанные в диссертационной работе численные методы (SMPІМС, LARІМС, NARІМС) были использованы для расчёта термодинамических свойств в двух кулоновских системах: водородной плазме и электронно-дырочной плазме. Было показано, что разработанные численные методы с большой точностью воспроизводят давление и энергию в таких системах, рассчитанные с помощью других методов РІМС. Кроме того, впервые были рассчитаны функции распределения по импульсам электронов, протонов и дырок в сильнонеидеальных условиях. В частности, было обнаружено нетривиальное поведение при больших импульсах распределений электронов и дырок, проявляющееся в виде немаксвелловского «хвоста». Это согласуется с предсказаниями теории возмущений для слабоидеального случая.

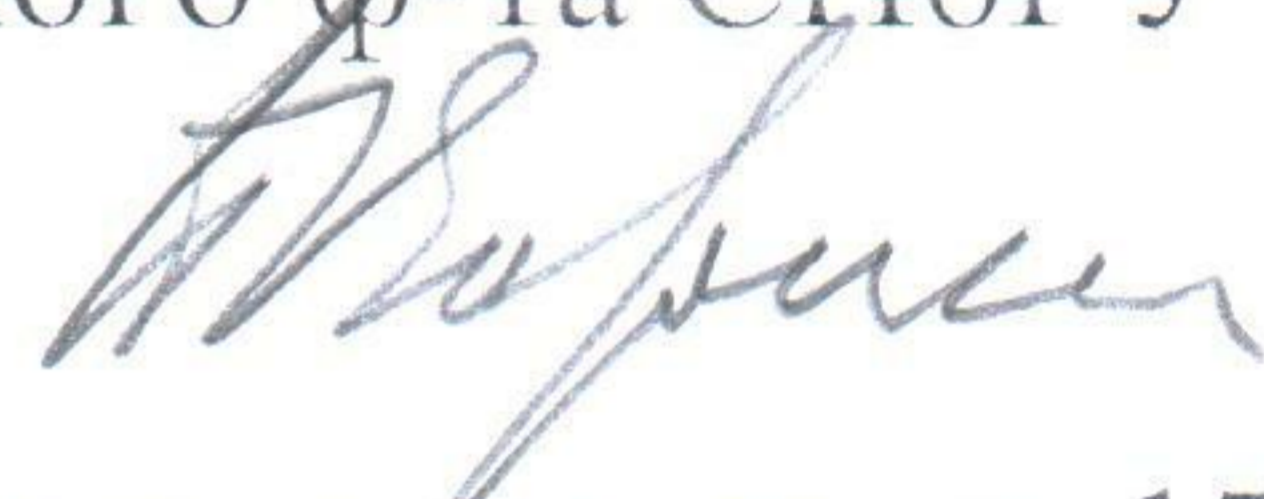
К числу недостатков работы следует отнести недостаточное освещение исследования сходимости разработанных численных методов в зависимости от числа частиц в расчётной ячейке и её размеров и дискретизации траектории, представляющей частицу. Кроме того, не было проведено тестовых расчётов для проверки бозонного «обменного потенциала»

Несмотря на указанные недостатки, судя по автореферату, представляется, что диссертация А.С. Ларкина является серьезным

исследованием в области физики плазмы. Оно выполнено на современном уровне с использованием фундаментальных принципов квантовой статистической механики. Систематически рассмотрен и решен ряд важных задач и получены новые результаты.

Считаю, что диссертация несомненно 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. профессор физического ф-та СПбГУ
Воронцов-Вельяминов Павел Николаевич



198504 г. С. Петербург, Старый Петергоф, Гостилицкое ш. д. 17,к. 2, кв.4 6 (812) 428 25 78. voron.wgroup@gmail.com

Раб. тел (812) 428 45 55

ФГБОУ ВО “Санкт-петербургский Государственный университет”

199034, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7/ 9

<https://spbu.ru>

ЛИЧНУЮ ПОДПИСЬ ЗАВЕРЯЮ

НАЧАЛЬНИК УПРАВЛЕНИЯ КАДРАМИ №3

Н.



29.09.2018

ДОКУМЕНТ
ПОДГОТОВЛЕН
ПО ЛИЧНОЙ
ИНИЦИАТИВЕ

Текст документа размещен
в открытом доступе
на сайте СПбГУ по адресу
<https://spbu.ru/science/expert.html>