



ОТЗЫВ

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

Знание термодинамических свойств квантовых кулоновских систем необходимо во многих областях физики, начиная с физики металлов и полупроводников и заканчивая астрофизикой. Исследование таких систем связано с существенными трудностями. Во-первых, эксперимент зачастую трудноосуществим в связи с необходимостью достижения чрезвычайно высоких температур и давлений. Во-вторых, хорошо разработанный теоретический аппарат на основе теории возмущений часто неприменим из-за отсутствия каких-либо параметров малости. Поэтому важную роль играет компьютерное моделирование, позволяющее проводить расчёты для неидеальных кулоновских систем, исходя из первых принципов, или альтернативные подходы, основанные на непertурбативных математических методах, например, метод моментов.

Для численного исследования термодинамических свойств неидеальных квантовых систем частиц в настоящее время широко применяются методы Монте-Карло, основанные на представлении статистической суммы в виде интеграла по траекториям в координатном пространстве. Однако они не позволяют непосредственно рассчитывать величины, зависящие от импульсов частиц. В то же время, такие величины, особенно функции распределения по импульсам, играют огромную роль в вопросах термодинамики и кинетики. Кроме того, при численном моделировании вырожденных фермионных систем возникает «проблема знака», сильно затрудняющая численный расчёт. Таким образом, разработка численных методов, позволяющих рассчитывать термодинамические свойства неидеальных квантовых кулоновских систем, и свободных от указанных недостатков, является весьма актуальной задачей.

В диссертационной работе Ларкина А.С. представлены численные методы Монте-Карло, основанные на представлении функции Вигнера канонического ансамбля в виде интегралов по траекториям. При этом проблема расчёта величин, зависящих от импульсов, решается естественным образом, так как эти методы работают в фазовом (p, q) -пространстве непосредственно. Кроме того, продемонстрирована возможность учесть обменное взаимодействие тождественных фермионов с помощью эффективных псевдопотенциалов в фазовом пространстве, что позволяет, при умеренном вырождении, преодолеть «фермионную проблему знака» и существенно ускорить расчёты.

Кроме того, в работе выполнено численное моделирование некоторых термодинамических свойств водородной и электрон-дырочной плазмы. В частности, были рассчитаны функции распределения по импульсам в случае, когда система существенно неидеальна. Было обнаружено, что асимптотическое



поведение этих функций при больших импульсах существенно отличается от идеально-газового, что было ранее предсказано для слабонеидеальных кулоновских систем методами теории возмущений. Эти результаты могут представлять значительный интерес для изучения процессов, протекающих в плазме.

Из недостатков автореферата можно отметить недостаточно подробное освещение разработанных численных методов. Не представлены (хотя бы кратко) их алгоритмы и исследования сходимости. Кроме того, в автореферате приведены только графики функций распределения по импульсам в водородной и электрон-дырочной плазме. Прочие термодинамические величины, вычисленные в работе, в автореферате не представлены.

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 учёных степеней № 842 от 24.09.2013г., а её автор, Ларкин Александр Сергеевич, заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 - физика плазмы.

Отзыв составил д. ф.-м. н., доктор honoris causa РАН, профессор департамента прикладной математики Валенсийского государственного политехнического университета Ткаченко Игорь Михайлович.

(Departament de Matemàtica Aplicada, Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales, Universitat Politècnica de València, Camino de Vera, s/n, 46022 Valencia (Spain), (+34) 659119549, imtk@mat.upv.es)

Директор высшей технической школы промышленных инженеров Валенсийского государственного политехнического университета, Гарсия-Серра Хорхе, подтверждает, что профессор Ткаченко И.М., будучи профессором кафедры прикладной математики того же университета, является членом коллектива преподавателей Школы.

(Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales, Universitat Politècnica de València, Camino de Vera, s/n, Edificio 5F, 46022 Valencia (Spain), (+34)963877171, director@etsii.upv.es)

Universitat Politècnica de València, Camino de Vera, s/n, 46022 Valencia (Spain), (+34) 96 387 90 00, informacion@upv.es