

ОТЗЫВ

официального оппонента Петрова Юрия Васильевича

на диссертационную работу 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»

В диссертации А.С. Ларкина рассматриваются термодинамические свойства кулоновских систем в условиях их вырождения и неидеальности. Исследование таких систем традиционно испытывает трудности ввиду неприменимости такого эффективного подхода, как теория возмущений из-за отсутствия необходимого малого параметра. В диссертации для учета квантового характера рассматриваемых систем и необходимости расчета в них функций координат и импульсов применен вигнеровский подход к квантовой механике с представлением основного объекта такого подхода – функции Вигнера – в виде интеграла по траекториям и использованием методов Монте-Карло для их вычисления. Такой развиваемый в диссертации подход эффективно используется в ней для решения важной задачи изучения сильно взаимодействующих кулоновских систем.

Актуальность темы. Работа, выполненная в диссертации, актуальна в силу большого количества объектов, для которых состояние плотной плазмы при высоких температурах является обычным. Это и астрофизические тела, и получаемые в условиях земных исследований экстремальные состояния вещества, например, при термоядерном синтезе или взаимодействии интенсивного лазерного излучения с веществом. В диссертационной работе рассматривается область неидеальной плазмы, где не работают методы теории возмущений, и особенно возрастает ценность разработки новых непerturbативных подходов к решению термодинамических и кинетических задач.

Краткая характеристика основного содержания диссертации. Диссертация А.С. Ларкина состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы.

Во введении к диссертации автор подчеркивает актуальность исследования свойств плазмы при высоких температурах и высоких давлениях в условиях ее неидеальности и квантового характера составляющих ее частиц, что обусловлено как важностью приложений таких исследований, так и чисто фундаментальным интересом к поведению вещества в этой области его состояний. Подчеркивается особое значение численных методов подхода к решению возникающих в этой области задач определения термодинамических свойств и кинетических характеристик плазмы ввиду неприменимости в большинстве случаев методов теории возмущений ввиду отсутствия необходимых для этого малых параметров. Здесь указывается на эффективность применения методов Монте-Карло в сочетании с интегралами по траекториям в силу квантового характера рассматриваемых систем. Для эффективного расчета характеристик плазмы, определяемых как координатами, так и импульсами, автором рассмотрен подход Вигнера к квантовой механике.

В первой главе диссертации, являющейся теоретической основой для развиваемых далее численных методов, приводится вывод представления функции Вигнера канонического ансамбля как интеграла по траекториям для систем разной статистики, как бозонных, так и фермионных. Учитывая важность класса «одноимпульсных» операторов для вычисления термодинамических величин, получено выражение для «одноимпульсной» функции Вигнера в виде Фурье-преобразования небольшой размерности от интеграла по траектории (трехмерного и даже одномерного для изотропного случая). Рассмотрены «линейное» и «гармоническое» приближения к функции Вигнера, полученные при ограничении линейными или квадратичными членами разложения потенциальной энергии в ряд по степеням разностной вигнеровской переменной без учета обменных членов. При этом многомерное преобразование Фурье по разностной переменной, сводящееся к гауссовым интегралам, выполняется явно. Для учета обменного взаимодействия введена концепция эффективного псевдопотенциала в фазовом пространстве, в парном приближении учитывающего обменный вклад как для бозонов, так и для фермионов.

Во второй главе диссертации подробно рассматривается вычисление применение алгоритма Метрополиса-Гастингса метода Монте-Карло к расчету многомерных интегралов, возникающих при переходе к дискретизированной форме интегралов по траекториям. Это сделано отдельно для разработанного в диссертации метода SMPIMC (Single Momentum Path Integral Monte Carlo), в котором используется «одноимпульсная» функция Вигнера и для методов LAPIMC (Linear Approximation Path Integral Monte Carlo) и HAPIMC (Harmonic Approximation Path Integral Monte Carlo), основанные на применении соответственно «линейного» и «гармонического» по разностной переменной приближения в функции Вигнера. Подробно пошагово рассмотрена процедура вычисления функций распределения и средних значений операторов, обсуждается введение периодических граничных условий и подбор параметров, таких, как число частиц в основной ячейке Монте-Карло, длина ячейки, число звеньев траектории при ее дискретном представлении.

В третьей главе приведены результаты выполнения тестовых расчетов по разработанным в диссертации численным методам SMPIMC (Single Momentum Path Integral Monte Carlo), LAPIMC (Linear Approximation Path Integral Monte Carlo) и HAPIMC (Harmonic Approximation Path Integral Monte Carlo). Проведено сравнение результатов расчета средней энергии от обратной температуры методом HAPIMC для одной частицы в одномерных потенциалах V_{2-4} и V_{3-4} , одномерном кулоновском потенциале с мягкой сердцевинной, трехмерном потенциале V_{2-4} . Проведено тестирование многочастичных фермионных систем на примере идеального газа фермионов со спином $1/2$, сделанное методом SMPIMC, а также проведены расчеты функции распределения для идеального газа из двух сортов фермионов с разными массами с учетом обмена методом псевдопотенциала.

В четвертой главе показаны результаты расчетов по методам SMPIMC, LAPIMC, HAPIMC в двухкомпонентных кулоновских системах. В качестве них рассмотрены сильно неидеальная водородная плазма со слабым и умеренным вырождением, а также электрон-дырочная плазма с умеренным вырождением. Для водородной плазмы получены функции распределения по импульсам электронов и протонов и парные корреляционные функции, а также вычислена внутренняя энергия и давление. Функции распределения по импульсам электронов и дырок, а также парные корреляционные функции рассчитаны в электрон-дырочной плазме.

В целом диссертация А.С. Ларкина является законченным исследованием, представляет решение актуальных задач физики сильнонеидеальной плазмы в условиях ее вырождения.

Научная новизна. В диссертации впервые функция Вигнера для канонического ансамбля представлена в виде интеграла по траекториям. Введены парные псевдопотенциалы, учитывающие принцип Паули для фермионов и эффективное притяжение для бозонов. На этой основе разработаны новые квантовые Монте-Карло-методы для нахождения средних значений квантовых операторов, парных корреляционных функций, функций распределения по импульсам неидеальных многочастичных фермионных систем. Эти методы применены для нахождения в квантовом случае функций распределения по импульсам протонов и электронов в сильнонеидеальной водородной плазме с умеренным вырождением, а также функций распределения по импульсам квазичастиц в электронно-дырочной плазме полупроводника.

Обоснованность и достоверность научных положений и выводов. Обоснованность и достоверность полученных в диссертации результатов обусловлена применением в исследовании корректных физических моделей и математического аппарата (вигнеровской трактовки квантовой механики, интегрирования по траекториям, методов Монте-Карло). Степень достоверности обеспечивается соответствием результатов тестовых расчетов формальных термодинамических свойств одночастичных систем с результатами одночастичных квантовомеханических расчетов, а также согласованием результатов, полученных в диссертации для характеристик водородной плазмы с апробированными результатами других исследований в этой области.

Теоретическая значимость работы. В работе получено представление функции Вигнера для канонического ансамбля в виде Фурье-преобразования матрицы плотности, выраженной через интегралы по траекториям. Явные выражения для функции Вигнера в виде интегралов по путям найдены в «линейном» и «гармоническом» приближениях, когда потенциальная энергия на траектории раскладывается по степеням разностной переменной с точностью до соответственно линейных и квадратичных членов и интегрирование по разностной переменной сводится к гауссовым интегралам. Предложен подход к учету обменного взаимодействия в многочастичных системах как бозонов, так и фермионов, состоящий в введении псевдопотенциалов соответственно для бозонов, учитывающий их эффективное притяжение, и для фермионов, учитывающий правило запрета Паули.

Практическая значимость работы. На основе разработанной теоретической модели, основанной на представлении функции Вигнера как интеграла по траекториям, в диссертационной работе созданы численные методы компьютерного моделирования систем фермионов в сильно неидеальных квантовых состояниях. Названный SMPIMC (Single Momentum Path Integral Monte Carlo) численный метод, основанный на использовании «одноимпульсной» функции Вигнера, может быть применен для расчета термодинамических характеристик сильнонеидеальных фермионных систем. Это и электроны в металлах, и плазма в условиях термоядерного синтеза. В диссертационной работе для метода SMPIMC создан оригинальный программный код на Фортране, позволяющий моделировать многокомпонентные системы фермионов при различных потенциалах межчастичного взаимодействия и внешних потенциальных полях. При задании в качестве входных данных размерности пространства, числа частиц каждого

сорта, их масс, потенциалов межчастичного взаимодействия и внешнего потенциала программа выдает средние значения рассматриваемых операторов, парные корреляционные функции. Также на языке Фортран написаны программы для численного моделирования термодинамических свойств неидеальных квантовых систем как фермионов, так и бозонов, основанные на «линейном» (метод, названный LAPIMC – Linear Approximation Path Integral Monte Carlo) и «гармоническом» (метод HAPIMC – Harmonic Approximation Path Integral Monte Carlo) приближениях функции Вигнера, которые также позволяют получать средние значения операторов, парные корреляционные функции, а также функции распределения по импульсам. Такие отлаженные, удобные в работе программы, хорошо протестированные, в том числе сравнением результатов расчетов по ним с другими квантомеханическими расчетами, имеют большое практическое значение. Они могут быть использованы научными группами, занимающимися исследованием теплофизических свойств вещества в экстремальном состоянии – в ОИВТ РАН, ФИАН, ИПХФ РАН, ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН.

Апробация работы. Полученные в диссертационной работе результаты были представлены в форме докладов на всероссийских и международных конференциях (в РФ – в Москве, Звенигороде, Махачкале, Эльбрусе), а также за рубежом - в Казахстане (Алматы), Германии (Киль), США (Чикаго). Эти конференции являются ведущими в области физики экстремального состояния вещества и неидеальной плазмы, и поэтому представление результатов работы на них служит свидетельством ее высокого уровня.

Публикации. Результаты диссертационной работы опубликованы в 9 статьях в престижных рецензируемых журналах с квартилями Q3-Q2, рекомендованных ВАК, что подтверждает ее высокий научный уровень. Кроме того, они представлены в тезисах и трудах всероссийских и международных конференций, на которых они докладывались.

Личный вклад автора. Вклад автора в выполнение диссертационной работы является определяющим. Им лично выполнено представление функции Вигнера в виде интеграла по траекториям, являющееся теоретической основой для развиваемых численных методов, так же, как и использование «одноимпульсной» функции Вигнера, существенно упрощающей вычисления. При большом непосредственном участии автора были разработаны «линейное» и «гармоническое» приближения для функции Вигнера и получены эффективные обменные псевдопотенциалы в фазовом пространстве. Большинство численных методов, реализующих предложенный в диссертации подход на основе вигнеровской трактовки квантовой механики, были разработаны автором лично. Им же проведены расчеты, результаты которых изложены в диссертации.

Замечания. Автор применяет развиваемый в диссертации подход к термодинамическим свойствам водородной плазмы. Хотелось бы, чтобы этот подход был использован применительно к другому, не менее важному объекту – жидким металлам при высоких температурах. Это очень важно при изучении взаимодействия интенсивного лазерного излучения ультракороткой длительности с конденсированным веществом, и в применении к т.н. простым металлам с тепловым возбуждением только s- и p-электронов может быть прямо рассмотрено изложенными в диссертации методами. Сравнение же с уже имеющимися результатами экспериментальных и теоретических исследований в некоторой области плотностей и температур позволило бы и с этой стороны протестировать применяемые в диссертации подходы.

Некоторые замечания следует сделать в отношении текста диссертации. При хорошем ясном стиле изложения можно сделать следующие чисто технические замечания:

- 1) на стр. 12, в отличие от всех других случаев, где она тоже выписывается, не совсем правильно написана длина волны Де Бройля
- 2) на странице 17 впервые появляется буква d , но нигде, и далее тоже, не указывается, что это размерность пространства, тем более, что она часто появляется как первый сомножитель и может вызывать ассоциации с дифференциалом
- 3) на стр. 24 одной и той же буквой m обозначены как номер координаты в (1.18), так и масса частицы в (1.19)
- 4) на стр. 25 в формуле (1.25) в первой ее строке перед вторым интегралом вместо знака «-» поставлен знак «+».
- 5) на стр. 38 в формуле (1.60) поставлен лишний минус
- 6) на стр. 43 бозонный обменный псевдопотенциал получается не из (1.1), как сказано в тексте, а из (1.75)
- 7) на стр. 76 в формуле (3.2) написаны параметры a , c вместо не совпадающих с ними таких же параметров с надчеркиванием.

И встречаются чисто грамматические опечатки, начиная со стр. 15 («в отличие метода DPIMC» вместо «в отличие от метода DPIMC» и, например, «преобразованием» вместо «преобразование» (стр. 93), «распределением» вместо «распределению» (стр. 105) и т.д.

Указанные замечания несколько не снижают высокого уровня диссертации и значимости полученных в ней результатов.

Общее заключение. Диссертационная работа Ларкина Александра Сергеевича «Численное моделирование термодинамических свойств кулоновских систем частиц в вигнеровской формулировке квантовой механики» удовлетворяет всем требованиям ВАК и Положения о порядке присуждения ученых степеней, предъявляемым к кандидатским диссертациям по специальности 01.04.08 – «Физика плазмы», а ее автор заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук

Даю свое согласие на обработку персональных данных.

Старший научный сотрудник, доктор физико-математических наук по специальности 01.04.14 – «Теплофизика и теоретическая теплотехника»



Юрий Васильевич Петров

Дата: 27 сентября 2018 г.

142432, г. Черноголовка,

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук,

просп. Академика Семенова, д.1-А.

Телефон: 8 (495) 702-93-17;

e-mail: office@itp.ac.ru;

website: http://www.itp.ac.ru

Подпись Петрова Юрия Васильевича заверяю:

Ученый секретарь Федерального государственного бюджетного учреждения науки Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау Российской академии наук (ИТФ им. Л.Д. Ландау РАН) Телефон: 8 (495) 851-88-27

кандидат химических наук



Крашаков С.А.