

ОТЗЫВ

официального оппонента Петрушевича 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»

Целью диссертационной работы является разработка новых численных методов, позволяющих рассчитывать как термодинамические, так и кинетические свойства сильнонеидеальных кулоновских систем частиц, подчиняющихся статистике Ферми-Дирака.

В соответствии с этой целью в диссертации были рассмотрены следующие задачи, сформулированные автором:

1. Получить представление функции Вигнера для нерелятивистской системы заряженных частиц в условиях термодинамического равновесия, пригодное для непосредственных численных расчётов.

2. Найти способ для преодоления «фермионной проблемы знака» при расчёте равновесной функции Вигнера.

3. Разработать численные методы Монте-Карло, позволяющие рассчитывать термодинамические величины, средние значения квантовых операторов, парные корреляционные функции, а также функции распределения по импульсам для сильнонеидеальных квантовых многочастичных фермионных систем.

4. Реализовать разработанные численные методы в виде программного кода и провести ряд тестовых расчётов.

5. Провести расчёт термодинамических и кинетических свойств водородной плазмы в условиях сильной неидеальности ($\Gamma \geq 1$) и умеренного вырождения ($\chi_e \leq 10$) и сопоставить результаты с имеющимися в литературе данными.

6. Провести аналогичные расчёты для модели электрон-дырочной плазмы в полупроводниках и изучить влияние отношения массы дырки к массе электрона на функции распределения по импульсам.

Актуальность проведенных исследований связана с расширяющимся кругом исследований процессов, протекающих в экстремальных средах: в ударных волнах, недрах звёзд, атмосферах планет-гигантов и других космических объектах. Кроме того, такие экстремальные состояния могут возникать при ядерных взрывах и в экспериментах

по ударному сжатию. Экспериментальные исследования в таких условиях трудны, отсюда следует важность теоретических исследований: вывод уравнений состояния, нахождение структуры и транспортных свойств вещества. Особый интерес представляют пороговые энергии и константы скоростей химических и ядерных реакций, необходимые при изучении процессов горения, детонации, термоядерного синтеза при высоких давлениях.

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения. Кроме того, отдельный раздел посвящен подробному обзору литературы по рассмотренной в диссертации тематике, который разделен на три части в соответствии с задачами, рассмотренными в диссертации.

В начале первой главы кратко приводятся необходимые сведения из квантовой статистики: рассматривается вычисление средних значений операторов в наиболее общем смешанном ансамбле. Затем дается стандартное определение функции Вигнера для такого ансамбля и приводятся формулы для вычисления средних по ансамблю значений.

Далее следует вывод общего представления для функции Вигнера канонического ансамбля в виде интеграла по траекториям для бозонных и фермионных систем. Это является одной из задач, которые поставил и решил автор диссертации. Следует отметить, что для решения этой задачи автор проделал существенную доработку математического аппарата функции Вигнера.

Полученная формула оказывается слишком сложной для использования в численных расчетах, поэтому проводится резкое упрощение модели, вводится «одноимпульсный» подход к вычислению средних значений операторов и функций распределения для фермионных систем. Прежде всего определяется весьма широкий класс «одноимпульсных» операторов, к которому принадлежат наиболее важные термодинамические величины. Затем доказывается, что для вычисления этих величин достаточно «одноимпульсной» функции Вигнера. Наконец, выводится выражение для «одноимпульсной» функции Вигнера для фермионной системы в виде одно- или трёхмерного преобразования Фурье от интеграла по траекториям. Это построение модели, проделанное для возможности численных расчетов с использованием функции Вигнера, отмечено научной новизной.

Дальнейшее упрощение модели приводит к «линейному» и «гармоническому» приближению для функции Вигнера без учёта обменного взаимодействия. Показывается, что разложение потенциальной энергии в степенной ряд по Фурье-переменной позволяет выполнить многомерное преобразование Фурье явно, обсуждается возможность такого разложения и его применимость.

В заключительной части главы рассматривается эффективный псевдопотенциал в фазовом пространстве, учитывающий обменное взаимодействие фермионов или бозонов в парном приближении. Прежде всего выражение для обменного псевдопотенциала выводится для функции Вигнера идеального газа фермионов или бозонов. Затем оно обобщается на неидеальную систему в рамках «линейного» и «гармонического» приближений.

Во второй главе рассматриваются методы численного моделирования термодинамических свойств неидеальных квантовых систем частиц, основанные на функции Вигнера. В начале излагается основная идея метода Монте Карло для вычисления многомерных интегралов, обсуждаются статистические ошибки методов и описывается общий алгоритм Метрополиса-Гастингса. Далее детально рассматривается численная модель SMPIMC, обсуждается её сходимость и подбор технических параметров в различных ситуациях, а также приводятся комментарии к программной реализации модели, а также рассматриваются численные модели LAPIMC и NAPIMC, обсуждаются их сходимость и подбор технических параметров в различных условиях, а также приводятся комментарии к программным реализациям этих моделей. Следует отметить, что использование численных методов, основанных на функции Вигнера, может быть хорошим способом решения задачи численного моделирования термодинамических свойств неидеальных квантовых систем и нахождения термодинамических параметров вещества в экстремальном состоянии.

В третьей главе представлены результаты тестовых расчётов, рассмотренных в предыдущей главе программ SMPIMC, LAPIMC и NAPIMC, выполненных для некоторых модельных квантовых систем. Рассматриваются формальные термодинамические свойства частицы, движущейся во внешнем потенциальном поле. Результаты, полученные с помощью этих программ, сопоставляются с прямыми квантово-механическими расчётами и результатами других численных методов. В заключение третьей главы рассматривается идеальный фермионный газ. Правильность учёта обменного взаимодействия детерминантами в методе SMPIMC и обменными псевдопотенциалами в методах LAPIMC и NAPIMC проверяется сопоставлением полученных функций распределения по импульсам с точными аналитическими выражениями. Такой этап развития численных методов является обязательным для их верификации.

В четвёртой главе представлены результаты расчёта термодинамических и кинетических свойств сильнонеидеальных кулоновских систем на примере водородной и электрон-дырочной плазмы. С общей точки зрения рассматриваются двухкомпонентные

кулоновские системы. Поясняется физический смысл основных понятий и параметров, характеризующих термодинамическое состояние таких систем. Исследуются функции распределения по импульсам в двухкомпонентных кулоновских системах. Во-первых, приводятся результаты расчёта методами НАРІМС и SMPІМС для сильно неидеальной водородной плазмы со слабым умеренным вырождением. Во-вторых, приводятся результаты расчёта методом LARІМС для электрон-дырочной плазмы с умеренным вырождением.

Далее приводятся результаты расчёта методом SMPІМС внутренней энергии и давления сильнонеидеальной водородной плазмы со слабым и умеренным вырождением и производится их сопоставление с результатами других авторов. В заключение четвертой главы рассматриваются парные корреляционные функции в водородной и электрон-дырочной плазме, вычисленные методами SMPІМС и LARІМС и обсуждается их качественное поведение. Эти расчеты подтверждают заметный рост возможностей численных методов, которые достигнуты автором диссертации.

Из основных результатов работы, определенных автором диссертации, могут быть выделены особенно важные:

1. Получено представление функции Вигнера для (N, V, T) -ансамбля в виде преобразования Фурье от матрицы плотности, выраженной в виде интеграла по траекториям.
2. Получены явные выражения для функции Вигнера в виде интеграла по траекториям в «линейном» и «гармоническом» приближениях и исследованы их границы применимости.
3. Предложен эффективный псевдопотенциал в фазовом пространстве, учитывающий обменное взаимодействие бозонов.
4. Предложен эффективный псевдопотенциал в фазовом пространстве, явно реализующий принцип Паули и описывающий обменное взаимодействие.
5. Разработаны, реализованы и отлажены численные методы SMPІМС, LARІМС и НАРІМС, позволяющие рассчитывать средние значения квантовых операторов, парные корреляционные функции, а также функции распределения по импульсам для сильнонеидеальных квантовых систем фермионов.
6. Проведены численные расчеты с применением созданных программ, которые позволили исследовать функции распределения по импульсам, найти полную внутреннюю энергию и парные корреляционные функции в сильнонеидеальной водородной плазме при слабом и умеренном вырождении. Удалось определить асимптотическое поведение

электронного распределения в водородной плазме в виде медленно затухающего «хвоста», связанного с образованием связанных состояний.

Следует отметить, что в диссертации были решены как задачи построения моделей, пригодных для численных расчетов, так и создание новых численных методов, создание компьютерных программ для проведения таких расчетов.

Научная новизна:

1. Впервые было получено представление функции Вигнера для канонического (N, V, T) -ансамбля в виде интеграла по траекториям.
2. Впервые эффекты статистики Ферми удалось учесть с помощью парного псевдопотенциала в фазовом пространстве, реализующего принцип Паули. Это позволяет в ряде случаев избежать «фермионной проблемы знака» при расчёте термодинамических свойств вырожденных систем.
3. Впервые для учёта эффектов статистики Бозе-Эйнштейна был предложен парный псевдопотенциал в фазовом пространстве, реализующий эффективное притяжение тождественных бозонов.
4. Были разработаны новые квантовые методы Монте-Карло, позволяющие рассчитывать для неидеальных многочастичных систем фермионов средние значения произвольных квантовых операторов, парные корреляционные функции и функции распределения по импульсам.
5. Впервые исследовано влияние квантовых эффектов на функции распределения по импульсам электронов и дырок в модели электрон-дырочной плазмы при изменении отношения массы дырки к массе электрона.

Теоретическая и практическая значимость работы:

1. Полученное в работе представление функции Вигнера в виде интеграла по траекториям может быть полезным как для численного моделирования, так и для аналитического исследования функции Вигнера в квазиклассическом пределе и её асимптотического поведения.
2. Предложенный в работе обменный псевдопотенциал позволяет в ряде случаев избежать «фермионной проблемы знака» и более эффективно исследовать сильнонеидеальные вырожденные фермионные системы.

3. Учёт обменного взаимодействия бозонов и фермионов в виде псевдопотенциалов позволяет существенно сократить время расчёта по сравнению с известными методами (RPIMC, DPIMC, SPIMC, PB-PIMC) в условиях слабого и умеренного вырождения.

4. В работе детально описаны численные методы SMPIMC, LAPIMC и NAPIMC, подбор технических параметров расчёта и влияние этих параметров на результат. Эта информация может быть полезной при проведении расчётов указанными методами, а также при усовершенствовании этих методов.

5. В работе были рассчитаны энергия, давление и парные корреляционные функции в сильнонеидеальной водородной плазме при $0.4 \leq \Gamma \leq 2.0$, $0.3 \leq \chi_e \leq 5.0$. Эти данные необходимы для построения уравнения состояния и изучения структуры водородной плазмы в указанной области состояний и могут быть использованы для проверки других независимых расчётов.

6. В работе были исследованы равновесные функции распределения по импульсам в сильнонеидеальных двухкомпонентных кулоновских системах. Эти данные необходимы для расчёта пороговых энергий и констант скоростей реакций в плазменных средах, что необходимо при изучении процессов горения, детонации и ядерного синтеза при высоких давлениях. Результаты этой работы будут интересны и могут быть использованы в организациях, где проводятся исследования вещества в экстремальном состоянии. Следует провести необходимое оформление созданных компьютерных программ для возможности их передачи в другие заинтересованные организации.

Апробация работы была проведена на многочисленных конференциях (около 10), посвященных проблемам физики плазмы, их список приведен в диссертации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 9 печатных изданиях, рекомендованных ВАК.


Личный вклад автора не вызывает сомнений, что подтверждается его участием в основных научных работах, на которых основана диссертация. Основные её элементы были получены автором лично, или с его участием.

Полученные в диссертации результаты, как выражения для функции Вигнера в виде интеграла по траекториям в «линейном» и «гармоническом» приближениях, так и по созданным автором диссертации численным методам, позволяющим проводить вычисления термодинамических и кинетических параметров вещества в экстремальном состоянии, являются важными результатами. Таким образом, в диссертации А. С. Ларкина получен ряд новых важных результатов.

Диссертация «Численное моделирование термодинамических свойств кулоновских систем частиц в вигнеровской формулировке квантовой механики» представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013 г., а ее автор Ларкин Александр Сергеевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 – «Физика плазмы».

Даю свое согласие на обработку персональных данных.

Начальник лаборатории физико-химической кинетики и распространения излучения в газах и плазме, доктор физико-математических наук по специальности 01.04.21 – «Лазерная физика»

 Ю. В. Петрушевич 25 сентября 2018 г.

108840, Россия, г. Москва, г. Троицк,
Акционерное Общество "Государственный Научный Центр Российской Федерации
Троицкий Институт Инновационных и Термоядерных Исследований" (АО "ГНЦ РФ
ТРИНИТИ"),
ул. Пушкиных, владение 12.
Телефон: 8 495 841 52 36;
e-mail: liner@triniti.ru;
website: <http://www.triniti.ru>

Подпись Петрушевича Ю. В. заверяю:

Ученый секретарь Акционерного Общества "Государственный Научный Центр Российской Федерации Троицкий Институт Инновационных и Термоядерных Исследований" (АО "ГНЦ РФ ТРИНИТИ") Телефон: 8 (495) 851-88-27

кандидат физико-математических наук



 А. А. Ежов