



«УТВЕРЖДАЮ»
Директор
Федерального государственного
бюджетного учреждения науки
Институт спектроскопии
Российской академии наук
профессор Задков Виктор Николаевич

«6» сентября 2018 г.

ОТЗЫВ

ведущей организации

на диссертационную работу Ларкина Александра Сергеевича

«Численное моделирование термодинамических свойств кулоновских систем частиц в вигнеровской формулировке квантовой механики», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 – «Физика плазмы»

Диссертационная работа Ларкина А.С. посвящена компьютерному моделированию равновесных термодинамических свойств квантовых нерелятивистских систем частиц, взаимодействующих друг с другом, либо с потенциальным внешним полем. Основное внимание уделяется при этом кулоновским системам, то есть системам, состоящим из электрически заряженных частиц. В данной диссертационной работе можно выделить три основные части: «теоретическую», «алгоритмическую» и «практическую». В теоретической части излагается разработанный соискателем с соавторами формализм, являющийся основой для созданных численных методов. В алгоритмической части подробно рассматриваются предлагаемые численные методы для моделирования термодинамических свойств квантовых систем частиц. В практической части с помощью этих методов исследуются термодинамические свойства двухкомпонентных кулоновских систем: водородной плазмы и электрон-дырочной плазмы.

Диссертация состоит из введения, обзора литературы, четырёх глав и заключения. Полный объём диссертации составляет 114 страниц с 32 рисунками и 4 таблицами. Список литературы содержит 55 наименований, из которых 9 — публикации соискателя с соавторами по теме диссертации.

Во введении обосновывается актуальность темы исследования, формулируется его основная цель и поставленные задачи, а также выносятся на защиту основные положения диссертации. Затем отражается научная и практическая значимость исследования и обосновывается достоверность полученных результатов. Наконец приводится список конференций, на которых были представлены материалы защищаемой диссертации, и отражается личный вклад соискателя.

В обзоре литературы выделено три раздела. В первом разделе кратко рассматривается общая задача расчёта термодинамических свойств квантовых систем частиц и поясняется физический смысл термодинамических интегралов по траекториям. Во втором разделе рассматриваются методы Монте Карло, основанные на интегралах по траекториям (методы РИМС). Сначала кратко излагаются их основные идеи, после чего даётся краткий обзор существующих в настоящее время методов РИМС и рассматриваются их возможности и недостатки. В третьем разделе кратко рассматривается Вигнеровская формулировка квантовой механики и её преимущества в приложениях квантовой статистики.

В первой главе излагается формализм, являющийся теоретическим основанием для численных методов, представленных в диссертационной работе. Глава состоит из пяти разделов. В первом разделе приводятся необходимые сведения из квантовой статистики и даётся определение функции Вигнера, представляющей собой равновесную квантовую функцию распределения в фазовом (импульсно-координатном) пространстве. Во втором разделе представлен вывод общего представления для функции Вигнера канонического ансамбля в виде интеграла по траекториям как для бозонных, так и для фермионных систем. В третьем разделе описывается «одноимпульсный» подход к вычислению наиболее важных термодинамических величин и функций распределения для фермионных систем. В четвёртом разделе описываются «линейное» и «гармоническое» приближения, позволяющие рассчитывать полную функцию Вигнера. В пятом разделе приводится вывод эффективных псевдопотенциалов в фазовом пространстве, учитывающих обменное взаимодействие как фермионов, так и бозонов в парном приближении.

Во второй главе рассматриваются методы Монте Карло, позволяющие рассчитывать равновесную функцию Вигнера системы частиц с помощью интегралов по траекториям. Глава состоит из трёх разделов. В первом разделе излагаются общие алгоритмы методов Монте Карло и оценки статистических погрешностей. Во втором разделе детально описывается численный метод SMPИМС, основанный на «одноимпульсном» подходе, обсуждаются вопросы сходимости и подбора технических параметров. В третьем разделе детально описываются численные методы LAPИМС и НАРИМС, основанные на «линейном» и «гармоническом» приближении для функции Вигнера. Обсуждаются их сходимость и границы применимости.

В третьей главе представлены результаты тестовых расчётов разработанными численными методами, выполненные для некоторых модельных систем. Глава состоит из двух разделов. В первом разделе рассматриваются термодинамические свойства простейших систем, состоящих из одной частицы во внешнем потенциальном поле. Результаты расчётов разработанными методами сопоставляются с прямыми квантово-механическими расчётами и с результатами стандартных методов РИМС. Во втором разделе рассматривается идеальный фермионный газ и проверяется правильность учёта обменного взаимодействия эффективными псевдопотенциалами в фазовом пространстве.

В четвёртой главе представлены результаты расчёта термодинамических свойств водородной и электрон-дырочной плазмы. Глава состоит из четырёх разделов. В первом разделе даются необходимые сведения по двухкомпонентным кулоновским системам и

поясняются основные понятия и параметры, характеризующие термодинамические свойства таких систем. Во втором разделе исследуются функции распределения по импульсам в водородной и электронно-дырочной плазме при умеренном вырождении и существенной неидеальности. В третьем разделе рассматривается поведение полной внутренней энергии и давления в водородной плазме. В четвёртом разделе обсуждаются парные корреляционные функции в водородной и электрон-дырочной плазме и пространственная структура этих систем.

В заключении перечисляются основные результаты, полученные в рамках исследований, на которых основана диссертационная работа.

К основным недостаткам диссертации Ларкина А.С. можно отнести:

1. При обзоре литературы по теме диссертации соискатель ограничился только рассмотрением методов Монте Карло, основанных на интегралах по траекториям. В то же время известны другие “первопринципные” методы для исследования кулоновских фермионных систем, например, методы функционала плотности, и их стоило бы упомянуть.
2. В первой главе при выводе обменных псевдопотенциалов соискатель ограничился рассмотрением парных перестановок тождественных частиц без учёта вклада перестановок высшего порядка. Следовало бы привести соображения, когда и почему тройными, четверными и т.д. перестановками можно пренебречь, и оценить их вклад.
3. Во второй главе при обсуждении сходимости методов SMPIMC, LAPIMC и NAPIMC соискатель приводит оптимальные значения для степени дискретизации интегралов по траекториям M , однако соответствующие зависимости результатов расчёта от этого параметра не представлены графически. Следовало бы привести примеры подобных графиков зависимости, например, энергии от M .
4. В третьей главе представлены результаты расчётов функций распределения по импульсам для идеального газа фермионов, выполненные с целью проверки фермионного обменного псевдопотенциала. Однако соответствующих расчётов для бозонного псевдопотенциала выполнено не было.
5. В четвёртой главе рассматривается модель электрон-дырочной плазмы с диэлектрической проницаемостью, равной единице. Интересно было бы рассмотреть более реалистичную модель такой системы со значениями диэлектрической проницаемости для реальных полупроводников.

Перечисленные замечания носят рекомендательный характер и не снижают общей высокой оценки работы

Тема диссертационной работы Ларкина А.С. актуальна как для изучения свойств веществ в экстремальных состояниях, так и для совершенствования методов компьютерного моделирования квантовых многочастичных систем. Так, знание свойств веществ при высоких температурах и давлениях необходимо при изучении различных космических объектов, сильных взрывов и ядерных реакций. Кроме того, аналогичные свойства могут проявлять носители зарядов в полупроводниках и металлах уже при «нормальных» условиях. В то же время эксперименты, связанные с достижением высоких температур и давлений, могут быть крайне сложными и дорогими, а иногда и вовсе невозможными в настоящее время. С другой стороны, теоретическое исследование таких

систем, основанное на теории возмущений, зачастую невозможно из-за их сильной неидеальности. Поэтому компьютерное моделирование оказывается важным инструментом при изучении веществ в экстремальных условиях. Одними из наиболее мощных численных подходов к моделированию квантовых неидеальных систем частиц являются методы РИМС, основанные на представлении статистической суммы в виде интегралов по траекториям в координатном пространстве. Важным недостатком существующих методов является то, что с их помощью не удаётся рассчитать некоторые равновесные свойства, в частности, функции распределения по импульсам. Кроме того, необходимость антисимметризовать матрицу плотности при моделировании фермионных систем приводит к до сих пор полностью непреодоленной «фермионной проблеме знака», сильно замедляющей расчёт уже при умеренном вырождении. Поэтому разработка новых методов РИМС, свободных от указанных недостатков, является актуальной задачей в современной физике.

Научная новизна диссертации Ларкина А.С. состоит в следующем. Во-первых, впервые было использовано представление функции Вигнера канонического ансамбля в виде интегралов по траекториям и получены явные выражения для него. Во-вторых, обменное взаимодействие тождественных частиц впервые было учтено посредством эффективных псевдопотенциалов, зависящих от импульсов и координат частиц. В-третьих, были разработаны численные методы SMPИМС, LAPИМС и NAPИМС, позволяющие рассчитывать функцию Вигнера, средние значения произвольных операторов и функции распределения по импульсам в неидеальных фермионных системах. В-четвёртых, впервые было рассмотрено влияние квантовых эффектов на равновесные распределения по импульсам в водородной и электрон-дырочной плазме в условиях умеренного вырождения и сильной неидеальности.

Теоретическая значимость диссертационной работы Ларкина А.С. заключается в следующем. Во-первых, полученное представление для функции Вигнера может быть полезным как для численного моделирования, так и для аналитического исследования равновесной функции Вигнера в квазиклассическом пределе. Во-вторых, предлагаемые в работе эффективные псевдопотенциалы для обменного взаимодействия позволяют существенно сократить время расчёта по сравнению со стандартными методами РИМС и в ряде случаев избежать «фермионной проблемы знака». В-третьих, разработанные численные методы позволяют исследовать равновесные распределения по импульсам, которые необходимы для оценки констант скоростей реакций в плазменных средах. В-четвёртых, были исследованы функции распределения по импульсам в водородной и электрон-дырочной плазме и обнаружено их нетривиальное поведение при больших импульсах, существенно отличающееся от фермиевского. В-пятых, в работе представлены подробные результаты расчёта внутренней энергии и давления в водородной плазме при умеренном вырождении и сильной неидеальности, которые уточняют и дополняют имеющиеся в литературе данные.

Основные результаты работы докладывались на двенадцати российских и международных конференциях в период с 2015 до 2018 года и изложены в девяти печатных изданиях, рекомендованных ВАК и входящих в базы данных Web Of Science и Scopus.

В целом диссертационная работа Ларкина А.С. является самостоятельным исследованием целого ряда актуальных проблем физики плазмы, квантовой статистической механики и численного моделирования. Разработанные численные методы могут быть полезны при изучении термодинамических свойств как плазменных сред, так и прочих многочастичных систем. Полученные результаты для распределений по импульсам представляют несомненный интерес как с точки зрения термодинамики, так и для вопросов кинетики реакций в плазме.

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 несомненно заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.08 – «Физика плазмы».

Диссертационная работа Ларкина А.С. заслушана и одобрена на заседании лаборатории спектроскопии наноструктур Института спектроскопии РАН, протокол N 2, 05.09.18.

Отзыв составил заведующий лабораторией спектроскопии наноструктур ИСАН
к.ф.-м.н., профессор

Лозовик Юрий Ефремович

108840 г. Москва, г.Троицк, ул. Физическая, 5, 8 (495) 851-08-51, lozovik@isan.troitsk.ru

Подпись Ю.Е. Лозовика удостоверяю

Ученый секретарь ИСАН к.ф.-м.н.

Перминов Е.Б.

108840 г. Москва, г.Троицк, ул. Физическая, 5, 8 (495) 851-02-21, perminov@isan.troitsk.ru

