

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Лавриненко Ярослава

«Исследование неидеальной электрон-ионной плазмы методом динамики волновых пакетов», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы

Экстремальные состояния вещества, к которым относится неидеальная плазма и разогретое плотное вещество (warm dense matter), исследуются на протяжении десятков лет с использованием взрывных экспериментов, мощных лазеров и потоков частиц. Эти исследования помимо прикладной ценности для описания лазерной абляции, модификации поверхностей мишеней потоками заряженных частиц, оптимизации ударно-волновых процессов, обеспечивают более глубокое понимание строения вещества на фундаментальном уровне.

При мегабарных давлениях и высоких температурах вещество представляет собой частично или полностью ионизированную плотную плазму с высокой степенью неидеальности. Как следствие, описание свойств таких систем требует согласованного учета вкладов связанных и свободных электронов, атомных ядер многозарядных ионов. Для моделирования этих явлений на сегодняшний день существует ряд численных методов, отличающихся точностью описания тех или иных процессов, а также вычислительной сложностью. В работе Лавриненко Я. проводится исследование и доработка метода компьютерного моделирования, основанного на динамике волновых пакетов.

Предлагаемая в диссертации модель плазмы и основанный на ней метод компьютерного моделирования представляют собой комбинацию молекулярной динамики с волновыми пакетами (МДВП) в приближении Хартри и квантовой молекулярной динамики, основанный на теории функционала плотности. Суть метода МДВП заключается в параметризации волновой функции отдельного электрона с помощью гауссовской функции, а многоэлектронной волновой функции – с помощью произведения волновых функций отдельных электронов. Получаемые в этом случае уравнения динамики, описывающие эволюцию параметров волновых пакетов, схожи с уравнениями классической молекулярной динамики, что обеспечивает высокую численную эффективность метода. Одновременно с этим учет обменно-корреляционных эффектов выполняется с помощью расчета функционала электронной плотности, используемого в квантовой молекулярной динамике, при этом электронная плотность определяется из параметров волновых пакетов. Это позволяет повысить точность описания системы при высоких давлениях и, например, достичь хорошего согласия результатов расчета ударной адиабаты и изоэнтропы дейтерия с более точными моделями и экспериментальными данными. Кроме того, представленный в диссертации подход позволяет моделировать не только равновесные состояния плазмы, но также рассматривать динамические процессы, такие как электрон-ионная релаксация, взаимодействие плазмы с излучением и др.

Описанный в работе метод моделирования реализован в виде программного модуля для пакета атомистического моделирования LAMMPS и оптимизирован для выполнения вычислений на графических ускорителях и многопроцессорных вычислительных системах. Благодаря этому, метод позволяет рассматривать системы с несколькими тысячами частиц, что необходимо для получения статистически достоверных результатов.

Результаты работы наглядно представлены в автореферате в виде графиков, таблиц и сопутствующих описаний, их научная новизна не подлежит сомнению. Результаты неоднократно докладывались на международных и всероссийских конференциях, а также опубликованы в 6-ти рецензируемых изданиях, индексируемых системами Web of Science и Scopus. Текст автореферата хорошо иллюстрирует достижение целей работы и обоснованность научных положений.

Диссертация представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения ученых степеней № 842 от 24.09.2013г., ред.01.10.2018г., а ее автор Лавриненко Ярослав заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – физика плазмы.

Доктор физ.-мат. наук,
профессор Сколковского института науки и технологий
Бриллиантов Николай Васильевич

Адрес: 121205, Российская Федерация, г. Москва, Территория Инновационного Центра
“Сколково”, Большой бульвар д.30, стр.1
Телефон: (916) 182-87-25, e-mail: N.Brilliantov@skoltech.ru

Подпись Бриллиантова Николая Васильевича заверяю.

РУКОВОДИТЕЛЬ ОТДЕЛА
КАДРОВОГО АДМИНИСТРИРОВАНИЯ



«__» _____ 2021 г.

Адрес: 121205, Российская Федерация, г. Москва, Территория Инновационного Центра
“Сколково”, Большой бульвар д.30, стр.1
Телефон: +7 (495) 280 14 81, e-mail: