

СВЕДЕНИЯ ОБ ОФИЦИАЛЬНОМ ОППОНЕНТЕ

диссертационной работы Демьянова Георгия Сергеевича «Эффективный учет дальнего действия в моделировании классических и квантовых кулоновских систем с помощью усредненного по углам потенциала Эвальда», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – «Физика плазмы».

Фамилия, имя, отчество	Потехин Александр Юрьевич
Гражданство	РФ
Ученая степень	Доктор наук
Отрасль науки	Физико-математические
Специальность	01.03.02 – «Астрофизика и радиоастрономия»
Ученое звание	–
Должность	Главный научный сотрудник
Место работы	ФГБУН Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук
Организационно-правовая форма	Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Структурное подразделение	Сектор теоретической астрофизики
Адрес электронной почты	palex@astro.ioffe.ru
Телефон	+7 911 9248202

СПИСОК

Опубликованных работ в рецензированных научных изданиях официального оппонента по защите диссертации Демьянова Георгия Сергеевича на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук на тему: «Эффективный учет дальнего действия в моделировании классических и квантовых кулоновских систем с помощью усредненного по углам потенциала Эвальда», по специальности 1.3.9 – «Физика плазмы»

№	Название публикации	Тип	Соавторы	Выходные данные	Перечень ВАК
1	Neutron star cooling implications and magnetic field of the Vela Junior central compact object from all XMM-Newton and Chandra spectra	Научная статья	Ho W.C.G., Simkhayeva E.	MNRAS. 2026. 546(3): stag126. DOI: 10.1093/mnras/stag126.	Да
2	Urca cooling of the neutron star in the Cassiopeia A supernova remnant	Научная статья	Yakovlev D.G.	JHEAp. 2026. 49: 100441. DOI: 10.1016/j.jheap.2025.100441.	Да
3	Cooling of neutron stars in soft X-ray transients with realistic crust composition	Научная статья	Chugunov A.I., Shchepochin N.N., Gusakov M.E.	JHEAp. 2025. 45: 116-124. DOI: 10.1016/j.jheap.2024.11.017.	Да
4	Neutrino beaming in ultraluminous X-ray pulsars as a result of gravitational lensing by neutron stars	Научная статья	Mushtukov A.A., Markozov I.D., Nallan S., Kornacka K., Ognev I.S., Kravtsov V., Dobrynina A.A., Kaminker A.D.	MNRAS. 2025. 538(4): 2396-2407. DOI: 10.1093/mnras/staf435.	Да
5	Unified equations of state for cold nonaccreting neutron stars with Brussels-Montreal functionals. V. Improved parametrization of the nucleon density distributions	Научная статья	Shchepochin N.N., Chamel N., Pearson J.M., Chugunov A.I.	Phys. Rev. C. 2024. 109: 055802. DOI: 10.1103/PhysRevC.109.055802.	Да
6	Thermal evolution of neutron stars in soft X-ray transients with thermodynamically consistent models of the accreted crust	Научная статья	Gusakov M.E., Chugunov A.I.	MNRAS. 2023. 522(4): 4830-4840. DOI: 10.1093/mnras/stad1309.	Да
7	XMM-Newton observations of PSR J0554+3107: pulsing thermal emission from a cooling high-mass neutron star	Научная статья	Tanashkin A.S., Karpova A.V., Shibano Y.A., Zyuzin D.A.	MNRAS. 2022. 516(1): 13-25. DOI: 10.1093/mnras/stac2164.	Да
8	Phase-resolved X-ray spectroscopy of PSR B0656+14 with SRG/eROSITA and XMM-Newton	Научная статья	Schwope A., Pires A.M., Kurpas J., Doroshenko V., Suleimanov V.F., Freyberg M., Becker W., Dennerl K., Haberl F., Lamer G., Maitra C., Ramos-Ceja M.E.,	A&A. 2022. 661: A41. DOI: 10.1051/0004-6361/202141105.	Да

			Santangelo A., Traulsen I., Werner K.		
9	Likely optical counterpart of the cool middle-aged pulsar J1957+5033	Научная статья	Zyuzin D.A., Zharikov S.V., Karpova A.V., Kirichenko A.Yu., Shibano Yu.A., Geier S., Suleimanov V.F., Cabrera-Lavers A.	MNRAS. 2022. 513(4): 6088-6094. DOI: 10.1093/mnras/stac1293.	Да
10	Statistical features of multiple Compton scattering in a strong magnetic field	Научная статья	Mushtukov A.A., Markozov I.D., Suleimanov V.F., Nagirner D.I., Kaminker A.D., Portegies Zwart S.	Phys. Rev. D. 2022. 105(10): 103027. DOI: 10.1103/PhysRevD.105.103027.	Да
11	Analytic approximations to photoabsorption cross sections of once-ionized helium in magnetar atmospheres	Научная статья	Demidov I.V.	J. Phys.: Conf. Ser. 2021. 2103: 012030. DOI: 10.1088/1742-6596/2103/1/012030.	Да
12	Electron conduction opacities at the transition between moderate and strong degeneracy: Uncertainties and impacts on stellar models	Научная статья	Cassisi S., Salaris M., Pietrinferni A.	A&A. 2021. 654: A149. DOI: 10.1051/0004-6361/202141425.	Да
13	Heat blanketing envelopes of neutron stars	Научная статья	Beznogov M.V., Yakovlev D.G.	Phys. Rep. 2021. 919: 1-68. DOI: 10.1016/j.physrep.2021.03.004.	Да
14	Skye: A Differentiable Equation of State	Научная статья	Jermyn A.S., Schwab J., Bauer E., Timmes F.X.	ApJ. 2021. 913(1): 72. DOI: 10.3847/1538-4357/abf48e.	Да
15	Electrostatic energy of Coulomb crystals with polarized electron background	Научная статья	Kozhberov A.A.	Phys. Rev. E. 2021. 103: 043205. DOI: 10.1103/PhysRevE.103.043205.	Да

Официальный оппонент,
главный научный сотрудник
сектора теоретической астрофизики
ФТИ им. А.Ф. Иоффе,
д.ф.-м.н.



Потехин А. Ю.

Подпись Потехина Александра Юрьевича заверяю:

Ученый секретарь ФТИ им. А.Ф. Иоффе
к.ф.-м.н.



М.И. Патров

ОТЗЫВ

официального оппонента **Потехина Александра Юрьевича**

на диссертационную работу **Демьянова Георгия Сергеевича**
«Эффективный учёт дальнего действия в моделировании классических и квантовых кулоновских систем с помощью усреднённого по углам потенциала Эвальда», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – «Физика плазмы».

Диссертация Демьянова Г.С. посвящена разработке вычислительно эффективного подхода к учёту кулоновского дальнего действия при моделировании невырожденных кулоновских систем с периодическими граничными условиями, а также применению этого подхода для расчёта термодинамических и структурных свойств однокомпонентной плазмы (ОКП) и невырожденной водородной плазмы. С этой целью использован метод, основанный на усреднённом по углам потенциале Эвальда (УУПЭ), который позволил существенно упростить вычисление вкладов дальнедействующих сил в типичной задаче атомистического моделирования, повысить масштабируемость численных расчётов и получать термодинамические свойства плазмы в термодинамическом пределе. В квантово-статистической задаче этот подход дополнен построением высокотемпературной матрицы плотности и эффективных псевдопотенциалов с явным учётом дальнего действия и их применением к моделированию двухкомпонентной электрон-протонной плазмы.

Кулоновские системы лежат в основе физических моделей вещества, а их численное моделирование востребовано в задачах астрофизики, физики плазмы и в смежных областях. Дальнедействующий характер кулоновского взаимодействия при периодических граничных условиях требует использования специальных вычислительных приёмов, к которым относится техника Эвальда. Эта техника, как и известные альтернативные подходы, высокочувствительна в численном отношении. К этому добавляются сложности, связанные с квантовыми эффектами и проблемой неустойчивости систем разноимённых зарядов при их квазиклассическом описании. Поэтому создание численно эффективных и при этом достаточно точных алгоритмов расчётов физических свойств кулоновских систем является **актуальной и практически значимой задачей**, решение которой важно для прогресса теоретических исследований плазмы.

Цель работы состояла в создании эффективных методов моделирования классических и квантовых кулоновских систем с учётом дальнего действия на основе усреднения по углам сумм Эвальда, программной реализации этих

методов и их использовании для расчётов энергии, давления и структурных свойств ОКП и невырожденной водородной плазмы.

Научная новизна полученных в диссертации результатов состоит в том, что в ней **впервые**:

а) осуществлён строгий аналитический вывод усреднённого по углам потенциала Эвальда для одно- и двухкомпонентных кулоновских систем и на его основе получены рабочие формулы для потенциальной энергии и давления, в том числе необходимые поправки к вириальному выражению в случае потенциалов, зависящих от объёма;

б) построено выражение для потенциальной энергии ОКП при периодических граничных условиях с усечённым кулоновским потенциалом и на его основе проведено сравнение результатов моделирования методом Монте-Карло с различными потенциалами, включая исследование эффектов конечного размера и влияния учёта дальнего действия;

в) построено аналитическое обобщение высокотемпературной кулоновской матрицы плотности и соответствующего псевдопотенциала Кельбга на случай явного учёта дальнего действия и предложена схема суммирования взаимодействий в представлении интегралов по траекториям в этом случае; эти результаты реализованы в виде программного комплекса KelbgLIP;

г) предложен способ подавления нефизической кластеризации при низких температурах посредством эффективного учёта принципа Паули через модификацию электрон-электронного взаимодействия и на этой основе получены уравнения состояния и ряд структурных характеристик ОКП и невырожденной водородной плазмы, включая степень ионизации последней.

Достоверность полученных результатов подтверждается корректным использованием современного математического аппарата, тщательной верификацией проведённых расчётов и сравнением с известными теоретическими моделями и численными данными. В работе приведены значения расчётных параметров и подробно описана методика расчётов, в связи с чем **обоснованность** результатов не вызывает сомнений.

Диссертационная работа изложена на 199 страницах машинописного текста и состоит из предисловия, списка сокращений и обозначений, введения, 5 глав, заключения, приложения и списка литературы, включающего 218 наименований.

Во введении диссертационной работы обсуждается актуальность, научная новизна и практическая значимость задач, решаемых в диссертации.

Первая глава содержит теоретическое рассмотрение классических электронейтральных кулоновских систем: обсуждаются особенности суммирования

взаимодействий по периодическим образам, приводится вывод потенциала Эвальда и обсуждаются его математические аспекты. Отдельное место занимает вывод УУПЭ для одно- и двухкомпонентной плазмы, связанные с ним выражения для термодинамических величин, а также обсуждение аналитических результатов для термодинамики ОКП.

Рассматриваются вопросы термодинамической согласованности вирального давления в случае потенциала, зависящего от объёма, и подходы к построению выражений для энергии без явного учёта дальнего действия, что важно для исследования влияния дальнего действия.

Во второй главе рассматривается квантово-статистическое описание двухкомпонентных систем с помощью матрицы плотности. Обсуждается высокотемпературное решение Кельбга и его модификация для учёта кулоновского дальнего действия на основе УУПЭ. Анализируются псевдопотенциалы и силы для моделирования невырожденной водородной плазмы, включая учёт связанных состояний и обменных эффектов электронов. Дополнительно рассматривается формулировка термодинамики в представлении интегралов по траекториям.

В третьей главе изложены алгоритмы и практические детали численного моделирования: методы Монте-Карло (в том числе в представлении интегралов по траекториям) и молекулярной динамики в каноническом ансамбле, способы вычисления энергии и радиальных функций распределения при разных типах потенциалов, подходы к оценке статистических погрешностей и процедуры экстраполяции к термодинамическому пределу, а также метод расчёта состава водородной плазмы.

В четвёртой главе приводятся и обсуждаются результаты для ОКП: выполняется верификация вычислительных схем с УУПЭ, проводится сравнительное изучение зависимостей энергии от числа частиц для различных потенциалов (с учётом и без учёта дальнего действия), вычисляется энергия ОКП при разных значениях параметра неидеальности Γ в термодинамическом пределе. В результате с использованием УУПЭ рассчитано уравнение состояния ОКП, которое находится в согласии с уравнением состояния, рассчитанным ранее другими авторами без использования приближения УУПЭ – в частности, в работах Кайоля [38] и ДеВитта и Слэттери [DeWitt & Slattery, *Contrib. Plasma Phys.* **39**, 97 (1999); последняя работа в диссертации не упомянута]. Отличие энергии ОКП, вычисленной автором в приближении УУПЭ, от результатов этих работ находятся в пределах тысячных долей NkT , где N – число ионов, T – температура, k – постоянная Больцмана. Это отличие того же порядка, что и различия результатов указанных работ между собой, а также вероятная погрешность в каждой из них. Тем самым доказана применимость УУПЭ для высоко-

точных расчётов свойств ОКП. Представляют интерес и методологическую ценность также способы и результаты верификации проведённого расчёта, описанные в данной главе.

В пятой главе приводятся результаты моделирования невырожденной водородной плазмы: анализируется слабонеидеальный режим, в том числе с помощью интегралов по траекториям, а также оценивается вероятность образования связанных состояний при моделировании Монте-Карло. Далее рассматриваются расчёты методом молекулярной динамики с учётом конечного значения тепловой длины волны де Бройля электронов и производится верификация метода. Приведены зависимости структурных свойств, степени ионизации и состава невырожденной неидеальной плазмы от параметра неидеальности, исследована зависимость энергии от числа частиц, дано обсуждение условий возникновения нефизических кластеров при низких температурах и способов их устранения. Результаты расчётов уравнения состояния в термодинамическом пределе представлены в виде таблицы.

Заключение отражает основные результаты работы.

Приложение А содержит описание разработанной программы KelbgLIP.

Замечания к диссертационной работе Демьянова Г.С.

1. В разделе 1.1.3 автор резко критикует способ устранения дипольного слагаемого, предлагавшийся другими авторами и заключающийся в том, чтобы рассматривать расчётную область окружённой металлом. Этот способ в диссертации назван «абсурдным» на том основании, что, по утверждению автора, «изначально рассматривается система зарядов в вакууме». Однако для решаемой задачи изначально допустимо любое окружение рассматриваемой системы, не обязательно вакуум. Действительно, искомый конечный результат – это термодинамический предел, в котором объём системы обращается в бесконечность. В этом пределе вопрос о том, что находится вне системы – вакуум или металл, – становится схоластическим. Поэтому для поиска энергии в термодинамическом пределе погружение системы в вакуум, металл или какую-либо иную среду равноправны по физическому смыслу. Различие же результатов отражает как раз подробно обсуждаемую автором условную сходимость ряда, через который выражается энергия в этом пределе.
2. На с.75 диссертации разложение энергии ОКП при малых Γ , опубликованное Ортнером [71], названо «самым продвинутым на сегодняшний день», хотя автору известна статья Кайоля и Жиль [72], в которой показано, что коэффициенты членов разложения, включающих множитель Γ^6 , в статье Ортнера [71] ошибочны. При $\Gamma < 0.1$ формула Ортнера даёт

практически тот же результат, что и формула Козна и Мёрфи 1969 года [70], а с увеличением Γ формула Козна и Мёрфи становится предпочтительнее: её отличие от точных значений не превышает $0.001NkT$ при всех $\Gamma < 0.4$, тогда как ошибка формулы Ортнера находится в этих границах исключительно при $\Gamma < 0.25$.

3. Наряду с общепринятой формой аналитической аппроксимации для зависимости неидеальной составляющей энергии ОКП от параметра кулоновской связи Γ , которая выражается формулой (4.3), с неясной целью приводится и подробно обсуждается устаревшая аппроксимация (4.2), заведомо неприменимая при малых Γ . Более того, в ряде мест эта устаревшая формула используется автором как основная. Так, на с.140 диссертации написано: «для определения уравнения состояния ОКП достаточно знать зависимость (4.2)», – тогда как эта зависимость даёт расходимость при малых Γ .
4. Набор коэффициентов, предложенный автором для аналитической зависимости (4.3), приходится признать неудачным. Хотя такая аппроксимация воспроизводит численные результаты автора, опубликованные им в работе [206], с ничтожной погрешностью, не превышающей $0.0001NkT$, но в промежутках между теми значениями Γ , при которых автор проводил расчёты, ошибка возрастает в десятки и сотни раз, превышая $0.01NkT$ при $\Gamma \sim 4$. В то же время коэффициенты аппроксимации (4.3), предложенные ранее в статье [137] для описания вышеупомянутых результатов ДеВитта и Слэттери (1999), обеспечивают удержание погрешности в пределах $\approx 0.002NkT$ при любых Γ также и по отношению к численным результатам [206] автора диссертации. Это естественно, так как численные результаты автора отлично согласуются с результатами ДеВитта и Слэттери, которые он проигнорировал.
5. Пункт 2 раздела «Научная и практическая значимость» сформулирован следующим образом: «Полученное в работе уравнение состояния ОКП может быть использовано для астрофизических приложений». Это утверждение справедливо, но выделять его в отдельный пункт данного раздела вряд ли стоило, поскольку полученное уравнение состояния не является улучшением известного уравнения состояния ОКП, уже четверть века использующегося для приложений, включая астрофизические. Во Введении и в главе 4 полученное уравнение состояния ОКП названо новым, но оно не отличается от старого в пределах погрешностей.

Сделанные замечания не снижают общей высокой оценки диссертационной работы Г.С. Демьянова. Работа выполнена на высоком научном уровне. Все

результаты, полученные в работе, являются **новыми** и опубликованы в виде 9 статей в рецензируемых журналах из списка ВАК (из них 2 статьи – в журналах первого квартиля). Очевиден определяющий вклад автора в решение задач, описанных в диссертации. Основные результаты диссертации прошли **апробацию** на конференциях и семинарах (опубликовано 11 тезисов докладов). Тема диссертации соответствует научной специальности 1.3.9 – Физика плазмы. Автореферат достаточно полно и точно отражает содержание диссертации.

Таким образом, диссертация Демьянова Г.С. представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем критериям, установленным п. 9 Положения о порядке присуждения учёных степеней № 842 от 24.09.2013 г. (ред. 07.06.2021 г.), а её автор Демьянов Георгий Сергеевич заслуживает присвоения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.9 – Физика плазмы.

Отзыв составил:

официальный оппонент,
главный научный сотрудник
сектора теоретической астрофизики
ФТИ им. А.Ф. Иоффе,
д.ф.-м.н.

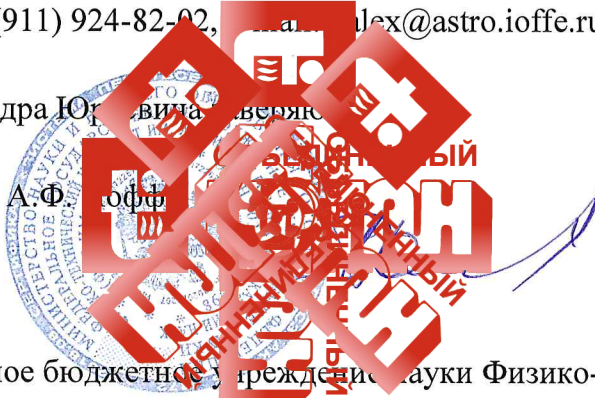


Потехин Александр Юрьевич

адрес: 194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 26,
тел: +7 (812) 292-71-80, +7 (911) 924-82-02, alex@astro.ioffe.ru

Подпись Потехина Александра Юрьевича

Учёный секретарь ФТИ им. А.Ф. Иоффе,
к.ф.-м.н.



М.И. Патров

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук (ФТИ им. А.Ф. Иоффе),
адрес: 194021, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., д. 26,
тел: +7 (812) 297-22-45, веб сайт: <https://ioffe.ru>, e-mail: post@mail.ioffe.ru.