

ОТЗЫВ

официального оппонента

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

Актуальность темы диссертации.

Теоретическому и экспериментальному исследованию неидеальной плазмы в настоящее время уделяется значительное внимание. Изучение равновесных и динамических свойств неидеальной плазмы необходимо для моделирования астрофизических объектов, взаимодействия излучения с веществом, инерциального термоядерного синтеза.

Теория возмущений неприменима для описания неидеальной плазмы ввиду отсутствия малого параметра, поэтому базовыми для теоретического исследования данного объекта являются методы атомистического моделирования. Применение хорошо зарекомендовавших себя в физике конденсированного состояния методов в данном случае затруднено необходимостью совместного расчета динамики электронной и ионной подсистем с учетом квантового характера движения электронов. Разработка адекватных компьютерных моделей, обладающих высокой вычислительной эффективностью и позволяющих исследовать системы зарядов в широком диапазоне параметров состояния необходима для развития указанного направления физики.

Развитые в диссертационной работе Я. Лавриненко модели и методы дают возможность существенно повысить точность теоретических исследований неравновесной и неидеальной квантовой плазмы в широком диапазоне параметров состояния при сохранении высокой производительности вычислений, что делает данное исследование актуальным.

Научная новизна.

Работа посвящена модификации метода молекулярной динамики волновых пакетов (МДВП), который активно развивается в последние десятилетия. Применение метода затруднено необходимостью учета обменного взаимодействия электронов при расчете связанных молекулярных состояний. Кроме того, сложности возникают при использовании периодических граничных условий для моделирования неограниченных систем при высоких температурах. В диссертации Я. Лавриненко

обсуждаются возможные способы преодоления указанных ограничений. Для описания связанных состояний с учетом обменно-корреляционных эффектов в рамках метода МДВП в работе использовано приближение локальной плотности (LDA). Приближение LDA хорошо себя зарекомендовало в теории твердого тела и квантовой химии, но в расчетах методом МДВП было использовано диссертантом впервые. Это позволило существенно расширить диапазон плотностей вещества, доступных для моделирования. Помимо этого предложен и подробно исследован новый способ описания состояния вещества в рамках модели МДВП с отражающими граничными условиями. С использованием предложенных модификаций метода МДВП были получены новые точки на ударной адиабате дейтерия.

Полученные автором результаты являются **значимыми для науки и практики**, поскольку открывают новые возможности моделирования неидеальной плазмы.

Содержание работы. Общий объем работы составляет 127 страниц текста, включая введение, пять глав, заключение и список литературы который содержит 138 наименований.

Во введении обоснована актуальность темы диссертации, ее научная новизна и теоретическая значимость, изложены положения, выносимые соискателем на защиту.

Первая глава диссертации представляет собой литературный обзор – краткий анализ экспериментальных и теоретических работ по неидеальной плазме и разогретому плотному веществу. В обзоре представлены сведения о экспериментальных работах по измерению оптических свойств плазмы, построению уравнения состояния и изучению релаксационных процессов в плазме. Акцентируется внимание на неприменимости моделей идеальной плазмы для описания результатов экспериментов.

Вторая часть литературного обзора посвящена методам компьютерного моделирования. Для каждого из методов представлено краткое описание и приведены примеры работ где тот или иной метод применялся для изучения свойств неидеальной плазмы. Существенное внимание в обзоре уделено методу МДВП. Этот метод представляет собой метод молекулярной динамики в котором каждый электрон рассматривается не как точечная частица, а как волновой пакет переменной ширины. При этом квантовый характер движения электронов можно учесть без использования псевдопотенциалов взаимодействия между частицами на малых расстояниях.

Во второй главе диссертации описаны подходы, предлагаемые для модификации метода МДВП с использованием теории функционала плотности (МДВП-ФП). Приближение Хартри рассмотрено в качестве

начального. Обменно-корреляционное взаимодействие электронов введено в модель в виде поправки к гамильтониану, которая вычислялась в работе в рамках LDA.

Для ограничения ширины волновых пакетов были использованы отражающие граничные условия и предложены способы минимизации их влияния на исследуемые свойства моделируемой системы.

Третья глава посвящена программной реализации метода МДВП-ФП. Описана процедура расчета электронной плотности и численного интегрирования обменно-корреляционного функционала. Для повышения производительности вычислений использована адаптивная сетка. Программный код оптимизирован для вычислений на графических ускорителях и многопроцессорных системах и интегрирован в пакет атомистического моделирования LAMMPS.

Четвертая глава содержит результаты моделирования водородной и дейтериевой плазмы методом МДВП-ФП. Учет обменного взаимодействия позволил повысить точность при расчете энергии связи атомов в молекуле водорода в сравнении с исходным методом. Результаты расчета уравнения состояния водородной плазмы в диапазоне плотностей $n > 10^{23} \text{ см}^{-3}$ находятся в разумном соответствии с данными, полученными с использованием других методов. При расчете ударной адиабаты дейтерия метод МДВП-ФП продемонстрировал наиболее точное воспроизведение экспериментальных данных в сравнении с другими известными модификациями метода МДВП.

В пятой главе представлены результаты расчета изоэнтропы сжатия дейтерия в диапазоне плотностей 10^{25} см^{-3} и температурной электрон-ионной релаксации. Для расчета изоэнтропы сжатия применен новый подход, основанный на прямом моделировании. Результаты вычислений сравнивались с различными теоретическими и экспериментальными данными. Рассчитанная методом МДВП-ФП изоэнтропа дейтерия хорошо согласуется с результатами расчетов другими методами.

В заключении сформулированы основные результаты работы.

Диссертация написана грамотным языком, имеет четкую структуру и легко воспринимается читателем. Высокая **степень обоснованности и достоверности** полученных результатов подтверждается тщательной проверкой модели: сравнением с известными из литературы результатами вычислений и экспериментов, а также с данными, полученными в рамках хорошо известной и апробированной исходной модели МДВП. В работе убедительно показано, что использование предложенных модификаций МДВП позволяет повысить точность моделирования и получить хорошее согласие с экспериментом.

По представленной диссертационной работе можно сделать следующие **замечания**.

1. В обзорной части диссертации недостаточно внимания уделено квантовым методам молекулярной динамики для неадиабатических процессов.

2. Утверждение о неправомочности использования вириального уравнения состояния в системе с отражающими граничными условиями (стр. 71) требует пояснения.

3. При описании предложенного автором нового метода расчета уравнения изоэнтропы (п. 2.4) не достаточно внимания уделено обратимости процесса сжатия.

4. Ряд опечаток в тексте диссертации. На стр. 109 указывается время температурной релаксации для модельной системы с соотношением масс ионов и электронов $m_i/m_e = 20$ $t = 144$ фс. При этом утверждается, что это «соответствует 13 фс для реальной водородной плазмы». По-видимому, речь идет о 13 пс. Также опечатки найдены на стр. 17, 33, 111.

Отмеченные недостатки не умаляют научной и практической значимости проведенных исследований, а полученные результаты соответствуют поставленным задачам. Диссертационная работа Лавриненко Я. представляет собой завершённое научное исследование, выполненное на высоком профессиональном уровне. Предложенные модели и разработанные программы имеют существенное значение для описания неравновесной и неидеальной квантовой плазмы.

Автореферат соответствует содержанию диссертации. По результатам исследования опубликованы 23 научные работы, в том числе 6 статей в изданиях, рекомендованных ВАК России, а также 17 работ в сборниках тезисов докладов.

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

Отзыв составил кандидат технических наук, старший научный сотрудник отдела физики неидеальной плазмы центра теоретической физики и вычислительной математики акционерного общества «Государственный

научный центр Российской Федерации Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований»

Решетняк Виктор Витальевич

Контактные данные:

тел: +7 (925) 151-0071, e-mail: reshetniak@triniti.ru

Специальность, по которой официальным оппонентом защищена диссертация:

01.02.05 механика жидкости, газа и плазмы.

Адрес места работы:

108840, г. Москва, г. Троицк, ул. Пушкиновых, вл. 12,

Акционерное общество «Государственный научный центр Российской Федерации Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований», Центр теоретической физики и вычислительной математики,

Тел.: +7 (495) 841-53-09, e-mail: liner@triniti.ru

Подпись старшего научного сотрудника отдела физики неидеальной плазмы Акционерного общества "Государственный научный центр Российской Федерации Троицкий институт инновационных и термоядерных исследований", Центра теоретической физики и вычислительной математики В.В. Решетняка удостоверяю:

Ученый секретарь АО «ГНЦ РФ ТРИНИТИ», к.ф.-м.н.



 /А. А. Ежов/