

Отзыв научного руководителя
на диссертационную работу Тимошенко Владимира Андреевича
«Метод представления дискретных переменных для решения
квантовой задачи нескольких частиц», представленную на соискание
ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

Аккуратное описание систем нескольких квантовых частиц является сложной теоретической и вычислительной задачей. Погрешности в потенциалах взаимодействия и вычислительные погрешности могут приводить к значительному изменению получаемых результатов. К настоящему времени разработано достаточно много методов исследования таких систем, однако обнаружение новых эффектов и улучшение экспериментальных результатов требует их постоянного усовершенствования. В частности, хорошо себя зарекомендовали разнообразные вариационные методы, хотя для получения точных результатов они требуют использования больших вычислительных ресурсов.

Диссертация В.А.Тимошенко посвящена совершенствованию и реализации метода дискретных переменных, или DVR-метода. Данный метод основан на определении базисных функций, узлов и весов квадратурных формул таким образом, что значения функций во всех узлах, кроме одного, равны нулю. Это позволяет приближенно диагонализовать оператор потенциальной энергии и, тем самым, существенно сократить время вычисления матричных элементов гамильтониана. С использованием данного подхода в работе исследуются слабосвязные системы нескольких частиц. Полученные результаты демонстрируют высокую эффективность применяемого подхода.

Диссидентом разработан метод расчета квантово-механических систем нескольких частиц, комбинирующий метод конечных элементов и метод представления дискретных переменных. Вычислены уровни энергии слабосвязанных систем, состоящих из нескольких атомов, в частности, Li-He, He₃, Ne₃, Li-He₂. Проведено исследование эффективность применения различных типов квадратурных формул для построения DVR-функций, в частности основанных на полиномах Чебышева, полиномов Якоби и присоединенных полиномов Лежандра. Такие формулы позволяют более точно учесть особенности парных потенциалов на малых расстояниях. Был разработан метод расчета трехчастичных квантово-механических систем для нулевого и ненулевого полного орбитального момента. Проведено сравнение полученных результатов с результатами других авторов, исследована вычислительная эффективность предложенного подхода.

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, приложений и списка литературы. В введении изложены актуальность и

степень разработанности темы исследования, сформулированы научная новизна и практическая значимость работы, приведены цели и задачи и выносимые на защиту положения диссертационной работы. В первой главе приведены теоретические и вычислительные методы, которые применяются для решения квантовой задачи нескольких тел. Важной частью работы являлась разработка метода представления дискретных переменных. Используемый и полученный автором математический аппарат, который был реализован в виде программного кода, приведен во второй главе. В первых разделах главы представлены известные результаты, на основе которых в дальнейшем получены и представлены новые представления. В третьей главе приведены результаты вычислений, выполненных при помощи алгоритмов из двух первых глав. Описана программная реализация метода и используемые потенциалы. Приведены результаты исследования квантовых систем. В заключении подведены итоги диссертационной работы.

Автором было опубликовано три научные работы в рецензируемых журналах, рецензируемых в наукометрических базах данных Scopus и Web of Science. Ещё одна работа принята к публикации и должна выйти в 2022 году. Апробация результатов работы прошла на 5 международных конференциях. Во время учебы в аспирантуре докторант участвовал в работе нескольких грантов РФФИ.

Работу докторанта я оцениваю высоко. Его отличает большая самостоятельность, хорошее владение компьютерными средствами и методами, высокая ответственность. За время работы над докторской степенью В.А. Тимошенко серьезно вырос как квалифицированный исследователь.

Я полагаю, что Тимошенко Владимир Андреевич обладает квалификацией, достаточной для присвоения ему степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика. Его работа удовлетворяет всем требованиям, установленным Приказом от 19.11.2021 № 11181/1 «О порядке присуждения учёных степеней в Санкт-Петербургском государственном университете».

Научный руководитель:

Яревский Евгений Александрович

Доктор физ.-мат. наук,

профессор кафедры вычислительной физики СПбГУ

ПОДПИСЬ РУКОЙ

ЗАВЕРЯЮ. ВЕДУЩИЙ СПЕЦИАЛИСТ

ОТДЕЛА КАДРОВ

Н. В. САФРОНОВА



18.08.2022