

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Беляева Андрея Константиновича на диссертацию

Тимошенко Владимира Андреевича на тему «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.

В диссертационной работе Тимошенко В. А. исследованы квантовые системы двух и трех частиц с малыми энергиями связи. Исследования таких систем являются актуальными. Задача нахождения энергий связи и волновых функций оказывается весьма сложной. При высокой погрешности вычислений или неточности в потенциалах взаимодействия результат может сильно отличаться от правильного. Для получения точных результатов необходимы значительные вычислительные ресурсы и применение разнообразных подходов и методов решения задачи. Одним из таких методов является метод дискретного представления переменных (Discrete Variable Representation, DVR), который описан в рассматриваемой диссертации и применен автором для расчетов слабосвязанных молекулярных систем. Алгоритм, предложенный диссертантом, показал свою эффективность, позволив существенно сократить время вычислений. При этом точность полученных результатов не ниже, чем у распространенных методов, применяемых в работах других авторов.

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения, четырех приложений, списка литературы из 115 наименований и включает 13 рисунков.

Во введении обосновывается актуальность темы работы, степень разработанности темы исследования, научная новизна и практическая значимость диссертационной работы, формулируются цели и задачи работы, приводятся основные результаты и положения, выносимые на защиту. Там же указаны статьи и конференции, в которых представлены полученные результаты. Центральное место во введении занимает описание места метода DVR в теоретической физике.

Первая глава посвящена описанию и разработке теоретических методов, используемых в дальнейших главах для решения квантовой задачи нескольких тел. Вначале кратко описаны известные подходы: решение уравнения Шредингера, уравнения Фаддеева, уравнения Хартри, использование гиперсферических координат, разложение по Д функциям Вигнера, приближение (или подход) Борна-Оппенгеймера, метод комплексного вращения.

Центральной главой диссертации является вторая глава, в которой подробно изложена основная идея функций DVR и теория применения этих функций непосредственно в работе. В этой же главе описан полученный автором математический аппарат для различных вариантов метода дискретного представления переменных с использованием полиномов Лежандра, Чебышева, Якоби, присоединенных полиномов Лежандра, а также формализм применения метода DVR к задачам двух и трех тел.

Несомненным достоинством диссертации является реализация развитого метода в виде программного кода, также приведенного во второй главе.

В третьей главе развитый метод применен для исследования ряда практических систем, например, димеры гелия, тримеры гелия и неона, различные изотопы взаимодействия атома лития с димером гелия (LiHe_2). Указанные исследования проведены для слабосвязанных состояний двух- и трехатомных молекул с нулевым и ненулевым полным угловым моментом. В этой же главе обсуждается эффективность предложенного алгоритма и проводится сравнение результатов, полученных предложенным методом с результатами, полученными путем применения других вариантов метода DVR. Проведенное в работе исследование использования различных полиномов в качестве функций DVR, полиномов Чебышева, полиномов Якоби, присоединенных полиномов Лежандра, несомненно повышает ценность всей работы, и полученные выводы будут использованы другими исследователями.

В заключении приведены основные результаты, полученные в ходе выполнения диссертационного исследования.

Результаты работы опубликованы в 3 статьях в журналах, входящих в перечень ВАК и базы данных РИНЦ, Web of Science и Scopus, а также апробированы на 5 конференциях.

В целом диссертационная работа производит хорошее впечатление, но, к сожалению, не лишена недостатков. В связи с этим нужно сделать следующие замечания.

1. При описании приближения Борна-Оппенгеймера автор диссертации пишет, что ядерную волновую функцию, зависящую как от ядерных, так и от электронных координат, см., например, формулу (1.1.23) раздела 1.1.4 на странице 19. Тот факт, что электронная волновая функция зависит и от электронных (как от переменных), и от ядерных координат (как от параметров) является следствием того, что на первом этапе рассматривается электронная задача при фиксированных ядрах, но ядерная волновая функция является функцией только ядерных координат. Неясным остается также различает ли диссертант приближение и подход Борна-Оппенгеймера.
2. В разделе «1.4 Метод комплексного вращения» описан алгоритм, с помощью которого можно использовать разработанный диссертантом метод для поиска резонансных состояний. Исследования подобных состояний могли бы значительно увеличить ценность данной диссертационной работы.
3. Метод дискретного представления переменных применен только по одной, угловой, переменной. Во многих случаях возникает необходимость учитывать многомерность проблемы, в связи с этим представляется, что диссертант мог бы провести также исследование эффективности применения многомерного, как минимум двумерного DVR метода (см. работы [70], [71] списка литературы).

4. В диссертации отмечается, что функции DVR могут быть полезны при исследованиях связанных состояний и рассеяния, однако в самой диссертации функции DVR применяются только к расчетам связанных состояний. Было бы очень ценно, если бы диссертант применил развитый им математический и вычислительный аппарат к исследованиям рассеяния, включая неадиабатические переходы в ядерной динамике.

Приведенные замечания не снижают достоинства диссертации, не искажают её смысл и не снижают ценность представленной работы. Полученные в работе результаты являются интересными и важными. Разработанный диссертантом подход может быть использован как в рамках программы ACESPA, так и взят за основу другими авторами при реализации алгоритмов решения задачи нескольких частиц.

Оценивая диссертацию в целом, отметим, что она является научно-квалификационной работой, в которой содержится решение научной задачи, имеющей существенное значение для развития теоретической физики. Диссертация написана автором самостоятельно, обладает внутренним единством, содержит новые научные результаты и положения, выносимые на защиту, и свидетельствует о личном вкладе автора диссертации в науку.

Таким образом, диссертация Тимошенко Владимира Андреевича на тему: «Метод представления дискретных переменных для решения квантовой задачи нескольких частиц» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 19.11.2021 № 11181/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», а соискатель Тимошенко Владимир Андреевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика. Нарушения пунктов 9 и 11 указанного Порядка в диссертации не обнаружены.

Член диссертационного совета

доктор физико-математических наук, профессор,
главный научный сотрудник, заведующий
кафедрой теоретической физики и астрономии
института физики Федерального
государственного бюджетного образовательного
учреждения высшего образования
«Российский государственный педагогический
университет им. А. И. Герцена»

Беляев Андрей Константинович

04.04.2023 г.

РГПУ им. А.И. ГЕРЦЕНА
подпись А.К. Беляев

удостоверяю «05» 04 2013
Отдел кадров управления по работе с кадрами
и организационно-контрольному обеспечению



Ю. В. Лагун