

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Мележика Владимира Степановича 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.

Метод представления дискретных переменных (DVR), предложенный более 40 лет назад для кванто-химических расчетов, получил широкое распространение при количественном описании атомных, молекулярных и ядерных систем благодаря его относительной простоте реализации и высокой вычислительной эффективности. В этой связи мне представляется вполне обоснованным вывор диссертантом этого метода для создания на его основе эффективной вычислительной схемы для численного исследования слабосвязанных двух- и трех-атомных систем, которые в последние годы интенсивно исследуются экспериментально и теоретически в связи с открытием резонансов Ефимова в квантовых газах. Малая энергия связи таких систем, их аномально большие размеры и резонансный характер взаимодействия в таких системах требуют разработки специальных вычислительных методов, учитывающих особенности задачи, и позволяющих выполнять расчеты на уровне достаточном для интерпретации и планирования экспериментов в этой области. Поэтому **актуальность и значимость** темы диссертационной работы вполне обоснована.

Научная новизна диссертационной работы связана с разработкой диссертантом новой вычислительной схемы на основе представления дискретных переменных и метода конечных разностей для расчета спектров слабосвязанных двух- и трех-атомных систем. Построены DVR-функции по различным типам ортогональных полиномов. Выполнен анализ эффективности применения таких полиномов в зависимости от типа задачи. Полученные результаты продемонстрировали высокую эффективность рассматриваемого подхода по сравнению с другими методами. Здесь следует отметить, что несмотря на широкое применение метода DVR за рубежом, в России этот метод практически не используется (за исключением работ В.С. Мележика и В.В. Серова). Работы В.А. Тимошенко, несомненно, несколько устраниют этот пробел и вносят весомый вклад в популяризацию этого эффективного метода у нас в стране.

Практическая значимость диссертационной работы состоит в том, что разработанная в ее рамках вычислительная схема на основе DVR и метода конечных элементов позволяет существенно ускорить расчеты слабосвязанных двух- и трех-атомных систем. Диссертантом разработан алгоритм с высокой вычислительной эффективностью, с помощью которого можно проводить расчеты спектров и резонансных состояний трехчастичных квантовых систем для анализа экспериментальных данных в этой области.

Обоснованность полученных результатов обусловлена тем, что при выполнении программы исследований применялись современные широко апробированные теоретические подходы и численные методы, отработанные при решении других задач. **Достоверность** полученных результатов не вызывает сомнений. Необходимо отметить,

что **личный вклад** В.В. Тимошенко в исследованиях, отраженных в диссертации, является определяющим.

Диссертация состоит из Введения, трех глав, Заключения, приложения и списка литературы.

Во **Введении** обсуждается актуальность и степень разработанности темы исследования, научная новизна и практическая значимость работы. Также сформулированы цели и задачи диссертации и выносимые на защиту положения. Указаны статьи, составившие основу диссертационной работы, и приведен список конференций и семинаров, на которых докладывались полученные результаты.

В **первой главе** диссертации дан достаточно развернутый обзор теоретических и вычислительных методов, которые применяются для решения квантовой задачи нескольких тел. Вначале кратко описаны наиболее востребованные подходы, применяющиеся в этой задаче. Далее, более подробно изложены в едином формализме подходы и методы, которые непосредственно используются в диссертации.

Вторая глава посвящена методу DVR. Дан обзор развития метода применительно к решению одномерного и двумерного уравнений Шредингера и представлены известные формулы DVR, на основе которых диссертант получены новые DVR аппроксимации для полиномов Чебышева и Якоби, а также проведена оптимизация DVR для присоединенных полиномов Лежандра. Эти аппроксимации реализованы в виде программного кода, который использовался в конкретных расчетах.

В **третьей главе** описана вычислительная схема для расчета трех-атомных систем на основе DVR по угловой переменной и методе конечных элементов по радиальным переменным, при помощи алгоритмов, описанных в первых двух главах. Приведены результаты расчетов некоторых атомных тримеров, которые сравниваются с известными расчетами других авторов. Здесь также проведено исследование сходимости различных DVR разложений применительно к рассмотренным задачам.

В **заключении** сформулированы основные результаты диссертационной работы. В **приложении** приведены параметры потенциалов междуатомных взаимодействий и их графики, а также важные детали программного кода для вычисления потенциалов, DVR-функций и матричных элементов в представлении дискретных переменных.

Диссертация написана хорошим языком, с небольшим количеством опечаток и с приведением всех необходимых формул. Большое количество численных результатов представлено в виде таблиц и графиков. Проведенные исследования описаны подробно, с обоснованием основных положений и аккуратным цитированием использованной литературы. Показано хорошее знание современного состояния исследований в данной области, и на данном фоне ясно видна новизна и значимость проведенных исследований.

По содержанию диссертации есть следующие **замечания**:

- 1) На стр.4 Введения обсуждаются «слабосвязанные системы», из которого складывается впечатление, что физическая природа таких систем по версии автора - «слабый потенциал взаимодействия». Однако в большинстве известных исследованных слу-

чаев слабосвязанных систем в атомной, молекулярной и ядерной физике, сюда же относятся и рассмотренные диссертантом примеры, физической причиной «слабосвязанности» квантовой системы является малость энергии связи, а не слабость потенциала взаимодействия.

- 2) В утверждении «Вычислены уровни энергии слабосвязанных систем, состоящих из нескольких атомов: He2, 6Li-He, 7Li-He, He3, Ne3, 6Li-He2, 7Li-He2» в Заключении нескольких атомов следует заменить на двух и трех атомов. Похожие утверждения содержатся и во Введении.
- 3) Обнаружен ряд опечаток, например, в ссылке [71] следует убрать «Санкт-Петербург».

Сделанные замечания, однако, не снижают общей высокой оценки диссертации.

В целом, диссертация представляет собой законченное научное исследование – научно-квалификационную работу, в которой содержится решение задачи, имеющей существенное значение для теоретической физики. Основные результаты диссертации докладывались на международных и российских конференциях и семинарах и опубликованы в ведущих российских и международных научных журналах.

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», 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,
ведущий научный сотрудник, Лаборатории
теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова
Объединенного института ядерных иссле-
дований, ул. Жолио-Кюри, д.6, г. Дубна,
Московская обл. 141980
тел.: 8 (496) 216-36-15
e-mail: melezhik@theor.jinr.ru

Мележик

Мележик Владимир Степанович

04.04.2023

Подпись члена диссертационного совета Мележика В.С. заверяю

Ученый секретарь ЛТФ ОИЯИ

А.В. Андреев

