ОТЗЫВ

Председателя диссертационного совета Яковлева Сергея Леонидовича 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.

Успех теоретического исследования квантовых систем с самого начала развития теории критически зависел от применяемых методов решения уравнения Шредингера, развитие которых шло в параллель с разработкой собственно физического формализма. И в настоящее время наиболее трудные задачи квантовой физики часто требуют разработки новых численных подходов, позволяющих преодолеть критически важные проблемы существующих методов решения. Физика квантовых систем нескольких частиц является одним из источников таких задач прежде всего потому, что относительно небольшое количество частиц и, соответственно, степеней свободы открывает возможность нахождения максимально точного решения уравнения Шредингера. Однако, и в этом случае имеется класс систем (в основном трехчастичных), для которых эффективность применяемых методов решений играет существенную роль – это слабо связанные молекулярные системы, состоящие из атомов гелия, лития, неона. Потенциалы взаимодействия между компонентами таких систем обладают сильным отталкиванием на малых расстояниях, очень мелкой потенциальной ямой и медленно убывающей (Ван-дер-Ваальсовой) частью на больших расстояниях. Совокупность этих свойств приводит к сильным корреляциям на малых расстояниях, очень слабой связи соответствующих двух и трех частичных комплексов и аномально большим размером области взаимодействия. Стандартные вычислительные методы для решения уравнения Шредингера, либо терпят неудачу, либо приводят к требованию использования неоправданно больших суперкомпьютерных ресурсов. Данная диссертация посвящена разработке методов решения уравнения Шредингера для систем нескольких частиц, призванных значительно уменьшить как вычислительные затраты, так и скорость выполнения алгоритма решения.

В свете сказанного **актуальность и значимость** темы диссертационной работы не вызывает сомнений.

Научная и практическая ценность проведенных автором диссертации исследований несомненна. В диссертации представлено завершенное научное исследование, результаты которого важны, как для квантовой теории систем нескольких

частиц в целом, так и для физики квантовых трехчастичных систем при ультранизких энергиях. Результаты диссертации могут быть использованы при проведении дальнейших экспериментальных и теоретических исследований в области физики ультрахолодных газов, проводимых в СПбГУ, НИЯФ МГУ, ИЯФ СО РАН, ИФВЭ (Протвино), ИЯИ РАН (Москва), ПИЯФ (Гатчина) и других российских и зарубежных научных центрах. **Новизна результатов** диссертации очевидна.

Обоснованность полученных результатов обусловлена тем, что при выполнении исследований применялись строгие математические методы. **Достоверность** полученных результатов не вызывает сомнений. Необходимо отметить, что **личный вклад** В.А. Тимошенко в исследованиях, отраженных в диссертации, был определяющим.

Диссертационная работа состоит из введения, трех глав, заключения, приложения и библиографии.

Во введении автор подробно описывает актуальность, степень разработанности, новизну и практическую значимость темы исследования. Также во введении приведены цели и задачи диссертационной работы и тезисы, выносимые на защиту:

- разработка метода расчета энергий связи квантово-механических систем нескольких частиц, комбинирующий метод конечных элементов и метод представления дискретных переменных (ПДП);
- исследование эффективности использования различных типов квадратурных формул для построения ПДП-функций, в частности основанных на полиномах Чебышева, полиномах Якоби, присоединенных полиномах Лежандра;
- построение эффективного метода расчета трехчастичных квантово-механических систем для нулевого и ненулевого полного орбитального момента;
- реализация алгоритма вычисления матричных элементов в программе решения трехчастичных квантовых задач ACESPA при помощи ПДП-метода, тестирование реализованного численного метода;
- расчет уровней энергии слабосвязанных систем, состоящих из нескольких атомов: He_2, 6^Li–He, 7^Li–He, He_3, Ne_3, 6^Li–He_2, 7^Li–He_2;
- оценка эффективности применения ПДП-метода, сравнение результатов с другими авторам, а также времени и сходимости при использовании разложения по ПДП-функциям и стандартного разложения.

Первая глава является по существу вводной, в которой приведено краткое описание общеизвестных методов решения уравнения Шредингера для систем нескольких частиц. Здесь также вводятся используемые далее обозначения.

Во второй главе собраны главные аналитические результаты, на которых основан разработанный в диссертации метод решения как одномерных, так и трехмерных дифференциальных уравнений, к которым сводится уравнение Шредингера в представлении полного момента (или более подробно представлении D-функций Вигнера). В целом метод диссертанта – это метод конечных элементов с включением в него специального базиса представления дискретных переменных (ПДП) по угловой переменной. Автор показывает, что последнее позволяет значительно сократить трудоемкость вычисления матричных элементов потенциалов взаимодействия в рамках вариационной стадии метода конечных элементов благодаря дельта-образной природе ПДП базисных функций. Исходя из общей концепции, автор строит несколько вариантов таких ПДП базисных функций на основе ортогональных полиномов таких как полиномы Лежандра, Якоби и Чебышёва. Соответствующие ПДП базисные функции призваны наиболее аккуратно отражать особенности используемых в дальнейшем потенциалов взаимодействия между частицами.

В третьей главе решаются задачи вычисления энергий связи прежде всего трех атомных слабосвязанных систем с помощью разработанной диссертантом программы численного решения уравнения Шредингера в представлении D-функций Вигнера методом конечных элементов с ПДП базисными функциями, построенными во второй главе. Здесь вначале автор анализирует некоторые особенности межатомных потенциалов, применяемых для описания взаимодействия между легкими атомами. На примере экстремально слабосвязанного димера гелия He_2 (энергия связи $E = -1.3096$ мК) автор убедительно демонстрирует преимущество ПДП подхода по сравнению со стандартным методом разложения по базису полиномов Лагерра при вычислении матричных элементов потенциала взаимодействия. В основной части главы приводятся результаты вычислений энергий связи симметричных тримеров гелия 4^He_3 и неона Ne_3 и несимметричных тримеров Li-He. Во всех случаях метод диссертанта демонстрирует надежные и достаточно быстро сходящиеся результаты для энергий связи основного и возбужденных состояний.

Диссертационная работа не лишена недостатков. Помимо заметного количества недочетов грамматического и стилевого характера, на которых вряд ли стоит останавливаться подробно, главным недостатком представляется излишняя лаконичность описания

разработанного автором метода решения уравнения Шредингера: сочетание метода конечных элементов со специальным ПДП базисом. Расширенное изложение этого вопроса позволило бы дать автору более глубокое обоснование тех преимуществ, которые предоставляет ПДП базис. Впрочем, указанные недостатки не влияют на общее положительное впечатление от диссертационной работы.

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.

Председатель диссертационного совета

доктор физико-математических наук,
профессор кафедры вычислительной
физики СПбГУ

С.Л. Яковлев

Дата: 04.04.2023