

## ОТЗЫВ

на автореферат диссертации  
Артема Александровича Даньшина

«Разработка численных методов решения задач квантовой механики на основе синтеза стохастических и детерминистских подходов», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.1.2 – «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ»

Диссертационная работа А. А. Даньшина посвящена развитию численных методов квантовой химии. Они состоят в решении уравнения Шрёдингера для сложных атомов и молекул с целью предсказания их свойств. В связи с развитием квантовых технологий и науки о новых материалах, данная ставшая уже классической тема сохраняет свою актуальность. В автореферате особенно подчеркивается, что в России недостаточно развиты программные продукты, связанные с квантовомеханическими расчетами атомов и молекул, в основном приходится пользоваться иностранными программными продуктами. К достоинствам работы относится создание программного комплекса на основе полученных результатов.

Автореферат дает хороший обзор проблематики современных детерминированных и стохастических методов таких расчетов и краткое изложение полученных результатов. Результаты, выносимые на защиту, связаны с разработкой трех методов решения уравнения Шрёдингера: на основе метода Монте-Карло и на основе детерминированных методов Хартри-Фока и Кона-Шэма. Также разработана математическая модель учета межэлектронных корреляций в методе Хартри-Фока, полученных из расчета методом Монте-Карло, что и объят название диссертации, связанное с синтезом детерминированных и стохастических методов.

Также диссертация содержит еще одну главу, хоть ее результаты и не вынесены в основные, в которой опровергаются некоторые выводы классической работы Ф. Хунда 1927 г. Конечно, выводы о неверности классических результатов нужно делать с большой осторожностью, но если эти выводы справедливы, то, безусловно, это очень интересно.

В качестве небольшого замечания можно указать на то, что из формулировки первого результата, выносимого на защиту, непонятно, в чем его новизна. Говорится о разработке варианта метода Монте-Карло. Хоть в тексте автореферата и приводятся некоторые сведения, но все же лучше было подчеркнуть, в чем основная отличительная черта этого варианта, которая выделяет его из других вариантов хорошо известного метода Монте-Карло, т.е. что, собственно, создает этому результату новизну. Это замечание не снижает ценности и достоинств диссертации.

Результаты диссертации важны и интересны и говорят о том, что ее автор – сложившийся высококлассный специалист в области квантовомеханических расчетов.

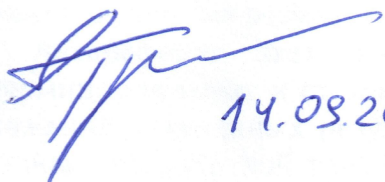
Результаты диссертации опубликованы в известных российских и зарубежных научных журналах, посвященных данной тематике, и представлены на российских и международных научных конференциях.

На основании описания диссертационной работы в автореферате можно заключить, что работа соответствует критериям п. 9 Положения о присуждении ученых степеней, предъявляемым к кандидатской диссертации.

Антон Сергеевич Трушечкин  
д.ф.-м.н., в.н.с. МИАН им. В.А. Стеклова

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Математический институт им. В.А. Стеклова Российской академии наук  
119991 Москва, ул. Губкина, д. 8  
[trushechkin@mi-ras.ru](mailto:trushechkin@mi-ras.ru)

Я, Антон Сергеевич Трушечкин, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой диссертации Артема Александровича Даньшина, и их дальнейшую обработку.

  
14.09.2023

  
Заведующий  
ОТДЕЛОМ КАДРОВ  
УСАЧЕВА О. Г.

