

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Данышина Артема Александровича

«Разработка численных методов решения задач квантовой механики на основе синтеза стохастических и детерминистских подходов», представленной на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

На сегодняшний день не существует универсального подхода к решению важнейшей для практических целей квантово-механической задачи. Вводя определенные приближения, можно построить квантово-механические модели того или иного химического явления. Основные приближения касаются электронного движения, которое является коррелированным, в чем состоит основная трудность определения волновых функций для многоэлектронных систем. Такие приближения далеко не всегда позволяют получить решение с требуемой точностью в течение приемлемого времени из-за большой вычислительной сложности. Поэтому очевидно, что нужно находить и применять принципиально новые подходы. Настоящая работа предполагает разработку и программную реализацию именно таких специализированных методов и моделей.

В автореферате диссертации Данышина А.А. отмечены разработанные автором вычислительные методы для моделирования многоэлектронных систем: вариант метода Монте-Карло решения интегрального уравнения Шредингера, конечно-разностный метод решения уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма, модель учета кулоновских корреляций в методе Хартри-Фока. Эти методы были реализованы в виде комплекса программ, который в будущем при соответствующей доработке может выступать как самостоятельный инструмент для расчетов квантовой химии, так и в качестве «полигона» для исследования квантово-химических моделей, включая разработку и верификацию. Корректность полученных результатов подтверждается качественным и количественным сопоставлением с экспериментальными данными, расчетами других исследователей, решением модельных задач. Текст автореферата достаточно полно отражает материалы диссертации, основные результаты имеют теоретическое и практическое значение.

Диссертационная работа является оригинальным законченным самостоятельным исследованием, соответствует критериям п.9 Положения о

порядке присуждения ученых степеней, утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 г. № 842, а Даньшин Артем Александрович заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Хохлов Николай Игоревич

Доктор физико-математических наук по специальности 05.13.18 — Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ, доцент

Заведующий кафедрой информатики и вычислительной математики

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»

141701, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, д.9

Телефон: +7 (495) 408-42-54

Электронная почта: info@mipt.ru

Я, Хохлов Николай Игоревич, даю согласие на включение своих персональных данных в документы, связанные с защитой диссертации Даньшина Артема Александровича, и их дальнейшую обработку.

«08» сентября 2023 г.

_____/ Н.И. Хохлов

Подпись руки
ЗАВЕРЯЮ:
Администратор канцелярии
Административного отдела
О. А. КОРАБЛЕВА

Хохлов Н.И.

