

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертацию

Даньшина Артема Александровича

«Разработка численных методов решения задач квантовой механики на основе

синтеза стохастических и детерминистских подходов»,

представленную на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

по специальности 1.2.2 — Математическое моделирование,

численные методы и комплексы программ

Диссертационная работа Даньшина А.А. посвящена решению важной и актуальной задачи — разработке и численной реализации программного инструмента расчета электронной структуры. Существующие методы квантово-механического моделирования свойств атомов и молекул обладают большой вычислительной сложностью, когда требуется определить электронную плотность и другие параметры с высокой точностью, особенно для систем с большим числом электронов. Поэтому достаточно важным в данной области является как совершенствование существующих подходов с точки зрения ускорения вычислений, так и создание принципиально новых методов и моделей.

Решение квантово-механической задачи об описании систем многих сильно взаимодействующих частиц является исключительно важным как с точки зрения фундаментальной науки, так и прикладной. Одна из основных фундаментальных проблем — удовлетворительное описание систем фермионов, антисимметрия волновых функций которых до сих пор препятствует построению достаточно простого и физически прозрачного метода нахождения состояний таких систем. С практической точки зрения возможность рассчитывать с высокой точностью энергию систем фермионов невозможно переоценить. Такая возможность открывает новые перспективы во многих областях вычислительной физики, химии и даже биохимии, включая материаловедение, расчеты констант скоростей химических реакций, новые разработки в области фармацевтики.

Диссертационная работа состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы.

Во введении произведена классификация существующих методов, обоснована актуальность диссертационной работы, сформулированы цель и научная новизна исследований, показана теоретическая и практическая значимость полученных результатов, а также представлены выносимые на защиту научные положения.

В первой главе представлен разработанный вариант метода Монте-Карло численного решения интегрального стационарного уравнения Шредингера, а также способ построения узловых поверхностей для ряда s -электронных систем. Обсуждается реализация разработанного алгоритма в форме программного модуля, приводятся результаты верификации для s -электронных систем.

Во второй главе приводится описание созданного алгоритма решения уравнений Хартри-Фока и Кона-Шэма методом конечных разностей, в основе которого лежит преобразование спектра оператора данных уравнений. Данное преобразование позволило сразу вычислять основное состояние системы, что привело к ускорению вычислений по сравнению со стандартными методами решения задач на собственные значения. Обсуждается реализация алгоритма в форме программного модуля, приводятся результаты верификации для одномерной и трехмерной сетки.

Третья глава посвящена исследованию близкого к точному решения уравнения Шредингера для легких атомов, полученного разработанным методом Монте-Карло, с целью создания модели учета межэлектронных корреляций в методе Хартри-Фока. Проведенный анализ позволил установить общий вид кулоновских корреляций, с помощью которого удалось уменьшить ошибку вычислений методом Хартри-Фока, не теряя при этом в быстродействии.

В четвертой главе исследуется, какие взаимные конфигурации электронов на частично-заполненных оболочках удовлетворяют постулату Дирака быть собственной функцией оператора квадрата полного орбитального момента атома.

В заключении сформулированы основные результаты диссертационной работы.

Научная новизна работы заключается в разработке и реализации варианта метода Монте-Карло численного решения интегрального стационарного уравнения Шредингера, в разработке и реализации метода решения уравнений

Хартри-Фока и Кона-Шэма, основанном на преобразовании спектра оператора данных уравнений, а также в предложенной математической модели учета межэлектронных корреляций в методе Хартри-Фока.

Достоверность полученных результатов обусловлена сопоставлением аналитических оценок, численных расчетов, экспериментальных и литературных данных, подтверждается апробацией на различных конференциях и семинарах, а также наличием публикаций в рецензируемых научных изданиях.

Теоретическая значимость работы заключается в создании новых математических моделей, методов и алгоритмов моделирования многоэлектронных систем, а также их реализации в программном комплексе. Практическая значимость следует из теоретической и проявляется в том, что представленные в работе результаты при их дальнейшем развитии способны значительно улучшить существующие методы квантово-химических расчетов и расширить их область применимости для предсказания свойств веществ.

Замечания по диссертационной работе:

1. В работе рассматриваются только взаимодействия кулоновского типа, а спин-орбитальные взаимодействия не рассматриваются. Лучше, чтобы это ограничение было указано явно. Релятивистские поправки вносят заметный вклад в полную энергию тяжелых элементов, поэтому в будущем стоит уделить внимание этому вопросу.

2. Во второй и третьей главе при описании результатов вычислений по созданному программному комплексу не указано, при каком шаге и количестве узлов расчетной сетки они были получены. Также во второй главе, в отличие от первой, не слишком подробно описана постановка граничных условий для решаемых уравнений.

3. Неясно, в сравнении с чем приведена величина ошибки расчета на Рисунке 3.9. Также стоит отметить, что слишком мелкий шрифт подписей на графиках затрудняет восприятие их содержания.

Перечисленные замечания не влияют на общую положительную оценку работы.

Таким образом, диссертация выполнена на высоком научном уровне, имеет актуальное научное значение, связанное с разработкой численных методов расчета электронной структуры, а также содержит новые,

оригинальные и важные для практики результаты. Текст автореферата достаточно полно отражает содержание диссертации.

Диссертационная работа Даньшина Артема Александровича является законченным научным исследованием, содержание и результаты которого полностью соответствуют паспорту научной специальности 1.2.2 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ» и требованиям п.9 Постановления Правительства РФ от 24.09.2013 № 842 (ред. от 26.09.2022) «О порядке присуждения ученых степеней», а ее автор, Даньшин Артем Александрович, заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.2.2 — «Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ».

Официальный оппонент

доктор физико-математических наук, доцент,

заведующий лабораторией фотоники и органической электроники

Центра биофотоники Института общей физики им. А. М. Прохорова РАН

ИОФ РАН

119991 Россия, г. Москва, ул. Вавилова, д. 38

Телефон: +7 (499) 503-87-75

E-mail: office@gpi.ru



Чаусов Денис Николаевич

«19» сентября 2023 г.

ПОДПИСЬ Чаусова Д.Н.
ЗАВЕРЯЮ
СЕКРЕТАРЯ ИОФ РАН
ГЛУШКОВ В.В.
2023 г.

