

ОТЗЫВ

на автореферат диссертации Васильченко Александра Анатольевича
"Теоретическое исследование коллективных явлений в электронных и
электронно-дырочных системах в низкоразмерных структурах"

Для проведения диссертационных исследований автором были разработаны методы решения системы уравнений Кона-Шэма.

Разберем эти методы.

1. Метод приближенного аналитического решения уравнения Шредингера.

В пункте "Основные положения и результаты, выносимые на защиту" на стр. 5 автореферата автор пишет:

"Предложен метод приближенного аналитического решения нелинейного уравнения Шредингера".

Для иллюстрации этого метода рассмотрим следующее уравнение Шредингера (стр. 53 диссертации, формулы (2.12),(2.16),(2.13), формула для ε – без номера и стр. 7-8 автореферата, формулы (3),(5),(6), формула для n упущена):

$$\left(-\frac{\mu}{m} \frac{d^2}{dz^2} + V(\psi_i, z)\right) \psi_i(z) = E_i \psi_i(z), \quad (1)$$

где

$$V(\psi, z) = \frac{d(n\varepsilon)}{dn}, \quad \varepsilon = Kn^{-1/3}, \quad n = N\psi^2. \quad (2)$$

Рассмотрим функцию $\psi(z) = \exp(-\lambda z^2)$. Если функция V , входящая в уравнение (1), квадратична по z , то при подходящем выборе параметра λ функция $\psi(z)$ удовлетворяет уравнению (1).

Ключевым моментом предлагаемого автором метода является замена функции V ее квадратичной составляющей $\tilde{V}$.

Подставив функцию $\psi(z)$ в формулы (2), получим:

$$n = N \exp(-2\lambda z^2), \quad \varepsilon n = Kn^{2/3}, \quad \frac{d(n\varepsilon)}{dn} = 2/3 Kn^{-1/3} = 2/3 KN^{-1/3} \exp(2/3 \lambda z^2),$$

$$V = 2/3 KN^{-1/3} (1 + 2/3 \lambda z^2 + 2/9 \lambda^2 z^4 + \dots), \quad \tilde{V} = 2/3 KN^{-1/3} \cdot 2/3 \lambda z^2.$$

Заметим, что

а) функция $\tilde{V}$ сильно отличается от V , поэтому трудно ожидать, что функция $\psi(z)$ приближает какую-либо из функций $\psi_i(z)$ (нужно, чтобы приближалась $\psi_0(z)$);

б) потенциал $\tilde{V}$ не удовлетворяет условиям (2), т.е. пара функций $\psi(z)$ и $\tilde{V}$ не является решением задачи (1)-(2) с физикой, определяемой соотношениями (2);

в) ссылка автора на "неплохое согласование с экспериментальными данными" (стр. 55 диссертации и стр. 9 автореферата) неубедительна и противоречит главной идее диссертации – максимально полному учету "межчастичного взаимодействия" (стр. 4 автореферата, "Основные научные задачи работы") за счет адекватного выбора потенциала V .

2. Численный алгоритм решения системы уравнений Кона-Шэма.

В автореферате автор подчеркивает важность разработанного алгоритма решения системы уравнений Кона-Шэма:

– в пункте "Научная новизна" на стр. 4:

"Создан и реализован на ЭВМ уникальный алгоритм решения уравнений Кона-Шэма для двумерных квантовых точек с большим числом электронов (до тысячи электронов) в сильном магнитном поле".

– в пункте "Научная и практическая значимость работы" на стр. 5:

"Нами разработан уникальный алгоритм решения нелинейного уравнения Шредингера для двумерных электронов с большим числом электронов (до тысячи электронов)".

– в пункте "Личный вклад автора в диссертационную работу" на стр. 6:

"Участие автора заключалось ... в разработке и реализации на ЭВМ алгоритмов решения уравнений Кона-Шэма для квантовых точек, квантовых ям и квантовых проволок".

В п. 5.2 на стр. 161 диссертации автор пишет: "Нами разработан и реализован на ЭВМ эффективный алгоритм численного решения уравнения Шредингера из системы уравнений Кона-Шэма (5.2)-(5.7). Предлагаемый алгоритм протестирован и является более эффективным по сравнению со стандартным методом диагонализации".

Ни в этом параграфе, ни в других нет ни описания предложенного алгоритма, ни текста программы, ни результатов тестовых расчетов с демонстрацией его эффективности.

ВЫВОД

Все теоретические результаты в диссертации получены на основе решения систем уравнений Кона-Шэма.

Для этого автор применял следующие методы:

1. Предложенный автором метод приближенного аналитического решения нелинейного уравнения Шредингера;

2. Численный метод на основе "уникального" алгоритма, разработанного и реализованного на ЭВМ автором.

Однако, предложенный метод приближенного аналитического решения основан на замене потенциала в уравнении Шредингера его квадратичной составляющей. Поскольку квадратичная составляющая очень плохо приближает исходный потенциал, такой подход является некорректным, а ссылка на "неплохое согласование" с отдельными экспериментальными данными неубедительной.

Что касается численного алгоритма, то автор в пунктах "Научная новизна", "Научная и практическая значимость работы" и "Личный вклад автора в диссертационную работу" автореферата и в тексте диссертации неоднократно подчеркивает новизну метода, его уникальность и эффективность, участие автора в разработке алгоритма и его реализации на ЭВМ. Тем не менее, заявленные автором результаты по созданию важного для целей

диссертации алгоритма никак не отражены в тексте диссертации: отсутствуют описание алгоритма, текст программы, результаты тестовых расчетов, подтверждающих эффективность алгоритма.

Таким образом, задача диссертационного исследования в части разработки приближенного аналитического метода решена некорректно, а в части разработки численного алгоритма только заявлена, но не реализована.

Снс НИЧ КубГУ, канд. физ.-мат. наук

Дроботенко Михаил Иванович

М.И. Дроботенко
75.12.19



Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Кубанский государственный университет"

Адрес: 350040 г. Краснодар, ул. Ставропольская, 149

Телефон: 8(861)219-95-02

Факс: 8(861)219-95-17

E-mail: mdrobotenko@mail.ru

Сайт: www.kubsu.ru