

ВЫПИСКА ИЗ ПРОТОКОЛА № 59

заседания НТС Лаборатории информационных технологий ОИЯИ

от 25 июня 2015 года

ПРИСУТСТВОВАЛО: 21 член НТС ЛИТ из 31.

СЛУШАЛИ: о выдвижении цикла работ “Проблемно-ориентированный комплекс программ для решения краевых задач динамики малочастичных квантовых систем” с авторским коллективом в составе:

1. О. Чулуунбаатар – ЛИТ ОИЯИ,
2. А.А. Гусев – ЛИТ ОИЯИ,
3. С.И. Веницкий – ЛТФ ОИЯИ,
4. В.П. Гердт – ЛИТ ОИЯИ,
5. В.А. Ростовцев – ЛИТ ОИЯИ,
6. А.Г. Абрашкевич – Лаборатория IBM, Торонто, Канада,
7. В.Л. Дербов – Саратовский государственный университет, Саратов, РФ,
8. А. Гуждж – Университет им. Мария Кюри-Склодовска, Люблин, Польша,
9. П.М. Красовицкий – Институт ядерной физики, Алматы, Казахстан,
10. Э.М. Казарян – Российско-Армянский (Славянский) университет, Ереван, Армения

на конкурс работ ОИЯИ за 2015 год по разделу научно-методических и научно-технических работ.

С представлением работы перед членами НТС выступил **О. Чулуунбаатар**, особо отметив, что на протяжении более чем пятнадцати лет сотрудники Лаборатории информационных технологий Объединенного института ядерных исследований вместе с сотрудниками иных организаций, включая страны-участниц ОИЯИ, принимают активное участие в создании и развитии эффективных вариационно-проекционных методов, символично-численных алгоритмов и проблемно-ориентированного комплекса программ для решения с заданной точностью краевых многомерных задач шредингеровского типа с однородными краевыми условиями и анализа динамики малочастичных квантовых систем.

В цикле работ представлены символично-численные алгоритмы и проблемно-ориентированный комплекс программ, реализующие эффективные вычислительные схемы для численного решения краевых многомерных задач шредингеровского типа в конечной области многомерного конфигурационного пространства. В качестве базового метода применялся метод, предложенный советским математиком, нобелевским лауреатом (1975 г.) Л.В. Канторовичем в 1934 году для решения краевых двумерных задач эллиптического типа сведением к системе обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ).

Важнейшим результатом этих работ стало создание проблемно-ориентированного комплекса программ для численного анализа различных процессов в малочастичных квантовых системах. Созданный комплекс программ позволяет решать с заданной точностью краевые задачи для *двумерного, трехмерного* уравнения в частных производных эллиптического типа в рамках метода Канторовича с дискретизацией последовательности краевых задач методом конечных элементов (МКЭ). Созданный комплекс программ передан в библиотеку программ журнала Computer Physics Communication и в библиотеку программ JINRLIB. К этим программам было официально зарегистрировано более 900 обращений пользователей библиотеки программ журнала Computer Physics Communication.

Эффективность разработанных методов, алгоритмов и созданного комплекса программ подтверждена теоретическим и численным анализом погрешности решений краевых задач и результатами компьютерного моделирования ряда физических процессов в квантово-размерных и малочастичных квантовых системах. Наиболее важными результатами являются:

1. В рамках МКЭ впервые доказаны теоретические оценки погрешности аппроксимаций первой производной по параметру от собственных значений, собственных функций задачи на собственные значения, и интегралов от произведения собственных функций и/или их первых производных по параметру – переменных коэффициентов самосопряженных систем ОДУ второго порядка.

2. В приближении эффективной массы выполнено численно-аналитическое исследование спектральных и оптических характеристик электронных и примесных состояний аксиально-симметричных моделей полупроводниковых квантовых проволок, квантовых ям и коэффициента фото-абсорбции ансамблей квантовых точек во внешних полях, а также квантово-размерных эффектов Зеемана и Штарка.

3. Выполнено численно-аналитическое исследование моделей туннелирования и каналирования составных систем, состоящих из пары ионов или нескольких тождественных частиц, связанных парными осцилляторными потенциалами, через отталкивающие барьеры. Для таких систем впервые выявлены эффекты резонансного прохождения и полного отражения, обусловленные наличием барьерных метастабильных состояний. Например:

3.1. Для модели квантовой диффузии двухатомных молекул бериллия на поверхности меди показано, что квантовая прозрачность барьеров приводит к увеличению тепловых констант скорости квантового туннелирования и понижению энергии активации составной молекулярной системы при низких температурах.

3.2. Для модели лазерно-стимулированной рекомбинации электронов (позитронов) и протонов (антипротонов) в однородном магнитном поле показано, что наличие метастабильных состояний приводит к резонансному механизму и увеличению скорости образования атома водорода (антиводорода) при резонансных частотах поля лазера.

3.3. Для модели осевого каналирования одноименно заряженных частиц в эффективном осцилляторном потенциале канала кристалла выявлен немонотонный характер зависимости коэффициента усиления скорости ядерной реакции от энергии столкновения.

НТС ЛИТ считает, что создание проблемно-ориентированного комплекса программ для решения краевых задач, описывающих динамику малочастичных квантовых систем, и включением их в библиотеки программ журнала Computer Physics Communication и JINRLIB, вместе с разработкой эффективных вычислительных методов и алгоритмов, является важным достижением в области создания математического и программного обеспечения для компьютерного моделирования и численного анализа физических процессов в квантово-размерных и в малочастичных квантовых системах, и имеет большое значение для реализации научной программы и международного сотрудничества ОИЯИ.

ПОСТАНОВИЛИ: по результатам голосования поддержать выдвижение цикла работ “Проблемно-ориентированный комплекс программ для решения краевых задач динамики малочастичных квантовых систем” с авторским коллективом в составе: О. Чулуунбаатар, А.А. Гусев, С.И. Веницкий, В.П. Гердт, В.А. Ростовцев, А.Г. Абрашкевич, В.Л. Дербов, А. Гуждж, П.М. Красовицкий, Э.М. Казарян на конкурс работ ОИЯИ за 2015 год по разделу научно-технических и научно-методических работ.

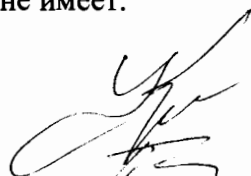



РЕЗУЛЬТАТЫ ГОЛОСОВАНИЯ: Решение принято открытым голосованием единогласно. Возражений против состава авторского коллектива НТС не имеет.

Представитель заседания
директор ЛИТ ОИЯИ

Ученый секретарь ЛИТ

Представитель НТС ЛИТ

Секретарь НТС

 В.В. Кореньков
 Д.В. Подгайный
 Э.А. Айрян
 О.И. Стрельцова