

Заключение диссертационного совета МГУ.02.04
по диссертации на соискание ученой степени доктора химических наук

Решение диссертационного совета от «18» октября 2019 г. №_54

О присуждении Бохану Денису Александровичу, гражданину России,
учёной степени доктора химических наук.

Диссертация “ Метод явнокоррелированных связанных кластеров CCSD(F12) и алгоритмы на его основе ” по специальностям 02.00.04 – «Физическая химия» и 02.00.17 – «Математическая и квантовая химия» принята к защите диссертационным советом 21.06.2019 г., протокол № 46

Соискатель Бохан Денис Александрович, 1979 года рождения, защитил диссертацию на соискание ученой степени доктора философии в области химических наук “Метод функционала плотности из первых принципов для систем с открытыми оболочками, возбуждённых состояний и свойств отклика” в 2007 году в диссертационном совете, созданном на базе химического факультета университета Флориды, г. Гейнсвилл, США.

Решением Министерства образования и науки Российской Федерации (Свидетельство ЭУС № 001034* от 19 января 2012 года) данная степень была признана эквивалентной степени кандидата химических наук, полученной в Российской Федерации.

Соискатель работает старшим научным сотрудником НИЛ молекулярных пучков кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М. В. Ломоносова.

Диссертация выполнена в НИЛ молекулярных пучков кафедры физической химии химического факультета МГУ имени М. В. Ломоносова

Официальные оппоненты:

Титов Анатолий Владимирович, доктор физико-математических наук, руководитель Отделения перспективных разработок, заведующий Лабораторией квантовой химии НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ, Петербургский институт ядерной физики имени Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»;

Николаев Александр Васильевич, доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник, Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына МГУ имени М. В. Ломоносова, отдел физики атомного ядра;

Дьячков Павел Николаевич, доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник, Институт Общей и Неорганической Химии имени Н. С. Курнакова РАН, лаборатория квантовой химии.

дали положительные отзывы на диссертацию.

Выбор официальных оппонентов обосновывался их высоким уровнем компетенции в областях квантовой и физической химии. Все оппоненты являются разработчиками теоретических методов и алгоритмов квантовой химии; полученные ими научные результаты опубликованы в высокорейтинговых международных журналах.

Соискатель имеет 23 опубликованные работы, в том числе по теме диссертации 18 работ, из них 18 статей, опубликованных в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных для защиты в диссертационном совете МГУ по специальностям.

1. Bokhan D., Ten-no S., Noga J. Implementation of the CCSD(T)-F12 method using cusp conditions // Phys. Chem. Chem. Phys.-2008.-V.10.-P.3320-3326. (Импакт-фактор: 4,242)

2. Bokhan D., Bernadotte S., Ten-no S. Implementation of the CCSD(T)(F12) method using numerical quadratures // Chem. Phys. Lett.-2009.-V.469.-P.214-218. (Импакт-фактор: 1,759)
3. Bokhan D., Bernadotte S., Ten-no S. Explicitly correlated second-order Moller-Plesset perturbation theory for unrestricted Hartree-Fock reference functions with exact satisfaction of cusp conditions // J. Chem. Phys.-2009.-V.131.-P.084105. (Импакт-фактор: 2,907)
4. Bokhan D., Ten-no S. Explicitly correlated equation-of-motion coupled cluster method for ionized states // J. Chem. Phys.-2010.-V.132.-P.021101. (Импакт-фактор: 2,907)
5. Bokhan D., Ten-no S. Explicitly correlated equation-of-motion coupled--cluster methods for excited and electron-attached states // J. Chem. Phys.-2010.-V.133.-P.204103. (Импакт-фактор: 2,907)
6. Bokhan D., Trubnikov D. N. Explicitly correlated second-order Moller-Plesset perturbation theory employing pseudospectral numerical quadratures // J. Chem. Phys.-2012.V.136.-P.204110. (Импакт-фактор: 2,907)
7. Belikov V. V., Bokhan D. A., Trubnikov D. N. Estimating the basis set superposition error in the CCSD(T)(F12) explicitly correlated method using the example of a water dimer // Russian Journal of Physical Chemistry A.-2014.-V.88.-N.4.-P.629–633. (Импакт-фактор: 0,516)
8. Belikov, V. V., Bokhan, D. A., Trubnikov, D. N. Dispersion interactions in dimers of inert gases: Investigation by means of explicitly correlated coupled clusters CCSD(F12)(T) // Russian Journal of physical chemistry A.-2015.-V.89.-P.1028-1032. (Импакт-фактор: 0,516)
9. Bokhan D., Trubnikov D. N., Musial M., Bartlett R. J. Equation-of-motion coupled cluster method for ionized states with partial inclusion of connected triples: Assessment of the accuracy in regular and explicitly-correlated approaches // Chem. Phys. Lett.-2014.-V.610.-P.173-178. (Импакт-фактор: 1,759)

10. Bokhan D., Trubnikov D. N., Bartlett R. J. Explicitly correlated similarity-transformed equation-of-motion coupled-cluster method // J. Chem. Phys.-2015.-V.143.-P.074111 (Импакт-фактор: 2,907)
11. Bokhan D., Trubnikov D. N., Bartlett R. J. Electric multipole moments calculation with explicitly correlated coupled-cluster wavefunctions // J. Chem. Phys.-2016.-V.144.-P.234107. (Импакт-фактор: 2,907)
12. Bokhan D., Trubnikov D. N., Perera A., Bartlett R. J. Explicitly correlated coupled-cluster theory for static polarizabilities // J.Chem. Phys.-2016.-V.145.-P.134104. (Импакт-фактор: 2,907)
13. Bokhan D., Trubnikov D. N., Perera A., Bartlett R. J. Explicitly correlated coupled-cluster method for long-range dispersion coefficients // Chem. Phys. Lett.-2017.-V.672.-P.133-136. (Импакт-фактор: 1,759)
14. Bokhan D., Perera A., Trubnikov D. N., Bartlett R. J. Excitation energies with spin-orbit couplings using equation-of-motion coupled-cluster singles and doubles eigenvectors // J. Chem. Phys.-2017.-V.147.-P.164118. (Импакт-фактор: 2,907)
15. Bokhan D., Trubnikov D. N., Perera A., Bartlett R. J. Explicitly-correlated double ionization potentials and double electron attachment equation-of-motion coupled cluster methods // Chem. Phys. Lett.-2018.-V.692.-P.191-195. (Импакт-фактор: 1,759)

На диссертацию и автореферат поступило 3 дополнительных отзыва, все положительные.

Диссертационный совет отмечает, что представленная диссертация на соискание ученой степени доктора химических наук является научно-квалификационной работой, в которой автором на основании выполненных исследований разработаны теоретические положения и созданы новые варианты явнокоррелированных методов и алгоритмов, реализованные в рамках подхода CCSD(F12) в комплексе квантовохимических программ

ACES3, позволившие получить актуальные результаты в области квантовохимических расчетов термодинамических характеристик веществ с точностью, близкой к точности эксперимента.

Диссертация представляет собой самостоятельное законченное исследование, обладающее внутренним единством. Положения, выносимые на защиту, содержат новые научные результаты и свидетельствуют о личном вкладе автора в науку:

1. Разработанный и программно реализованный метод CCSD(F12) с применением условий Като для фиксации геминальных амплитуд позволяет вычислять энтальпии химических реакций с точностью до 1 ккал/моль.
2. Разработанный и программно релизованный метод CCSD(F12) с применением численных квадратур для вычисления многоэлектронных интегралов позволяет оценивать энтальпии химических реакций с точностью до 1 ккал/моль при использовании корреляционно-согласованных базисных наборов aug-cc-pCVDZ/aug-cc-pCVTZ.
3. Разработанные и программно релизованные явнокоррелированные методы с использованием уравнений движения EOM-CCSD(F12) для оценок потенциалов ионизации, сродства к электрону и энергий возбуждения позволяют получить близкие к предельным и экспериментальным значениям оценки искомым свойств (при использовании базисов Даннинга aug-cc-pCVTZ)
4. Разработанный и программно релизованный метод вычисления статических и динамических поляризуемостей, а также дисперсионных коэффициентов на волновых функциях метода CCSD(F12) позволяют получить близкие к предельным и экспериментальным значениям оценки искомым свойств отклика при использовании дважды расширенных базисов Даннинга d-aug-cc-pVTZ.

На заседании 18.10.2019 г. диссертационный совет принял решение присудить Бохану Д. А. ученую степень доктора химических наук.

При проведении тайного голосования диссертационный совет в количестве 23 человек, из них 6 докторов наук по специальности 02.00.04 «физическая химия» и 5 докторов наук по специальности 02.00.17 «математическая и квантовая химия», участвовавших в заседании, из 32 человек, входящих в состав совета (дополнительно введены на разовую защиту 5 человек), проголосовали: за 23, против 0, недействительных бюллетеней 0.

Председатель
диссертационного совета



Лунин В. В.

Ученый секретарь
диссертационного совета



Шилина М. И

Дата 21.10.2019 г.