

Лях Дмитрий Иванович

выпускник кафедры химического материаловедения 2005 года.

Исследователь в National Center for Computational Sciences (Knoxville,
Tennessee Area, USA)



Дмитрий Иванович Лях закончил аспирантуру Харьковского национального университета имени В. Н. Каразина в 2009 году, защитив под руководством профессора В. В. Иванова кандидатскую диссертацию «Теория связанных кластеров в *ab initio* расчетах поверхностей потенциальной энергии малых молекул» по специальности 02.00.04 – «Физическая химия». Диссертация была посвящена систематическому изучению возбуждений высшей кратности для количественного учета эффектов электронной корреляции в молекулярных системах, описываемых в рамках теории связанных кластеров. В большой мере, успешная защита кандидатской диссертации была следствием интенсивных, насыщенных курсов, преподаваемых на химическом факультете ХНУ, таланта проф. Иванова как научного руководителя, дружественной рабочей атмосферы, поддерживаемой заведующим кафедры химического материаловедения проф. Ю. В. Холиным, и, конечно же, каждодневной упорной работы. Кроме того, не последнюю роль сыграло высокое научно-культурное влияние, оказанное дискуссионными часами, проводимыми в кругу упомянутых выше проф. Иванова и проф. Холина, а также проф. А. И. Коробова, проф. А. В. Лузанова, проф. В. О. Черановского и многих других, с их разнообразными системами научно-философских взглядов. В целом, время, проведенное на химическом факультете Каразинского университета, может быть охарактеризовано как глубокое погружение в мир научного знания, значительное культурное обогащение и

продуктивная работа в дружественной среде коллег – три ценности, которые необходимо культивировать и далее.

После окончания аспирантуры к.х.н. Д. И. Лях присоединился к группе проф. Р. Бартлета в «колыбели» квантовой химии, The Quantum Theory Project, в университете штата Флорида. Основным фокусом научной работы было развитие пост-хартри-фоковской методологии в теории электронной структуры, акцентируя внимание на адаптивных моделях и параллельных $O(N)$ алгоритмах.

Получив достаточный опыт работы в этом направлении, в 2013 году Д. И. Лях перешел в Национальный центр вычислительных наук, где его основной задачей является расширение сферы применения высокоточных методов квантовой химии на большие молекулярные системы с помощью массивно-параллельной реализации квантово-химических моделей на гетерогенных суперкомпьютерах. Наличие соответствующего программного обеспечения может существенно улучшить наши возможности в создании материалов с заданными свойствами.