

ОТЗЫВ

официального оппонента на диссертационную работу **Коноваловой Елены Александровны** на тему: «Расчёты спектральных свойств атомов с несколькими валентными электронами» на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика

Диссертация Коноваловой Е.А. посвящена изучению свойств многоэлектронных атомов и ионов и их использованию для исследования фундаментальных взаимодействий. В работе представлены расчёты уровней энергии атомов и ионов и обсуждается возможность изучения временной и пространственной вариации постоянной тонкой структуры (альфы) и извлечение из экспериментальных данных констант сверхтонкой структуры. Расчёты выполнены с использованием современных точных методов. В настоящее время численное моделирование многоэлектронных систем крайне востребовано, и используется как для подготовки современных экспериментов, так и для анализа и интерпретации экспериментальных данных. Для многих наиболее значимых экспериментов теоретические расчёты играют ключевую роль. Высокая точность представленных расчётов и исключительная сложность рассматриваемых систем определяют высокую актуальность диссертации Коноваловой Е.А.

Диссертация состоит из введения, четырёх глав и заключения.

В введении чётко сформулированы актуальность работы, современное состояние области исследования, сформулированы положения, выносимые на защиту.

В первой главе диссертации даётся обзор методов расчёта атомных спектров. В частности, вводится используемое в диссертации приближение брейтовского взаимодействия в пределе нулевой частоты. В рамках этого приближения формулируется метод Хартри-Фока-Дирака. Далее рассматриваются используемые методы учёта корреляций. Вначале описывается метод наложения конфигураций. Затем рассматриваются более сложные методы, основанные на разбиении пространства орбиталей на валентные и остовные: метод теории возмущений для задачи многих тел (МВРТ) и линеаризованный метод связанных кластеров (LCC).

Во второй главе представлены расчёты электронной структуры изоэлектронной серии Mg. Выбор объекта исследования обусловлен имеющимися экспериментальными и теоретическими данными для разности энергетических уровней в Mg и Mg-подобных ионах. Сравнение результатов описанных в предыдущей главе методов с экспериментальными данными позволило оценить точность этих методов.

Третья глава диссертации посвящена актуальной сейчас теме поиска возможных временных и пространственных вариаций фундаментальных констант, в частности, постоянной тонкой структуры (альфы). В диссертации реализована идея наблюдения вариации фундаментальных констант с помощью сравнения частот переходов у атомов, находящихся в лаборатории на Земле, и у атомов, находящихся на далёком расстоянии. В общем случае зависимость частоты переходов от постоянной тонкой структуры довольно сложная и эта зависимость отличается у различных переходов. Для получения

зависимости изменения частоты перехода от изменения альфы необходимо делать серию сложных расчётов. Одной из целей этой главы был поиск переходов наиболее чувствительных к изменению альфы. Объектом исследования был выбран ион Ni^+ . Этот выбор объясняется с одной стороны имеющимися линиями Ni^+ в астрофизических наблюдениях и с другой стороны отсутствием ранее достаточно детального изучения этого иона. В рамках настоящей диссертации были найдены переходы особенно чувствительные к изменению постоянной тонкой структуры, произведён расчёт соответствующих коэффициентов чувствительности. В работе также обосновывается перспективность найденного перехода для поиска вариации альфы.

Четвёртая глава диссертации посвящена изучению сверхтонкой структуры тяжёлых элементов. Основное внимание уделено расчёту, так называемой, сверхтонкой аномалии, которая появляется из-за нарушения пропорциональности между константами сверхтонкой структуры и g -факторами соответствующих ядер. В работе рассматривалась сверхтонкая аномалия появляющаяся за счёт различного распределения как зарядовой плотности, так и намагниченности в различных изотопах. Сначала учёт намагниченности ядра (поправка Бора-Вайскопфа) обсуждается для одноэлектронных ионов, затем результаты обобщаются на многоэлектронный случай. Соответственно представлены результаты для водородоподобных ионов и для нейтральных атомов ^{79}Au , ^{80}Hg , ^{81}Tl , ^{87}Fr и их ионов. Необходимо отметить, что для извлечения констант сверхтонкой структуры из экспериментальных данных необходимы теоретические расчёты измеряемых разностей энергии, где поправки на сверхтонкое взаимодействие представлены через соответствующие константы. Такая обработка экспериментальных данных была проведена в рамках настоящей диссертации. Расчёты проводились различными методами (МВРТ и LCC), что позволило оценить погрешность извлечённых констант.

В диссертации развиваются и применяются оригинальные методы, основанные на стандартных подходах, применяемых в квантовой механике и квантовой электродинамике, хорошо себя зарекомендовавшие для атомных расчётов. Представленные численные результаты находятся в согласии с имеющимися экспериментальными данными. Результаты диссертации опубликованы в 5 работах, рекомендованными ВАК, и докладывались на многих конференциях и научных семинарах.

В диссертации Коноваловой Е.А. представлено теоретическое исследование электронной структуры атомов и многозарядных ионов. Исследование проводилось на основе оригинальных методов численного моделирования многоэлектронных систем. В диссертации Коноваловой Е.А. представлены новые результаты расчётов энергий и продемонстрировано, как эти данные могут быть использованы для поиска вариации фундаментальных констант и для извлечения из экспериментальных данных постоянных сверхтонкой структуры. Результаты, полученные в диссертации, имеют большое значение для развития моделирования атомных систем и его приложения к решению актуальных задач современной физики, в частности, поиска новой физики.

Диссертация написана хорошо. Разработанные подходы представлены достаточно подробно. Имеются следующие вопросы:

1. Применение формул (2.3) – (2.5) для описания поправок на собственную энергию электрона и поляризацию атома требует более детального обсуждения.
2. В начале главы 3 написано, что релятивистские поправки имеют порядок $\alpha^2 Z^2$. Видимо, это связано с неудачным, на мой взгляд, определением порядка поправки.
3. В главе 3 приводятся значения сил осцилляторов в калибровке длины и скорости, но не приводятся определения этих калибровок. Не понятно автор имеет в виду действительно различные калибровки или только форму длины и форму скорости для вероятностей перехода.

Учитывая актуальность выполненных исследований, научную новизну и практическую значимость полученных результатов, считаю, что представленная диссертация соответствует требованиям пункта 9 «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённого постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 года (пп. 9 -14). Автор диссертации Коновалова Елена Александровна заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

Официальный оппонент:
Профессор кафедры квантовой механики
Санкт-Петербургского государственного университета
д. ф.-м. н.

Андреев О.Ю.

13 февраля 2023 г.

199034, Россия, Санкт-Петербург, Университетская набережная, д. 7–9

Санкт-Петербургский государственный университет,

кафедра квантовой механики

Личную подпись
О.Ю. Андреев
заверяю
И.О. начальника отдела кадров
И.И. Константинова



Текст документа размещен
в открытом доступе
на сайте СПбГУ по адресу
<http://spbu.ru/science/expert.htm>