

На правах рукописи

УДК 539.18

Коновалова Елена Александровна

**РАСЧЁТЫ СПЕКТРАЛЬНЫХ СВОЙСТВ АТОМОВ
С НЕСКОЛЬКИМИ ВАЛЕНТНЫМИ ЭЛЕКТРОНАМИ**

Специальность: 1.3.3. Теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Санкт-Петербург 2023 г.

Работа выполнена в лаборатории молекулярных и атомных пучков отделения нейтронных исследований Федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт».

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории молекулярных и атомных пучков отделения нейтронных исследований Федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»

Козлов Михаил Геннадьевич

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор кафедры квантовой механики физического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет»

Андреев Олег Юрьевич

доктор физико-математических наук, доцент, профессор химического факультета Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова»

Пазюк Елена Александровна

Ведущая организация: Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»

Защита состоится «2» марта 2023 года в 15 часов на заседании объединенного совета по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук 99.2.018.02, созданного на базе Российского государственного педагогического университета им. А. И. Герцена и Национального исследовательского университета ИТМО по адресу: 191186, Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48, корп. 3, ауд. 52.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке Российского государственного педагогического университета им. А.И. Герцена 191186, Санкт-Петербург, наб. реки Мойки, 48, корп. 35) и на сайте университета по адресу: https://disser.herzen.spb.ru/Preview/Karta/karta_000000888.html.

Автореферат разослан «___» _____ 20__ года.

Ученый секретарь

диссертационного совета, кандидат
физико-математических наук

Яковлева Светлана Анатольевна

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы исследования

Атомная спектроскопия на порядки превышает точность достижимую в других экспериментах. Это позволяет использовать атомы как исключительно прецизионные инструменты для изучения фундаментальной физики. В настоящей работе рассмотрены две проблемы, которые могут быть сведены к изучению свойств электронной структуры атомов и ионов. Первая – поиск возможной вариации постоянной тонкой структуры во времени. Вторая – исследование сверхтонкой структуры тяжелых атомов с учётом распределения ядерной намагниченности.

Поиск вариаций фундаментальных постоянных основан на сравнении линейчатых спектров атомов или ионов, полученных от космических объектов ранней Вселенной, и зарегистрированных в наши дни в лабораторных условиях на Земле. Как правило, изучаются вариации во времени безразмерных физических констант, таких как постоянная тонкой структуры $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$, где e – заряд электрона, c – скорость света, \hbar – постоянная Планка. Тогда лабораторные спектральные измерения и астрономические наблюдения на больших красных смещениях представляют возможность непосредственного сопоставления [1]. Коэффициенты чувствительности (g -факторы) спектральных линий к возможным изменениям α определяются из релятивистских расчётов электронной структуры, выполнению которых посвящена одна из глав данной работы.

В последние годы достигнута высокая точность экспериментов по измерению магнитных дипольных констант сверхтонкой структуры (СТС) методами лазерной спектроскопии [2]. Константы сверхтонкой структуры содержат информацию о ядерных g -факторах изотопов ($g_I = \mu/I$, где μ и I – магнитный момент и спин ядра), но при этом чувствительны к распределению заряда и намагниченности внутри атомного ядра. Отношение констант СТС A для различных изотопов обычно принимается равным отношению их ядерных g -факторов. Это верно только в приближении точечного ядра. Учёт конечных размеров ядра приводит к зарядовой [3] и магнитной [4] поправкам к константе СТС точечного ядра. Вместе эти поправки нарушают пропорциональность между константами A и ядерными g -факторами, что известно как сверхтонкая магнитная

аномалия (СМА):

$${}^1\Delta^2 \equiv \frac{A^{(1)}g_I^{(2)}}{A^{(2)}g_I^{(1)}} - 1, \quad (1)$$

где $A^{(1)}$, $A^{(2)}$ – константы СТС двух изотопов, $g_I^{(1)}$ и $g_I^{(2)}$ – соответствующие g -факторы. Из-за малого времени жизни ядерные магнитные моменты короткоживущих изотопов не могут быть измерены независимо от констант СТС. Поэтому в ряде случаев поправка на СМА ограничивает точность определения ядерных магнитных моментов.

В некоторых изотопических рядах отношения постоянных СТС для низколежащих $s_{1/2}$ и $p_{1/2}$ атомных состояний $\rho = A(s_{1/2})/A(p_{1/2})$ измерены с достаточной точностью, чтобы надежно извлечь дифференциальную сверхтонкую магнитную аномалию (ДСМА):

$${}^1\Delta_{s_{1/2}p_{1/2}}^2 = \frac{\rho^{(1)}}{\rho^{(2)}} - 1 \approx {}^1\Delta^2(s_{1/2}) - {}^1\Delta^2(p_{1/2}). \quad (2)$$

Дифференциальные аномалии могут быть измерены экспериментально. Из этих данных, используя теоретически рассчитанное отношение $\eta = \frac{{}^1\Delta^2(s_{1/2})}{{}^1\Delta^2(p_{1/2})}$, можно определить поправки на СМА как для $s_{1/2}$, так и для $p_{1/2}$ состояний. После этого можно уточнить g -фактор короткоживущего изотопа по g -фактору стабильного с помощью Ур. (1).

Цели и задачи исследования

Цель настоящей работы заключается в расчёте коэффициентов чувствительности спектральных линий к возможным изменениям постоянной тонкой структуры и констант СТС к распределению заряда и намагничённости внутри атомного ядра.

В соответствии с целью работы были поставлены следующие задачи:

1. выбрать теоретические модели электронного строения атомных систем для расчёта энергетических спектров и атомных свойств;
2. оценить точность рассмотренных методов на примере расчёта спектров изоэлектронной серии атома магния;
3. выполнить расчёт коэффициентов чувствительности к вариации постоянной тонкой структуры для E1 переходов Ni^+ ; ион Ni имеет большую чувствительность к α -вариации, поскольку это один из самых

тяжелых элементов, спектр которого наблюдается на больших красных смещениях;

4. разработать метод расчёта констант сверхтонкой структуры, позволяющий оценивать сверхтонкие магнитные аномалии, исследовать его точность как на примере водородоподобных ионов, так и многоэлектронных систем.

Научная новизна

В настоящее время существует большая потребность в универсальных и точных методах расчёта свойств атомов. Объединение методов наложения конфигураций и линеаризованных связанных кластеров (configuration interaction + linearized coupled clusters, CI+LCC) позволяет вычислять спектры атомов с несколькими валентными электронами с погрешностью менее 1% и дает возможность проводить расчёты широкого набора атомных свойств. В рамках данного метода были вычислены частоты переходов из основного состояния в пять низколежащих мультиплетов атома магния и ионов его изоэлектронной серии, при этом достигнута точность в 0.1% или выше.

Метод CI+LCC использовался для расчёта констант СТС низколежащих состояний атома золота. Из недавно измеренных ДСМА [5] в результате расчётов были восстановлены СМА. Выяснилось, что СМА между изомерами 11/2 золота и стабильным изотопом ^{197}Au составляет $11.2\% \pm 1\%$ для состояния $6s_{1/2}$, что на порядок превышает погрешности измеренных констант СТС. Для того, чтобы найти g -факторы короткоживущих изотопов золота без потери экспериментальной точности необходимо учитывать поправку на СМА. Поэтому разработка новых методов атомных вычислений констант СТС, позволяющих оценить СМА, актуальна и своевременна.

На примере иона никеля продемонстрирован расчёт атомных свойств систем с большим числом валентных электронов. Оптические переходы Ni^+ наблюдаются на больших красных смещениях и могут быть использованы для поиска вариации постоянной тонкой структуры во времени. Для всех рассмотренных оптических переходов Ni^+ уточнены значения коэффициентов чувствительности к α -вариации, впервые получены несколько коэффициентов, среди которых найден переход с рекордной для Ni^+ чувствительностью к α -вариации. Для оптических переходов

Ni^+ были также вычислены силы осцилляторов, позволяющие определить относительные яркости линий, и сделано сравнение с астрофизическими данными.

Теоретическая и практическая значимость работы

Прецизионный расчёт частот переходов Al^+ представляет большой интерес в связи использованием перехода $^1S_0 \rightarrow ^3P_0$ в $^{27}\text{Al}^+$ в оптических атомных часах. Полная систематическая погрешность таких часов значительно меньше погрешности первичных цезиевых стандартов.

Сравнение частот переходов, зарегистрированных в лабораторных условиях и полученных от космических объектов ранней Вселенной, позволяет наложить ограничение на изменение некоторых фундаментальных постоянных, таких как постоянная тонкой структуры. Чувствительности частот переходов к возможному изменению α сильно различаются. Для поиска спектральных линий, наиболее интересных для наблюдения, необходимо выполнить расчёт электронной структуры и свойств выбранной атомной системы. Объектами для поиска вариации α являются атомы и ионы, спектры которых наблюдается на больших красных смещениях. Наиболее тяжелым из таких ионов является Ni^+ , изученный в диссертационной работе.

При определении ядерных магнитных моментов из анализа констант СТС поправкой на СМА часто пренебрегают из-за отсутствия теоретических оценок на её величину. С другой стороны, эта поправка обычно мала (менее 1% [6]), и только недавние измерения для короткоживущих ядер достигли такого уровня точности. В большинстве случаев этот подход приемлем ввиду наличия экспериментальных погрешностей. Однако, известно о больших СМА между долгоживущими изотопами золота [7, 8], следовательно требуется оценка СМА и в случае короткоживущих ядер.

Методы исследования

В качестве начального приближения для расчёта энергетического спектра и свойств рассмотренных атомных систем использовался метод Хартри–Фока–Дирака. Электронные корреляции учитывались с помощью комбинированных методов расчёта. В рамках этих методов полное многоэлектронное пространство конфигураций разделено на два подпространства: валентное и остовное. Остовные и остовно-валентные корреляции учитываются пертурбативно, используя многочастичную

теорию возмущений (many-body perturbation theory, MBPT) или линейризованный метод связанных кластеров, а валентные корреляции обрабатываются в рамках метода наложения конфигураций. Для магниеподобных ионов, где корреляционные эффекты могут быть учтены с высокой точностью, также были приняты в рассмотрение поправки квантовой электродинамики к энергии системы. Комбинированные методы позволяют рассчитать валентные энергии и частоты переходов для низколежащих состояний атомной системы. Эти вычисления необходимо повторить при разных значениях α , чтобы численно найти коэффициенты чувствительности частот переходов к возможной α -вариации.

В работе предложена параметризация для констант STC, где введены три атомных параметра (константа STC в приближении точечного ядра \mathcal{A}_0 , параметры b_N и b_M , которые характеризуют зарядовую и магнитную поправки к \mathcal{A}_0) и три параметра, которые описывают ядро – g -фактор, радиус ядра и множитель $d_{\text{нuc}}$, последний зависит от распределения намагниченности внутри ядра. После того, как вычислены атомные параметры, из экспериментальных данных по сверхтонкой структуре можно получить информацию о свойствах ядра.

Положения, выносимые на защиту

1. На примере расчёта спектров изоэлектронной серии атома магния оценена точность методов: CI, CI+MBPT и CI+LCC. Результаты метода CI+MBPT для энергий переходов рассмотренных систем на порядок лучше, чем для метода CI, а метод CI+LCC увеличивает точность расчёта ещё примерно в 2 раза. На уровне точности CI+LCC даже для относительно лёгких элементов, таких как магниеподобный ион CI, поправки квантовой электродинамики становятся заметными и их необходимо учитывать. Расчёт CI+LCC проведён для большого числа уровней с погрешностью не превышающей 0.1% в рассмотренных атомных системах.
2. Выполнен расчёт коэффициентов чувствительности низколежащих спектральных линий однозарядного иона никеля на возможные изменения постоянной тонкой структуры во времени. В диапазоне частот, которые наблюдаются в астрофизике на больших красных смещениях, исследованы несколько спектральных линий, расчёты для которых ранее не проводились. Среди них найден переход с рекордно

большим для Ni^+ коэффициентом чувствительности к α -вариации, $q = -2210(150)$.

3. Проведены аналитические и численные расчёты отношения аномалий $\eta = \frac{{}^1\Delta^2(s_{1/2})}{{}^1\Delta^2(p_{1/2})}$, что позволяет получить сверхтонкие магнитные аномалии из экспериментальных данных и, благодаря этому, уточнить значения ядерных g -факторов короткоживущих изотопов.
4. Выполнен расчёт постоянных сверхтонкой структуры нейтральных атомов Fr, Au, а также золотоподобных ионов Hg и Tl. На основании экспериментальных данных исследованы изменения в распределении ядерной намагничённости в изотопических рядах Fr и Au, сделано сравнение с предсказаниями одночастичной ядерной модели.

Степень достоверности полученных результатов

Достоверность полученных результатов обеспечена использованием апробированных теоретических подходов. Рассчитанные энергии переходов в спектрах магния и ионов его изоэлектронной серии согласуются с экспериментальными значениями с погрешностью 0.1%. Коэффициенты чувствительности к возможной α -вариации некоторых спектральных линий Ni^+ находятся в хорошем согласии с ранее опубликованными данными, другие получены впервые. Разработанный метод расчёта констант СТС, учитывающий СМА, проверялся в случае водородоподобных ионов, когда могут быть выполнены аналитические вычисления.

Апробация результатов

Результаты исследований, представленные в диссертации, докладывались и обсуждались на семинарах НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ и следующих международных и российских конференциях: Workshop on Electronic atomic factors and hyperfine anomalies (Brussels, Belgium, 2019); 13th European Conference on Atoms, Molecules and Photons (Florence, Italy, 2019); Fifth international conference on radiation and applications in various fields of research “RAD2017” (Budva, Montenegro, 2017); EGAS–47th conference of the European Group of Atomic Systems (Riga, Latvia, 2015); Workshop on precision physics and fundamental physical constants (г. Санкт-Петербург, Россия, 2013; Дубна, Россия, 2014); 11th European Conference on Atoms, Molecules and Photons (Aarhus, Denmark, 2013); Международный молодежный научный форум “OpenScience” (г. Гатчина, Россия, 2014 –

2021); Российская молодежная конференция по физике и астрономии (г. Санкт-Петербург, Россия, 2012 – 2017).

Публикации

По материалам диссертации опубликовано 12 печатных работ в том числе 6 статей, 5 из которых в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК; 1 свидетельство о регистрации программы для ЭВМ и 5 тезисов докладов.

Личный вклад автора

Автором или при совместной работе с другими исследователями были проведены все расчёты атомных спектров и свойств, представленные в диссертации; разработан и опробован метод расчёта констант сверхтонкой структуры, учитывающий СМА, и выполнен анализ полученных результатов.

Объем и структура диссертации

Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения и списка цитируемой литературы, изложена на 108 страницах и содержит 5 рисунков и 14 таблиц. Список литературы включает 144 наименования.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В **первой главе** рассматриваются модель релятивистского гамильтониана Дирака–Кулона–Брейта (H_{DCB}) [9] и методы решения многоэлектронной задачи, используемые в настоящее время в расчётах спектров и свойств атомов. Проанализированы области применимости этих методов, принципиальные и практические ограничения их точности.

Раздел 1.1 посвящен гамильтониану Дирака–Кулона–Брейта (H_{DCB}), который является оптимальной релятивистской моделью описания атомных свойств. Спектр одноэлектронного гамильтониана Дирака \hat{h}_D содержит состояния как с положительной, так и с отрицательной энергией, разделенные интервалом порядка $2mc^2$. Проектирование \hat{h}_D на пространство состояний с положительной энергией используется для избежания потенциальной возможности рождения электрон-позитронных пар при учёте межэлектронного взаимодействия.

Уравнение $H_{DCB}\Phi_n = E_n\Phi_n$ в случае многоэлектронных систем не может быть решено в аналитическом виде. В связи с этим рассматривают приближённые методы, наиболее существенным из которых является метод

самосогласованного поля. В рамках этого приближения каждый электрон в атоме рассматривается как движущийся в самосогласованном поле, создаваемом ядром и всеми остальными электронами.

В *разделе 1.2* рассмотрены методы учёта электронных корреляций. В методе наложения конфигураций (CI) волновая функция многоэлектронной системы записывается как линейная комбинация антисимметризованных произведений одноэлектронных конфигураций, полученных методом Хартри–Фока–Дирака. Коэффициенты подбираются из условия минимума полной энергии системы. Этот метод может быть применён к любой атомной системе, но обладает плохой сходимостью. Для улучшения сходимости используются комбинированные методы расчёта, в рамках которых остовные и остовно-валентные корреляции учитываются пертурбативно, а валентные корреляции обрабатываются в рамках метода наложения конфигураций. Такой подход требует разделения полного многоэлектронного гильбертова пространства на два подпространства валентное и остовное. Остовно-остовные и остовно-валентные корреляции учитываются при построении эффективного гамильтониана \hat{H}_{eff} , тогда как валентные корреляции учитываются явно.

Метод CI+МВРТ имеет несколько важных ограничений:

1. Число валентных электронов не должно превышать 3 или 4. Поскольку сложность метода полного наложения конфигураций быстро растет с увеличением модельного пространства, а частичный учет возбуждений плохо сказывается на точности метода.
2. Только нижняя часть валентного спектра может быть рассчитана с хорошей точностью. Для энергий выше энергии возбуждения остова, эффективный гамильтониан имеет полюса, и результаты могут оказаться существенно менее точными.
3. Поскольку в эффективном гамильтониане не учтены остовно-валентные корреляции более высоких порядков, погрешность расчёта частот переходов составляет около 1%.

Первые два ограничения относятся к методу CI. Третье ограничение относится к методу МВРТ и может быть снято, благодаря использованию линейаризованной версии связанных кластеров (LCC) в приближении однократных и двукратных возбуждений [10, 11]. Метод LCC позволяет

более аккуратно учесть взаимодействие валентных электронов с атомным остовом, что в ряде случаев существенно увеличивает точность расчётов.

Во **второй главе** на примере изоэлектронной серии атома Mg исследована точность методов учёта электронных корреляций, рассмотренных в первой главе. Атом магния и ионы его изоэлектронной серии удобны для проверки методов расчёта атомных спектров, поскольку для этих систем доступно большое количество теоретических данных и имеются надежные экспериментальные значения частот переходов. Эти системы содержат 10 остовных и 2 валентных электрона, что допускает достаточно точный учёт остовных, остовно-валентных и валентных корреляций. Точный учёт электронных корреляций даёт возможность оценить вклад брейтовского взаимодействия и поправки квантовой электродинамики (КЭД) в энергии спектральных уровней.

Для каждого иона построен конечный базисный набор, который включает в себя орбитали Дирака–Фока для основных и валентных состояний и штурмовские орбитали для виртуальных состояний [12]. После добавления штурмовских орбиталей выполнена диагонализация оператора Дирака–Фока остова на всем базисном наборе. Таким образом построен базисный набор $30spdfgh$ из 300 орбиталей, который включает парциальные волны с $l = 0, \dots, 5$. Весь базисный набор использован для расчётов методами MBPT и LCC. Пространство конфигурации для CI включает однократные и двукратные возбуждения всех орбиталей до $21spdfg$, что соответствует полному наложению конфигураций для двух электронов на базисном наборе $21spdfg$. В приближении валентного CI не учитываются остовно-валентные и остовно-остовные корреляции. В методах CI+MBPT и CI+LCC эти корреляции включены в эффективный гамильтониан.

На Рис. (1) представлены относительные теоретические погрешности трёх рассматриваемых методов для гамильтониана Дирака–Кулона. Вдоль изоэлектронной последовательности наблюдается определенное улучшение точности каждого метода. Например, средняя погрешность метода CI для Mg I составляет около 2% и уменьшается примерно до 0.4% для Cl VI. Аналогично средняя погрешность метода CI+MBPT уменьшается от 0.2% для Mg I до 0.1% для Cl VI. В тоже время различие результатов, полученных методами CI+MBPT и CI+LCC, уменьшается с увеличением заряда иона Z , и почти исчезает для Cl VI, что указывает на уменьшение роли остовно-валентных корреляций высших порядков для многозарядных

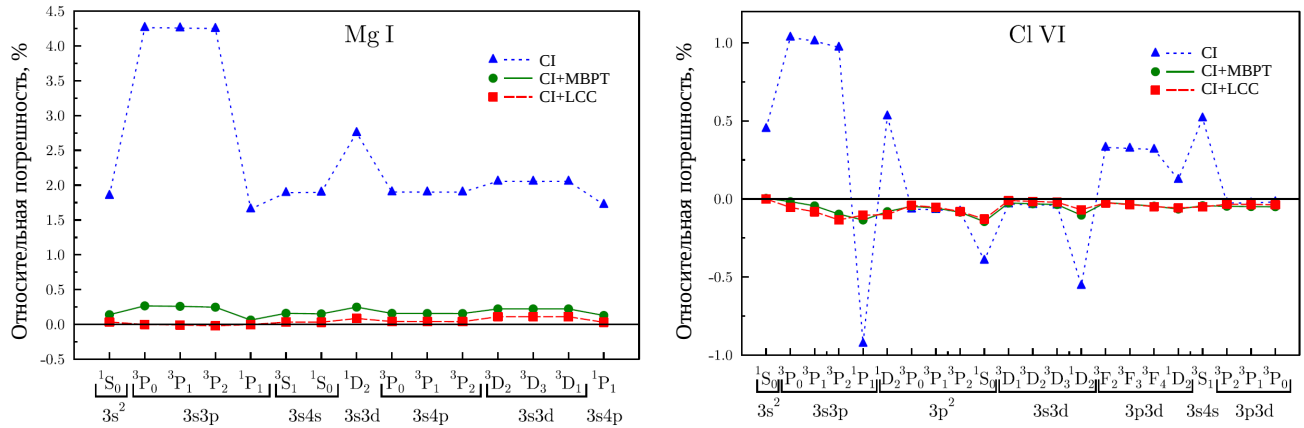


Рис. 1: Относительные теоретические погрешности методов CI, CI+MBPT и CI+LCC с использованием гамильтониана Дирака–Кулона для магниеподобных ионов. Для основных состояний приведены погрешности для энергий связи двух валентных электронов, для других состояний – погрешности для частот переходов из основных состояний.

ионов.

Для триплетных состояний активное пространство в методе CI насыщено уже на базе $15spdfg$. Для того чтобы достичь аналогичной точности для синглетных состояний, потребовалось увеличить конфигурационное пространство до $21spdfg$. Результаты для синглетных состояний конфигураций $3s3p$, $3s3d$ или $3p^2$ обычно менее точны, чем для других состояний. Эти состояния более чувствительны к качеству базисного набора и размеру активного пространства, но после многочисленных тестов можно сделать вывод о том, что базис $21spdfg$ насыщен для всех рассматриваемых состояний для полного двухэлектронного CI.

На достигнутом уровне точности поправки Брейта и КЭД начинают становиться важными для атомов и ионов с $Z \gtrsim 20$. Запаздывающая часть брейтовского взаимодействия значительно меньше магнитной части, и ею можно пренебречь. Поправки КЭД учтены на уровне лэмбовских сдвигов s -состояний валентных электронов.

В разделе 2.1 получено упрощенное выражение для лэмбовского сдвига s -состояний многоэлектронных систем. Для этого выражение для лэмбовского сдвига s -состояний водородоподобных ионов из работы [13] обобщено на случай недиагональных матричных элементов валентных

электронов многоэлектронных атомов и представлено в виде:

$$\sigma_{\nu,\nu'} \approx 8\sqrt{2} \frac{(\varepsilon_{\nu}\varepsilon_{\nu'})^{3/4}}{\pi(Z_i + 1)} \alpha^3 Z^2, \quad (3)$$

где ν и ν' – эффективные главные квантовые числа валентных электронов, ε_{ν} и $\varepsilon_{\nu'}$ – энергии связи валентных электронов, Z_i – заряд иона, Z – заряд ядра, α – постоянная тонкой структуры. В расчётах методом CI+LCC поправки КЭД в виде (3) добавлены к одноэлектронным радиальным интегралам валентных электронов.

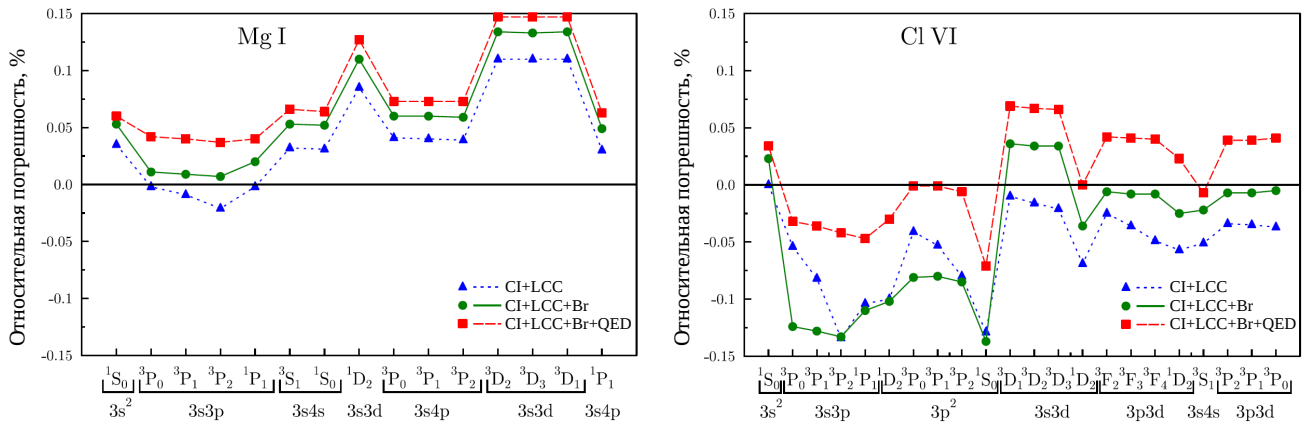


Рис. 2: Относительные теоретические погрешности метода CI+LCC с использованием гамильтониана Дирака–Кулона (треугольники), или гамильтониана Дирака–Кулона–Брейта (круги), или гамильтониана Дирака–Кулона–Брейта с учётом КЭД поправок (3) (квадраты). Для основных состояний приведены погрешности для энергий связи двух валентных электронов, для других состояний – погрешности для частот переходов из основных состояний.

На Рис. (2) показано, как поправки на брейтовское взаимодействие и КЭД влияют на точность расчёта в рамках метода CI+LCC. Эти поправки абсолютно пренебрежимы для расчётов CI и лишь немного заметны для метода CI+МВРТ. Для Mg I эти поправки незначительны на достигнутом уровне учёта электронных корреляций. Однако для Cl VI они становятся существенными и несколько улучшают итоговую точность: средняя ошибка уменьшается с 0.06% до 0.04%. Следует отметить, что для рассмотренных здесь ионов поправки на брейтовское взаимодействие и КЭД сопоставимы. Учёт взаимодействия Брейта обычно улучшает воспроизведение тонкой структуры, в то время как поправки КЭД уменьшают общий разброс ошибок.

Третья глава посвящена поиску возможной вариации постоянной тонкой структуры во времени. Зависимость частот переходов от α – релятивистский эффект. Связь между частотами переходов в спектрах, полученных от космических объектов ранней Вселенной (ω_i) и в лабораторных условиях ($\omega_{i,\text{lab}}$), выражается формулой [14, 15]:

$$\begin{aligned}\omega_i &= \omega_i^{(0)} + \omega_i^{(2)}\alpha^2 + \dots = \omega_{i,\text{lab}} + q_i x + \dots, \\ \omega_{i,\text{lab}} &= \omega_i^{(0)} + \omega_i^{(2)}\alpha_0^2 + \dots, \quad x = (\alpha/\alpha_0)^2 - 1, \quad q_i = \left. \partial\omega_i/\partial x \right|_{x=0}\end{aligned}\quad (4)$$

где $\omega_i^{(0)}$ – частота перехода в нерелятивистском приближении, $\omega_i^{(2)}$ – релятивистская поправка к частоте перехода, α_0 – значение постоянной тонкой структуры в лабораторных условиях, q_i – коэффициент чувствительности частоты перехода к изменению постоянной тонкой структуры (q -фактор). Отметим, что q -фактор перехода является разницей между q -факторами верхнего и нижнего спектральных уровней.

Для поиска α -вариации наиболее интересны самые тяжелые из астрофизически значимых элементов ($Z < 30$). Среди таких элементов спектр Ni II изучался менее детально [15, 16], и коэффициенты чувствительности были вычислены не для всех астрофизически значимых оптических уровней.

Для того, чтобы численно найти значения q -факторов были рассчитаны частоты переходов для разных значений α или, что тоже самое, для разных значений параметра x из Ур. (4). Тогда q -фактор может быть найден по формуле:

$$q \approx \frac{\omega(x_+) - \omega(x_-)}{x_+ - x_-}. \quad (5)$$

Удобным является выбор: $x_{\pm} = \pm \frac{1}{8}$. Аналогично была оценена $\frac{\partial q}{\partial x}$. Когда $\frac{\partial q}{\partial x}$ мала, результат вычисления q -фактора достаточно надёжен. Если это не так, то есть сильное взаимодействие между уровнями, что требует более аккуратного рассмотрения. В таких случаях может быть полезно проследить за этими уровнями до меньших x , поэтому были сделаны дополнительные вычисления для $x = -\frac{3}{8}$. Если рассчитанное расщепление для взаимодействующих уровней при $x = 0$ близко к экспериментальному, то можно ожидать хорошей точности расчёта q -факторов даже в

этом случае. В качестве дополнительного критерия точности расчёта, выполнено сравнение вычисленных электронных g -факторов с доступными экспериментальными значениями [17].

Наблюдаемым в астрофизике линиям поглощения Ni II соответствуют переходы из основного состояния, которое характеризуется полным угловым моментом $J = 5/2$ и принадлежит к конфигурации $[\text{Ar}]3d^9$. Поскольку Ni II имеет девять электронов на открытых оболочках, его спектр плотный и сложный. Из-за близости уровней с одинаковыми полным угловым моментом J и чётностью P они сильно взаимодействуют друг с другом, особенно при высоких частотах, которые более интересны в астрофизике. Правилам отбора для электрических дипольных (E1) переходов из основного состояния соответствуют уровни с отрицательной чётностью и $J = 3/2, 5/2, 7/2$.

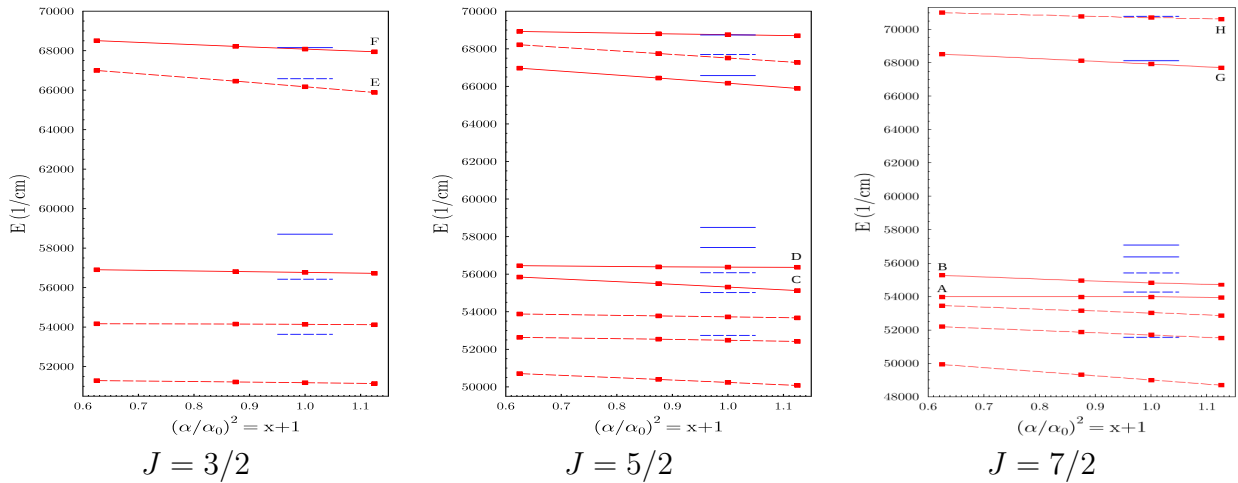


Рис. 3: Зависимость частот E1 переходов из основного состояния Ni II от $(\alpha/\alpha_0)^2$. Сплошные линии на графиках относятся к переходам, вызывающим астрофизический интерес, пунктирные линии — к другим переходам. Теоретические кривые получены путём кубической интерполяции между отмеченными точками, q -факторы соответствуют наклону кривых при $\alpha = \alpha_0$. Экспериментальные данные из [17] обозначены короткими горизонтальными линиями.

В диапазоне частот, который наблюдается в астрофизике на больших красных смещениях (т.е. примерно между 52000 и 70000 см^{-1} [18]) содержится пять низших нечётных уровней с $J = 3/2$, восемь уровней с $J = 5/2$ и семь уровней с $J = 7/2$. Все эти уровни принадлежат к конфигурациям $3d^8 4p$, $3d^7 4s 4p$ и $3d^7 4p 4d$. Расчёт q -факторов низколежащих E1 переходов однозарядного иона никеля был выполнен в рамках метода наложения конфигураций с использованием гамильтониана

Дирака-Кулона. Идентификация уровней выполнялась путём сравнения электронных g -факторов с экспериментальными значениями и с g -факторами, полученными в приближении LS -связи. Использование метода валентного CI позволяет воспроизвести наблюдаемый экспериментально порядок уровней, экспериментальные расщепления между ближайшими уровнями также воспроизводятся в расчёте, но в тоже время энергии низколежащих уровней недооценены.

Для большинства уровней производная $\partial q/\partial x$ довольно мала и отрицательна. Это означает, что ближайшие уровни с заданным J достаточно слабо взаимодействуют друг с другом. Однако, на Рис. (3) представлены четыре уровня с $\partial q/\partial x > 0$; в каждом из этих случаев имеются близкие уровни с большой отрицательной производной $\partial q/\partial x$, поэтому возможны псевдопересечения этих уровней и сильное отталкивание между ними. Такие уровни и представляют наибольший интерес для поиска вариации α .

В Таблице 1 представлены q -факторы для нескольких спектральных линий, которые ранее не изучались теоретически, но наблюдались в спектрах квазаров на большом красном смещении. Две из этих линий имеют относительно небольшие q -факторы, около -400 см^{-1} , а одна – самый большой по абсолютной величине q -фактор, $q = -2210 \text{ см}^{-1}$. Большая разница в коэффициентах чувствительности отдельных линий увеличивает общую чувствительность наблюдений к α -вариации и позволяет эффективно контролировать систематическую погрешность наблюдений.

По сравнению с предыдущими расчётами значительно увеличен размер активного пространства CI. Это не сильно изменило результаты, достигнуто хорошее согласие с расчётом [15]. Не следует ожидать, что точность расчёта в рамках метода CI может быть заметно улучшена: Ni II имеет 9 электронов на открытых оболочках, таким образом активное пространство CI практически невозможно насытить. С другой стороны, достигнутой точности достаточно для анализа астрофизических данных.

Вероятность E1 перехода характеризует сила осциллятора f_{osc} , от её величины зависит возможность наблюдения перехода. Не все силы осцилляторов известны экспериментально. Были рассчитаны f_{osc} в калибровках длины (L) и скорости (V) для всех переходов из Таблицы 1. Для переходов с $f_{\text{osc}} > 10^{-3}$ оба метода согласуются друг с другом в

Таблица 1: Результаты вычислений спектральных характеристик Ni II: частоты переходов ω , g -факторы и $\partial q/\partial x$ даны в см^{-1} . Рекомендованные значения g -факторов с погрешностями в скобках приведены в столбце q_{recom} . Электронные g -факторы уровней приведены как в jj , так и LS схемах связи. Экспериментальные значения для частот переходов и g -факторов взяты из таблиц NIST [17]. Выполнено сравнение g -факторов с результатами, полученными ранее [15]. Буквами А — Н отмечены уровни, которые взаимодействуют парами. Звездочками отмечены астрофизически наблюдаемые линии.

	Эксперимент		Теория					
	ω	g	ω	$g(jj)$	$g(LS)$	$\partial q/\partial x$	q_{recom}	q [15]
$^4D_{7/2}$	51558	1.420	49002	1.423	1.429	-159	-2490(150)	-2415
$^4D_{5/2}$	52739	1.365	50239	1.359	1.371	-240	-1290 (150)	-1231
$^4D_{3/2}$	53635	1.186	51183	1.187	1.200	-179	-310 (150)	
$^4G_{7/2}$	54263	1.025	51693	1.010	0.984	-394	-1390 (150)	-1361
$^4G_{5/2}$	55019	0.616	52482	0.609	0.571	-359	-470 (150)	-394
$^4F_{7/2}$	55418	1.184	53008	1.194	1.238	-211	-1180 (150)	-1114
$^4F_{5/2}$	56075	0.985	53728	0.996	1.029	-44	-410 (150)	-333
$^2G_{7/2}$ А	56371*	0.940	53972	0.923	0.889	-873	-250 (300)	-124
$^4F_{3/2}$	56425	0.412	54140	0.420	0.400	-370	-140 (150)	
$^2F_{7/2}$ В	57081*	1.154	54817	1.134	1.143	1358	-790 (300)	-700(250)
$^2D_{5/2}$ С	57420*	1.116	55315	1.100	1.200	-200	-1500 (150)	-1400(250)
$^2F_{5/2}$ Д	58493*	0.946	56376	0.966	0.857	271	-100 (150)	-20(250)
$^2D_{3/2}$	58706*	0.795	56770	0.799	0.800	-51	-370 (150)	
$^4P_{5/2}$	66571*	1.480	66169	1.506	1.600	-346	-2210 (150)	
$^4P_{3/2}$ Е	66580	1.550	66173	1.592	1.733	-370	-2290 (250)	
$^2F_{5/2}$	67695	0.960	67512	0.943	1.029	-161	-1900 (150)	
$^2F_{7/2}$ G	68131*	1.200	67921	1.186	1.143	-376	-1600 (200)	
$^2D_{3/2}$ F	68154*	1.020	68080	1.033	0.800	120	-1090 (250)	
$^2D_{5/2}$	68736*	1.264	68753	1.242	1.200	-332	-410 (150)	
$^4D_{7/2}$ H	70778	1.385	70704	1.383	1.429	530	-750 (200)	

пределах 10%. Погрешность расчёта сил осцилляторов для переходов с $f_{\text{osc}} > 10^{-4}$ составляет 20–30%. В пределах этой ошибки вычисленные f_{osc} согласуются с экспериментальными и наблюдаемыми результатами из работы [19]. Есть лишь одно исключение – это линия 58706 см^{-1} , где сила осциллятора на 50% больше, чем у Мортонна [19].

В четвёртой главе выполнены расчёты констант сверхтонкой структуры, учитывающие распределение заряда и намагниченности по ядру. Наблюдаемые постоянные СТС A могут быть записаны в следующей форме [20]:

$$A = g_I \mathcal{A}_0 (1 - \delta)(1 - \varepsilon). \quad (6)$$

Здесь g_I – ядерный g -фактор, $g_I \mathcal{A}_0$ – константа СТС в случае точечного

ядра, δ и ε – безразмерные поправки на распределение заряда (Брейта–Розенталь, BR [3]) и намагниченности (Бора–Вайскопфа, BW [4]) в ядре. \mathcal{A}_0 не зависит от ядерного g -фактора.

Поскольку плотность заряда внутри ядра относительно стабильна для различных изотопов, атомное ядро можно рассматривать как равномерно заряженный шар радиуса $R = \left(\frac{5}{3}\langle r^2 \rangle\right)^{1/2}$, где $r_{\text{rms}} = \langle r^2 \rangle^{1/2}$ – среднеквадратичный радиус ядра. Распределение намагниченности сильно зависит от спина ядра и нуклонной конфигурации каждого изотопа. В работе использована атомно-ядерная факторизация поправки BW, которая позволяет учесть сильную зависимость ядерной намагниченности от спина ядра и нуклонной конфигурации изотопа с помощью ядерного множителя $d_{\text{нuc}}$. Тогда поправки δ и ε для выбранного Z и электронного состояния могут быть записаны как:

$$\delta(R) = b_N \left(\frac{R}{\lambda_C}\right)^{2\gamma-1}, \quad \varepsilon(d_{\text{нuc}}, R) = b_M d_{\text{нuc}} \left(\frac{R}{\lambda_C}\right)^{2\gamma-1}. \quad (7)$$

Здесь b_N и b_M – безразмерные параметры независящие от радиуса и структуры ядра, которые могут быть найдены численно; для $s_{1/2}$ и $p_{1/2}$ состояний $\gamma = \sqrt{1 - (\alpha Z)^2}$, λ_C – комптоновская длина волны электрона ($\lambda_C = \frac{\hbar}{m_e c}$). Ядерный множитель определен так, чтобы $d_{\text{нuc}} = 0$ соответствовал точечному магнитному диполю в центре ядра, $d_{\text{нuc}} = 1$ – равномерно намагниченному шару радиуса R .

Раздел 4.1 посвящен параметризации констант СТС уравнением (6), которая включает три ядерные (g_I , $d_{\text{нuc}}$, R) и три атомные (\mathcal{A}_0 , b_N , b_M) характеристики. Атомные параметры одинаковы для различных изотопов. Информацию о ядре можно извлечь из экспериментально измеренных констант СТС, если рассчитаны атомные параметры. Для того, чтобы найти атомные параметры \mathcal{A}_0 , b_N и b_M из Ур. (6), необходимо варьировать значения $d_{\text{нuc}}$ и R .

Радиус ядра R обычно плавно меняется и лишь на несколько процентов, таким образом поправка δ практически одинакова для всех изотопов выбранного атома и вносит лишь небольшой вклад в СМА (1), поэтому величина СМА определяется формулой:

$${}^1\Delta^2 \approx \epsilon_2 - \epsilon_1 = (d_{\text{нuc}}^{(2)} - d_{\text{нuc}}^{(1)})b_M \left(\frac{R}{\lambda_C}\right)^{2\gamma-1}. \quad (8)$$

Как видно из Ур. (8), отношение $\eta = \frac{{}^1\Delta^2(s_{1/2})}{{}^1\Delta^2(p_{1/2})} = \frac{b_{M s_{1/2}}}{b_{M p_{1/2}}}$. Таким образом, параметр η может быть рассчитан в рамках используемого атомного пакета программ и использован для обработки экспериментально измеренных дифференциальных сверхтонких магнитных аномалий (2).

В *разделе 4.2* обсуждается способ расчёта атомных параметров для констант СТС и их зависимость от электронных корреляций.

В *разделе 4.3* рассмотрен способ расчёта ядерного множителя $d_{\text{яц}}$ в рамках одночастичной модели ядра. Ур. (8) задаёт связь между ядерными множителями различных изотопов, что позволяет исследовать границы применимости одночастичной ядерной модели.

В *разделе 4.4* на примере водородоподобных ионов изучены общие свойства СМА, а именно зависимость поправок Брейта-Розенталя и Бора-Вайскопфа от радиуса ядра и зависимость отношения поправок Бора-Вайскопфа для $s_{1/2}$ и $p_{1/2}$ состояний η от заряда ядра. Получено аналитическое выражение для η , которое имеет вид:

$$\frac{1}{\eta} = \frac{3}{4}\alpha^2 Z^2. \quad (9)$$

Как видно из Таблицы 2, аналитическое выражение (9) в случае тяжелых атомов согласуется с результатами численных расчётов и имеющимися экспериментальными данными.

Таблица 2: Атомные множители η для атомов Au, Tl, Fr, полученные по Ур. (9) в сравнении с результатами численных расчётов и экспериментальными данными.

η	Au	Tl	Fr
Ур. (9)	4.01	3.82	3.31
Численные расчёты	3.3 ^a	3.4(2) ^b	3.1(1) ^c
	4.0(3) ^d	3.1 ^e	
Эксперимент	–	2.84(78) ^f	–

Примечание: ^a [21]; ^b [22]; ^c [23]; ^d [5]; ^e см. раздел 4.5; ^f [24].

Раздел 4.5 посвящен расчёту констант СТС изотопов франция, для изотопов которого доступны экспериментальные данные высокой точности. Кроме того, отсутствие у франция стабильных изотопов позволяет определять их ядерные g -факторы только оптическими методами, что требует оценки СМА.

Основное состояние нейтрального атома франция $[\text{Rn}]7s$. В приближении Хартри–Фока–Дирака (ДФ) атом франция можно рассматривать как одноэлектронную систему в поле замороженного остова. На следующих этапах учитываются валентно-остовные электронные корреляции в рамках методов МВРТ или ЛСС. Теоретическая погрешность энергий связи для $7s_{1/2}$, $7p_{1/2}$ и $7p_{3/2}$ состояний Fr не превышает 0.25%.

В рамках приближения ДФ константа СТС $A(7p_{3/2})/g_I$ мала и нечувствительна к изменению радиуса ядра. Учет спиновой поляризации остова в рамках приближения случайной фазы (РФА) приводит к тому, что в константе СТС $A(7p_{3/2})$ появляются вклады от $s_{1/2}$ и $p_{1/2}$ парциальных волн. Вследствие этого $A(7p_{3/2})$ становится чувствительной к СМА. При этом зависимость $A(7p_{3/2})$ от радиуса ядра такая же, как у $A(7s_{1/2})$ и $A(7p_{1/2})$. Параметры b_N и b_M для состояния $7p_{1/2}$ меняются слабее, потому что константа СТС $A(7p_{1/2})$ почти в 10 раз больше, чем $A(7p_{3/2})$. В свою очередь примесь $p_{1/2}$ парциальной волны незначительно меняет $A(7s_{1/2})$. В итоговых результатах, полученных методами ДФ+МВРТ+РФА и ДФ+ЛСС+РФА, учтена также поправка на структурное излучение, которая смешивает различные парциальные волны. Эта поправка частично компенсирует вклад РФА. Итоговые значения параметров b_N и b_M для состояния $7p_{3/2}$ близки к нулю; атомный множитель $\eta(\text{Fr}) = 3.1(1)$. Выполненные расчёты позволяют обработать измеренные ДСМА.

Нечетно-четные изотопы Fr с числом нейтронов $N \leq 126$ ($A \leq 213$) имеют спин $I = 9/2$, одночастичная ядерная модель позволяет считать ядерные множители этих изотопов одинаковыми и равными $d_{\text{нuc}}^{I=9/2} = 0.3$. Тогда из экспериментальных ДСМА можно определить $d_{\text{нuc}} = 0.51$ для нечетно-нечетных изотопов $A = 206 - 212$. Этот результат согласуется с предсказанием одночастичной ядерной модели, которая может быть обобщена на случай нечетно-нечетных изотопов (один валентный протон и один нейтрон). Для ^{221}Fr аппроксимация дает $d_{\text{нuc}} = 0.05$. Этот результат может представлять особый интерес для ядерной физики вследствие малой поправки Бора-Вайскопфа.

Расчёт констант СТС, учитывающий СМА, для изоэлектронной серии золота (Au I, Hg II и Tl III) представлен в *разделе 4.6*. Золото и ионы этой изоэлектронной серии рассматриваются как системы с одним валентным электроном над заполненной оболочкой $5d^{10}$, включенной в атомный остов. Множитель $\eta(\text{Au})$ равен 3.74 в приближении DHF. На следующем этапе учитываются поправки RPA, множитель $\eta(\text{Au})$ увеличивается до 4.23. Учёт валентно-остовных электронных корреляций в рамках методов MBPT или LCC, существенно изменяют значения \mathcal{A}_0 , но b_N и b_M остаются стабильными. Параметры b_N и b_M изменяются за счет учёта поправки на структурное излучение, так как она смешивает парциальные волны с разными L , как и RPA. Вклады RPA и структурного излучения в параметры b_N и b_M почти компенсируют друг друга. Оба эти вклада в параметры b_N и b_M оказываются достаточно большими, что мешает стабильности результатов. Значения этих параметров практически совпадают для приближений DHF + MBPT и DHF + LCC. В качестве окончательного значения атомного множителя η для золота принимается среднее значение результатов, полученных в рамках различных приближений с погрешностью, включающей дисперсию этих результатов: $\eta(\text{Au}) = 4.0(3)$. Это значение совпадает со значением, использованном в работе [5], но заметно отличается от соответствующих значений, полученных и используемых ранее: 3.2 [4], 3.5 [25], 4.5 [20], 3.3 [21].

Аналогично были рассчитаны атомные множители η для Hg II и Tl III. Вклады RPA и структурного излучения для этих ионов меньше. В то же время энергии возбуждения из электронной оболочки $5d$ больше. Соответственно, отличие результатов применяемых методов для значений η для Hg II и Tl III меньше, чем для Au I. Окончательные значения $\eta(\text{Hg II}) = 3.7(1)$ и $\eta(\text{Tl III}) = 3.8(3)$.

Поправки Бора–Вайскопфа для ртути ранее подробно изучались, что позволяет оценить точность расчёта атомных параметров. Принимая во внимание совпадение теоретических и экспериментальных значений $A(6s_{1/2})$ для $^{201,199}\text{Hg}^+$, можно оценить возможную погрешность расчёта $\mathcal{A}_0(6s_{1/2})$ для Hg II в 2.5%. Учитывая сходство электронной структуры Au I и Hg II, можно ожидать, что такая же оценка справедлива и для атома золота.

Согласно одночастичной ядерной модели изомеру $^{193}\text{Au}^m$ соответствует ядерный множитель $d_{\text{нuc}} = 0.73$ и поправка Бора–Вайскопфа $\varepsilon = 1.4\%$.

Информацию о ядерном множителе ^{197}Au можно получить с помощью Ур. (8), используя $d_{\text{нuc}}(^{193}\text{Au}^m)$ в качестве эталонного значения. Тогда, экспериментально измеренная СМА: $^{197}\Delta^{193^m}(6s_{1/2}) = 11.2(11)\%$ [5] соответствует $d_{\text{нuc}}^{197} = -5.1(5)$. Погрешность $d_{\text{нuc}}$, рассчитанного по Ур. (8), определяется неопределенностью атомного множителя η и экспериментальной погрешностью соответствующего значения ДСМА и не включает возможную ошибку в референсном значении $d_{\text{нuc}}(^{193}\text{Au}^m)$. Ядерный множитель, полученный из экспериментальных данных соответствует поправке $\varepsilon^{197} = -9.6(9)\%$ для состояния $6s_{1/2}$. Ядерные множители $d_{\text{нuc}}^{193} = -5.4(8)$ и $d_{\text{нuc}}^{191} = -5.8(9)$ получены из значений СМА $|^{197}\Delta^{193}(s_{1/2})| \leq 1.5\%$ и $|^{197}\Delta^{191}(s_{1/2})| \leq 1.4\%$, приведенных в работе [5]. Та же процедура, что и для ^{197}Au , дает $d_{\text{нuc}}^{199} = -3.2(5)$ для ^{199}Au . Поправка Бора–Вайскопфа для состояния $6s_{1/2}$ изотопа ^{199}Au составляет $\varepsilon^{199} = 6.0(9)\%$. Этот ядерный множитель, извлеченный из экспериментальных данных, находится в согласии с предсказанием одночастичной ядерной модели: $d_{\text{нuc}}^{199} = -3.7$. В то же время коэффициенты для других изотопов с $I = 3/2$ золота, полученные в рамках одночастичной ядерной модели, сильно завышены.

В заключении сформулированы основные результаты диссертационной работы:

1. На примере изоэлектронной последовательности Mg изучена точность методов CI, CI+MBPT и CI+LCC. Показано, что метод CI+LCC обеспечивает более высокую точность, чем более простой метод CI+MBPT. В то время как относительная погрешность метода CI+MBPT была на уровне 0.1 – 0.2%, погрешность метода CI+LCC была примерно в два раза меньше, 0.05 – 0.1%. Метод валентного CI без учёта остовных корреляций на порядок менее точен.
2. В рамках метода наложения конфигураций вычислены коэффициенты чувствительности к α -вариации и силы осцилляторов для Ni II. В диапазоне частот, которые наблюдаются в астрофизике на больших красных смещениях, исследованы несколько спектральных линий, расчёты для которых ранее не проводились. Среди них две линии имеют относительно небольшие q -факторы, около -400 см^{-1} , а одна – самый большой в интересующем диапазоне частот q -фактор, $q = -2210 \text{ см}^{-1}$. Большие различия в

коэффициентах чувствительности отдельных линий увеличивают общую чувствительность наблюдений к α -вариации и позволяют эффективно контролировать систематические погрешности.

3. Показано, что аналитическое выражение для атомного множителя η , полученное в работе, воспроизводит результаты численных расчётов и экспериментальные данные. Используя теоретическое значение η , можно получить величину сверхтонкой магнитной аномалии из экспериментальных данных и, благодаря этому уточнить значения ядерных g -факторов короткоживущих изотопов.
4. Выполнен расчёт постоянных сверхтонкой структуры нейтральных атомов Fr, Au, а также золотоподобных ионов Hg и Tl. На основании экспериментальных данных исследованы изменения в распределении ядерной намагниченности в изотопических рядах Fr и Au, сделано сравнение с предсказаниями одночастичной ядерной модели. Выяснилось, что СМА между изомерами $11/2$ золота и стабильным изотопом ^{197}Au составляет $11.2\% \pm 1\%$ для состояния $6s_{1/2}$, что на порядок превышает погрешности измеренных констант СТС. Для определения g -факторов короткоживущих изотопов золота без потери экспериментальной точности поправку на СМА необходимо учитывать.

Список опубликованных по теме диссертации работ

Статьи, индексируемые в базах Web of Science и Scopus

1. **Konovalova E. A.** Coefficients of sensitivity to α variation for astrophysically relevant transitions in Ni II / E. A. Konovalova, M. G. Kozlov, R. T. Imanbaeva // Physical Review A. — 2014. — Vol. 90. — № 4. — P. 042512. (0,31 п.л. / 0,13 п.л.)
2. **Konovalova E. A.** Correlation, Breit, and QED effects in spectra of Mg-like ions / E. A. Konovalova, M. G. Kozlov // Physical Review A. — 2015. — Vol. 92. — № 4. — P. 042508. (0,50 п.л. / 0,25 п.л.)
3. **Konovalova E. A.** Calculation of Francium Hyperfine Anomaly / E. A. Konovalova, M. G. Kozlov, Yu. A. Demidov, A. E. Barzakh // Atoms. — 2018. — Vol. 6. — № 3. — P. 39. (0,56 п.л. / 0,13 п.л.)

4. **Коновалова Е. А.** Расчёт сверхтонкой магнитной аномалии в многоэлектронных атомах / Е. А. Коновалова, Ю. А. Демидов, М. Г. Козлов // Оптика и спектроскопия. — 2020. — Т. 128. — № 10. — С. 1420–1426. (0,44 п.л. / 0,13 п.л.)
5. **Konovalova E. A.** Atomic calculations of the hyperfine-structure anomaly in gold / Yu. A. Demidov, E. A. Konovalova, R. T. Imanbaeva, M. G. Kozlov, A. E. Barzakh // Physical Review A. — 2021. — Vol. 103. — № 3. — P. 032824. (0,44 п.л. / 0,13 п.л.)

Зарегистрированные программы для ЭВМ

6. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2018661590. Российская Федерация. Программный модуль к СИ-МВРТ для расчёта сверхтонкой магнитной аномалии в атомных спектрах. / **Коновалова Е. А.**, правообладатель: НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ; опубл. 10.09.2018.

Другие публикации

7. **Konovalova E. A.** Calculation of Thallium Hyperfine Anomaly / E. A. Konovalova, M. G. Kozlov, Yu. A. Demidov, A. E. Barzakh Radiation&Applications. — 2017. — Vol. 2. — № 3 — P. 181-185. (0,31 п.л. / 0,13 п.л.)
8. **Konovalova E. A.** Atomic calculations of the low-lying states of ions with two valence electrons within the configuration-interaction plus all-order method / E. A. Konovalova, M. G. Kozlov, M. S. Safronova // Online Abstracts — ECAMP-11th European Conference on Atoms, Molecules and Photons. — Aarhus. — 2013. — URL: <https://ecamp11.au.dk/fileadmin/www.ecamp11.dk/PosterAbstracts/T5/T5-35-Konovalova.pdf>. (0,06 п.л. / 0,06 п.л.)
9. **Konovalova E. A.** Search for fine-structure constant variation in Ni II / E. A. Konovalova // Abstract book of Workshop on precision physics and fundamental physical constants. — Dubna. — 2014. — P. 22. (0,06 п.л.)
10. **Konovalova E. A.** Precision Calculation of the Spectra of Mg-like Ions / E. A. Konovalova, M. G. Kozlov // Book of Abstracts — EGAS-47th conference of the European Group of Atomic Systems. — 2015. — Riga. — P. 102. (0,06 п.л. / 0,06 п.л.)
11. **Konovalova E. A.** Calculation of Thallium Hyperfine Anomaly / E. A. Konovalova, Yu. A. Demidov, M. G. Kozlov // Abstracts of Fifth

international conference on radiation and applications in various fields of research «RAD2017». — Budva. — 2017. — P. 264. (0,06 п.л. / 0,06 п.л.)

12. **Konovalova E. A.** Calculation of Hyperfine Anomaly in Heavy Atoms / E. A. Konovalova, M. G. Kozlov, Yu. A. Demidov // Online Abstracts. — ECAMP-13th European Conference on Atoms, Molecules and Photons. — Florence. — 2019. — P. 225. (0,06 п.л. / 0,06 п.л.)

Список цитируемой литературы

- [1] Webb J. K. Indications of a spatial variation of the fine structure constant / J. K. Webb, J. A. King, M. T. Murphy et al. // Phys. Rev. Lett. — 2011. — Vol. 107. — P. 191101.
- [2] Cocolios T. E. The collinear resonance ionization spectroscopy (CRIS) experimental setup at CERN-ISOLDE / T. E. Cocolios, H. H. Al Suradi, J. Billowes et al. // Nucl. Instr. Meth. B. — 2013. — Vol. 317. — P. 565–569.
- [3] Rosenthal J. E. The isotope shift in hyperfine structure / J. E. Rosenthal, G. Breit // Phys. Rev. — 1932. — Vol. 41. — № 4. — P. 459–470.
- [4] Bohr A. The influence of nuclear structure on the hyperfine structure of heavy elements / A. Bohr, V. F. Weisskopf // Phys. Rev. — 1950. — Vol. 77. — № 1. — P. 94–98.
- [5] Barzakh A. E. Hyperfine anomaly in gold and magnetic moments of $I^\pi = 11/2^-$ gold isomers / A. E. Barzakh, D. Atanasov, A. N. Andreyev et al. // Phys. Rev. C. — 2020. — Vol. 101. — № 3. — P. 034308.
- [6] Persson J. R. Table of hyperfine anomaly in atomic systems / J. R. Persson // At. Data Nucl. Data Tables. — 2013. — Vol. 99. — P. 62–68.
- [7] Ekström C. Nuclear ground-state spin of ^{185}Au and magnetic moments of ^{187}Au and ^{188}Au : further evidence for coexisting nuclear shapes in this mass region / C. Ekström, G. Wannberg, I. Ragnarsson et al. // Nucl. Phys. A. — 1980. — Vol. 348. — P. 25–44.

- [8] Harding R. D. Laser-assisted decay spectroscopy for the ground states of $^{180,182}\text{Au}$ / R. D. Harding, A. N. Andreyev, A. E. Barzakh et al. // *Phys. Rev. C*. — 2020. — Vol. 102. — № 2. — P. 024312.
- [9] Sucher J. Foundations of the relativistic theory of many-electron atoms / J. Sucher // *Phys. Rev. A*. — 1980. — Vol. 22. — № 2. — P. 348–362.
- [10] Kozlov M. G. Precision calculations of atoms with few valence electrons / M. G. Kozlov // *Int. J. Quant. Chem.* — 2004. — Vol. 100. — № 4. — P. 336–342.
- [11] Safronova M. S. Development of a configuration-interaction + all-order method for atomic calculations / M. S. Safronova, M. G. Kozlov, W. R. Johnson, D. Jiang // *Phys. Rev. A*. — 2009. — Vol. 80. — № 1. — P. 012516.
- [12] Тупицын И. И. Применение штурмовских разложений в расчетах сверхтонкой структуры атомных спектров / И. И. Тупицын, А. В. Логинов // *Оптика и спектроскопия*. — 2003. — Т. 94. — № 3. — С. 357–365.
- [13] Shabaev V. M. Model operator approach to the Lamb shift calculations in relativistic many-electron atoms / V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, V. A. Yerokhin // *Phys. Rev. A*. — 2013. — Vol. 88. — № 1. — P. 012513.
- [14] Dzuba V. A. Space-time variation of physical constants and relativistic corrections in atoms / V. A. Dzuba, V. V. Flambaum, J. K. Webb // *Phys. Rev. Lett.* — 1999. — Vol. 82. — № 5. — P. 888–891.
- [15] Dzuba V. A. α dependence of transition frequencies for ions Si II, Cr II, Fe II, Ni II and Zn II / V. A. Dzuba, V. V. Flambaum, M. G. Kozlov, M. Marchenko // *Phys. Rev. A*. — 2002. — Vol. 66. — № 2. — P. 022501.
- [16] Murphy M. T. Possible evidence for a variable fine-structure constant from QSO absorption lines: motivations, analysis and results / M. T. Murphy, J. K. Webb, V. V. Flambaum et al. // *Mon. Not. R. Astron. Soc.* — 2001. — Vol. 327. — № 4. — P. 1208–1222.
- [17] Kramida A. NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.9) / A. Kramida, Yu. Ralchenko, J. Reader, NIST ASD Team. — [Online]. // National

- Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. — 2021. — URL: <https://physics.nist.gov/asd> (2016, January 31).
- [18] Rahmani H. Constraining the variation of fundamental constants at $z \sim 1.3$ using 21-cm absorbers / H. Rahmani, R. Srianand, N. Gupta et al. // Mon. Not. R. Astron. Soc. — 2012. — Vol. 425. — № 1. — P. 556–576.
- [19] Morton D. C. Atomic Data for Resonance Absorption Lines. III. Wavelengths Longward of the Lyman Limit for the Elements Hydrogen to Gallium / D. C. Morton // Astrophys. J. Suppl. Series. — 2003. — Vol. 149. — № 1. — P. 205–238.
- [20] Stroke H. H. Configuration mixing and the effects of distributed nuclear magnetization on hyperfine structure in odd-A nuclei / H. H. Stroke, R. J. Blin-Stoyle, V. Jaccarino // Phys. Rev. — 1961. — Vol. 123. — № 4. — P. 1326–1348.
- [21] Song Sh. Multi-configuration Dirac–Fock calculations of the hyperfine structure constants A and B of neutral Cu, Ag and Au / Sh. Song, G. Wang, A. Ye, G. Jiang // J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. — 2007. — Vol. 40. — № 3. — P. 475–484.
- [22] Prosnjak S. D. Hyperfine structure in thallium atom: Study of nuclear magnetization distribution effects / S. D. Prosnjak, D. E. Maison, L. V. Skripnikov // J. Chem. Phys. — 2020. — Vol. 152. — № 4. — P. 044301.
- [23] Mårtesson-Pendrill A.-M. Magnetic moment distributions in Tl nuclei / A.-M. Mårtesson-Pendrill // Phys. Rev. Lett. — 1995. — Vol. 74. — P. 2184.
- [24] Chen T.-L. Absolute frequency measurement of the $6p_{1/2} \rightarrow 7s_{1/2}$ transition in thallium / T.-L. Chen, I. Fan, H.-C. Chen et al. // Phys. Rev. A. — 2012. — V. 86. — № 5. — P. 052524.
- [25] Eisinger J. Effects of the Distribution of Nuclear Magnetization on Hyperfine Structure / J. Eisinger, V. Jaccarino // Rev. Mod. Phys. — 1958. — Vol. 30. — № 2. — P. 528–541.