

ОТЗЫВ ОФИЦИАЛЬНОГО ОППОНЕНТА

на диссертационную работу **Коноваловой Елены Александровны** «Расчёты спектральных свойств атомов с несколькими валентными электронами», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика

Одни из важнейших задач современной фундаментальной физики - поиск возможной вариации постоянной тонкой структуры во времени и исследование сверхтонкой структуры тяжелых атомов с учётом поправок на конечный размер ядра. Возможности атомной спектроскопии позволяют использовать атомы как эффективные инструменты для изучения этих проблем, и обе эти задачи требуют проведения прецизионных расчётов электронной структуры атомов и ионов. Исследования зависимости частот переходов к возможным изменениям постоянной тонкой структуры невозможны без учета релятивистских эффектов, а беспрецедентно высокая точность измерения магнитных дипольных констант сверхтонкой структуры (СТС) вызывает необходимость учета сверхтонкой магнитной аномалии (СМА) при определении ядерных магнитных моментов. Данные требования определяют *актуальность темы* диссертационной работы Е. А. Коноваловой, в которой выполнен расчёт коэффициентов чувствительности к вариации постоянной тонкой структуры E1 переходов иона Ni⁺ (одного из самых тяжелых атомов, спектр которого наблюдается на больших красных смещениях), а также разработаны методы вычислений констант СТС, позволяющие учесть сверхтонкую магнитную аномалию.

Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения и списка литературы. Работа изложена на 108 страницах, содержит 5 рисунков и 14 таблиц.

Во *введении* сформулированы цели и задачи исследования, определены научная новизна, практическая значимость и положения, выносимые автором на защиту. В *первой главе* рассматриваются модель релятивистского гамильтониана Дирака–Кулона–Брейта и методы решения многоэлектронной задачи, используемые в настоящее время в расчётах спектров и СТС атомов. Проанализированы области применимости этих методов, принципиальные и практические ограничения их точности. Во *второй главе* на примере изоэлектронной серии атома Mg исследована точность методов учёта

электронных корреляций, рассмотренных в первой главе. Следует отметить удачный выбор объектов (атом магния и ионы его изоэлектронной серии) для проведения такой методической работы, так как для этих систем доступно большое количество теоретических данных и имеются надежные экспериментальные значения по частотам переходов. Достаточно точный учёт электронных корреляций даёт автору возможность оценить вклад брейтовского взаимодействия и поправок квантовой электродинамики в энергии атомных уровней. *Третья глава* посвящена поиску возможной вариации постоянной тонкой структуры во времени. Для поиска α -вариации наиболее интересны самые тяжелые из астрофизически значимых элементов. Среди них спектр Ni^+ изучался менее детально, и коэффициенты чувствительности к α -вариации были вычислены не для всех астрономически наблюдаемых оптических переходов. Данные, полученные в работе, существенным образом восполняют этот пробел. В *четвёртой главе* диссертации выполнены расчёты констант сверхтонкой структуры, учитывающие распределение заряда и намагничённости в ядре. Сверхтонкая магнитная аномалия в основном определяется разностью поправок Бора–Вайскопфа двух изотопов, и в работе было использовано приближение о представлении поправки в виде произведения атомного и ядерного вкладов. Отношение сверхтонких магнитных аномалий для разных атомных состояний не зависит от ядерного вклада и может быть рассчитано в рамках используемого в работе атомного пакета программ. Предложенное в работе аналитическое выражение для множителя η , позволило воспроизвести результаты численных расчётов и экспериментальные данные для нейтральных атомов Fr, Au, а также золотоподобных ионов Hg и Tl. На основании экспериментальных данных исследованы изменения ядерного вклада в изотопических рядах Fr и Au, сделано сравнение ядерных множителей с предсказаниями одночастичной ядерной модели. Сверхтонкая магнитная аномалия между изомерами $11/2$ золота и стабильным изотопом ^{197}Au составляет $11\% \pm 1\%$ для основного состояния $6s$, что на порядок превышает погрешности измеренных констант СТС. На основании этого автором сделан обоснованный вывод о необходимости учёта рассматриваемой поправки для определения магнитных моментов

короткоживущих изотопов золота, чтобы избежать потери экспериментальной точности.

Практически все данные, полученные в работе, являются либо **новыми**, либо для них **впервые** достигнута предельно высокая точность. Объединение методов наложения конфигураций и линейризованных связанных кластеров (CI+LCC) позволяет вычислять спектры атомов с несколькими валентными электронами с погрешностью в пределах 1% и дает возможность проводить расчёты широкого набора атомных свойств. В рамках данного метода автором были вычислены частоты переходов из основного состояния в несколько низколежащих мультиплетов атома магния и ионов его изоэлектронной серии, относительная погрешность вычислений составляет 0.1% и менее. Метод CI+LCC использовался и для расчёта констант сверхтонкой структуры низколежащих состояний атома золота. Это позволило обработать экспериментальные данные и получить информацию об изменении ядерных множителей в изотопическом ряду золота.

Научная и практическая значимость выполненного исследования определяется в первую очередь насущной потребностью в прецизионном моделировании частот атомных переходов. Сравнение частот переходов, зарегистрированных в лабораторных условиях и полученных от космических объектов, позволяет определить чувствительность частот переходов к возможному изменению постоянной тонкой структуры. В астрофизике на больших красных смещениях был исследован ряд спектральных линий Ni^+ , расчёты коэффициентов чувствительности которых к вариации параметра α впервые выполнены в рецензируемой работе. Важной частью работы является рассмотрение влияния поправок на сверхтонкую магнитную аномалию при определении ядерных магнитных моментов из анализа экспериментальных констант сверхтонкой структуры.

Степень обоснованности и достоверности результатов и выводов, сделанных в работе, определяется использованием апробированных теоретических подходов. Рассчитанные энергии переходов в спектрах магния и ионов его изоэлектронной серии, коэффициенты чувствительности к возможной α -вариации ряда спектральных линий Ni^+ находятся в хорошем согласии с ранее

опубликованными данными. Результаты, полученные в рамках разработанного подхода расчёта констант СТС с учетом сверхтонкой магнитной аномалии, подтверждаются как экспериментальными, так и теоретическими данными.

Основное содержание работы изложено в 6 печатных работах, 5 из которых в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК. Автореферат и публикации с необходимой полнотой отражают содержание диссертации.

В ходе ознакомления с работой у меня возникли следующие вопросы:

1. В работе приведены относительные теоретические погрешности расчета энергий изоэлектронной последовательности атома Mg методом CI+LCC как с учетом квантовоэлектродинамических поправок, так и без них. При этом непонятно, почему учет КЭД ухудшает точность расчета триплетных (3D и 3F) состояний для некоторых тяжелых ионов?
2. Для расчета энергетического спектра иона Ni^+ и его чувствительности к вариации параметра тонкой структуры автором использовался метод валентного наложения конфигураций. Насколько систематическая погрешность этого метода может повлиять на абсолютные величины рассчитанных q-факторов? Чем может быть обусловлена относительно большая ошибка оценка сил осцилляторов некоторых линий иона Ni^+ (в частности, 55418 см^{-1} и 56371 см^{-1})?
3. В работе получено простое аналитическое выражение для оценки атомного множителя η (ур.4.3.2), и данные, приведенные в таблице 4.4 диссертации, показывают хорошее согласие с результатами расчётов водородоподобных ионов и нейтральных атомов. Но было бы интересно понять границы применимости этого уравнения?

Указанные **замечания** не влияют на высокую оценку работы, не затрагивают основных положений и выводов представленной работы.

Диссертационная работа Коноваловой Елены Александровны «Расчёты спектральных свойств атомов с несколькими валентными электронами» является научно-квалификационной работой, выполненной на высоком профессиональном уровне. Учитывая актуальность выполненных исследований, научную новизну и практическую значимость полученных результатов, считаю, что представленная диссертация в полной мере соответствует требованиям пп. 9-14

«Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 года. Автор диссертации Коновалова Елена Александровна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

Официальный оппонент,
профессор кафедры физической химии химического факультета
Федерального государственного бюджетного образовательного
учреждения высшего образования «Московский
государственный университет имени М.В. Ломоносова»
доктор физ.-мат. наук, доцент

Пазюк Елена Александровна

14.02.2023

ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В.
Ломоносова»,

Химический факультет

Адрес: 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 3, ГСП-1, химический
факультет МГУ

Телефон: +7(495) 939-28-25

Электронная почта: pazyukea@gmail.com pazyuk@phys.chem.msu.ru

Подпись Е.А.Пазюк удостоверяю

И.о. декана химического факультета МГУ,

д.х.н., профессор



С.С.Карлов