



**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**  
федеральное государственное автономное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Санкт-Петербургский политехнический  
университет Петра Великого»  
(ФГАОУ ВО «СПбПУ»)

ИНН 7804040077, ОГРН 1027802505279,  
ОКПО 02068574

Политехническая ул., 29, Санкт-Петербург, 195251  
тел.: +7(812)297 2095, факс: +7(812)552 6080  
office@spbstu.ru

на № \_\_\_\_\_ от \_\_\_\_\_

УТВЕРЖДАЮ

Проректор Санкт-Петербургского  
политехнического университета Петра  
Великого по научно-организационной  
деятельности

доктор технических наук

**Ю.С. Ключков**



2023 года

ОТЗЫВ

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

Атомная спектроскопия на порядки превышает точность достижимую в большинстве других экспериментов. Это позволяет использовать атомы в качестве прецизионных инструментов для изучения фундаментальной физики. В диссертационной работе Е.А. Коноваловой 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.

В работе Коноваловой Е.А. на примере атома магния и магниеподобных ионов исследована точность комбинированных методов расчёта их электронной структуры. Далее эти методы были применены к однозарядному иону никеля. Были вычислены коэффициенты чувствительности к вариации постоянной тонкой структуры  $\alpha$  и силы осцилляторов для  $Ni^+$ . В диапазоне частот, которые наблюдаются в астрофизике на больших красных смещениях, исследованы несколько спектральных линий, расчёты для которых ранее не выполнялись.

В последние годы достигнута высокая точность экспериментов по измерению магнитных дипольных констант сверхтонкой структуры (СТС)

методами лазерной спектроскопии. Константы сверхтонкой структуры содержат информацию о ядерных магнитных моментах изотопов, но при этом они также чувствительны к распределению заряда и намагниченности внутри атомного ядра. Учёт конечных размеров ядра приводит к зарядовой и магнитной поправкам к константе СТС точечного ядра, что является причиной появления сверхтонкой магнитной аномалии. В работе Е.А. Коноваловой предложен метод расчёта отношения сверхтонких магнитных аномалий ( $\eta$ ) для разных атомных состояний. Используя теоретическое значение  $\eta$ , можно получить величину сверхтонкой магнитной аномалии из экспериментальных данных и, благодаря этому, уточнить значения ядерных магнитных моментов короткоживущих изотопов.

Диссертационная работа состоит из введения, четырёх глав, заключения, списка цитируемой литературы и содержит 108 страниц, 5 рисунков и 14 таблиц. Список литературы включает 144 наименования.

**Во введении** дано обоснование новизны, актуальности, теоретической и практической значимости диссертационной работы, сформулированы её цели и задачи.

**В первой главе** рассматриваются модель релятивистского гамильтониана Дирака–Кулона–Брейта 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. В обзоре отмечена исключительная роль комбинированных методов расчёта свойств атомов с несколькими валентными электронами. В их рамках остовные и остовно-валентные корреляции учитываются пертурбативно, используя многочастичную теорию возмущений (many-body perturbation theory, MBPT) или линеаризованный метод связанных кластеров (linearized coupled clusters, LCC), а валентные корреляции рассчитываются в рамках метода наложения конфигураций (configuration interaction, CI). Такой подход требует деления полного многоэлектронного гильбертова пространства на два подпространства валентное и остовное. Остовно-остовные и остовно-валентные корреляции учитываются при построении эффективного гамильтониана, тогда как валентные корреляции учитываются явно. Следует отметить весьма полный и критический анализ методов моделирования электронной структуры многоэлектронных атомных систем.

**Во второй главе** на примере изоэлектронной серии атома магния 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. В работе получено упрощенное аналитическое выражение для лэмбовского сдвига s-состояний многоэлектронных систем.

Было 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.

**Третья глава** посвящена поиску возможной вариации постоянной тонкой структуры во времени. Для поиска  $\alpha$ -вариации наиболее интересны самые тяжелые из астрофизически значимых элементов ( $Z < 30$ ). Среди таких элементов спектр  $Ni^+$  изучался менее детально, и коэффициенты чувствительности к  $\alpha$ -вариации (q-факторы) были вычислены не для всех астрофизически значимых оптических уровней.

Расчёт q-факторов низколежащих E1 переходов однозарядного иона никеля был выполнен в рамках метода наложения конфигураций с использованием гамильтониана Дирака-Кулона. Использование метода валентного CI позволяет воспроизвести наблюдаемый экспериментально порядок уровней, экспериментальные расщепления между ближайшими уровнями также воспроизводятся в расчёте, но в то же время энергии низколежащих уровней недооценены. 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  $-400 \text{ см}^{-1}$ , а одна – самый большой в интересующем астрофизиков диапазоне частот q-фактор,  $q = -2210 \text{ см}^{-1}$ . Большие разницы в коэффициентах чувствительности отдельных линий увеличивают общую чувствительность наблюдений к  $\alpha$ -вариации и позволяют эффективно контролировать систематические погрешности. Поэтому, полученные в этой главе результаты представляются весьма интересными.

**В четвёртой главе** выполнены расчёты констант сверхтонкой структуры, учитывающие распределение заряда и намагниченности по ядру. Распределение намагниченности сильно зависит от спина ядра и нуклонной конфигурации каждого изотопа. В работе использована атомно-ядерная факторизация магнитной поправки (Бора–Вайскопфа), которая позволяет учесть сильную зависимость ядерной намагниченности от спина ядра и нуклонной конфигурации изотопа с помощью ядерного множителя  $d_{\text{нuc}}$ . Для расчёта ядерного множителя в работе использовалась одночастичная ядерная модель. Зарядовая поправка (Брейта–Розенталь) при переходе от одного изотопа к другому меняется слабо, поскольку плотность заряда внутри ядра относительно стабильна для различных изотопов.

Сверхтонкая магнитная аномалия в основном определяется разностью поправок Бора–Вайскопфа двух изотопов. Отношение сверхтонких магнитных аномалий для разных атомных состояний  $\eta$  не зависит от ядерного вклада и может быть рассчитано в рамках используемого в работе атомного пакета программ. Получено аналитическое выражение для атомного множителя  $\eta$ ,

которое воспроизводит результаты численных расчётов и экспериментальные данные.

В рамках комбинированных методов HFD+MBPT и HFD+LCC 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 ядерных множителей  $d_{\text{нuc}}$  с предсказаниями одночастичной ядерной модели. Выяснилось, что сверхтонкая магнитная аномалия между изомерами 11/2 золота и стабильным изотопом  $^{197}\text{Au}$  составляет  $11.2\% \pm 1\%$  для состояния  $6s_{1/2}$ , что на порядок превышает погрешности измеренных констант СТС. На основании этого сделан вывод, что для определения магнитных моментов короткоживущих изотопов золота без потери экспериментальной точности эту поправку необходимо учитывать.

Таким образом, цель настоящей работы, состоящая в расчёте коэффициентов чувствительности спектральных линий к возможным изменениям постоянной тонкой структуры и констант СТС к распределению заряда и намагниченности внутри атомного ядра полностью достигнута. 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  $\alpha$ -вариации некоторых спектральных линий  $\text{Ni}^+$  находятся в хорошем согласии с ранее опубликованными данными, другие получены впервые. Разработанный метод расчёта констант СТС, учитывающий сверхтонкую магнитную аномалию, проверялся в случае водородоподобных ионов, когда могут быть выполнены аналитические вычисления.

#### **По работе имеются замечания:**

1. В работе для оценки лэмбовских сдвигов используется аналитическая формула 2.6. В настоящее время есть более точный метод на основе модельного потенциала Шабаева, Тупицына и Ерохина [Phys. Rev. A **88** (1), 012513 (2013)]. Следовало оценить точность формулы 2.6.
2. Прецизионный расчёт частот переходов  $\text{Al}^+$  актуален в связи использованием перехода  $^1\text{S}_0 \rightarrow ^3\text{P}_0$  в оптических атомных часах. В этом случае также интересен расчёт других свойств, таких как атомные поляризуемости. Стоило обсудить возможно ли применить использованные в диссертации методы для расчета этих свойств.
3. В главе, посвященной расчету иона  $\text{Ni}^+$  выбран метод валентного наложения конфигураций, тогда как в других частях диссертации учитываются и валентно-остовные корреляции. Следовало объяснить, почему в этом случае используется менее точный метод и оценить соответствующие погрешности.
4. Для использования формулы 4.16 необходимо определить величину  $d_{\text{нuc}}$  эталонного изотопа. Не понятно, как определяется эта величина.

**Заключение.** Отмеченные недостатки не затрагивают основных положений и выводов диссертационной работы, которое представляет собой законченное научное исследование, выполненное на высоком научном уровне.

Основное содержание работы изложено в 6 печатных работах, 5 из которых в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных ВАК. Содержание опубликованных работ соответствует содержанию диссертации. Полученные в диссертации научные результаты могут быть использованы специалистами, работающими в МГУ им. М.В. Ломоносова, СПбГУ, и ФТИ им. А.Ф. Иоффе. Диссертационная работа Коноваловой Елены Александровны «Расчёты спектральных свойств атомов с несколькими валентными электронами» соответствует паспорту специальности 1.3.3. Теоретическая физика. Содержание автореферата полностью соответствует основным положениям и выводам диссертационной работы.

Диссертация соответствует требованиям пункта 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 года, и является научно-квалификационной работой, в которой на примере изоэлектронной последовательности Mg изучена точность методов CI, CI+MBPT и CI+LCC; в рамках метода CI вычислены коэффициенты чувствительности к  $\alpha$ -вариации и силы осцилляторов для однозарядного иона никеля; получено аналитическое выражение для атомного множителя  $\eta$ ; выполнен расчёт постоянных сверхтонкой структуры с учётом зарядовой и магнитной поправок на конечный размер ядра для атомов Fr, Au, а также золотоподобных ионов Hg и Tl. Автор диссертации Коновалова Елена Александровна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

Отзыв обсуждался на заседании кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого 1 февраля 2023 года.

Профессор кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого  
д. ф.-м. н.

Иванов В.К.

Заведующий кафедры физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого  
д. ф.-м. н.

Апушкинский Е.Г.

1 февраля 2023 г.

Россия, 195251, г. Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 29, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого».

тел.: +7 (812) 552-77-90;

e-mail: [ivanov\\_vk@spbstu.ru](mailto:ivanov_vk@spbstu.ru)



Иванов В.К.  
Апушкинский Е.Г.  
ДОСТОВЕРЯЮ  
... специалист  
...  
2023г.