

ОТЗЫВ

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

Диссертационная работа Е.А. Коноваловой посвящена расчётам электронной структуры многоэлектронных атомов и ионов с целью решения двух задач физики фундаментальных взаимодействий. Первая – поиск вариации постоянной тонкой структуры α . Для этого спектры, полученные в лабораторных условиях необходимо сравнить со спектрами квазаров, наблюдаемых на больших красных смещениях. Чувствительность спектральных линий к возможной вариации α не может быть определена экспериментально и требует привлечения теории. Никель наряду с железом являются наиболее тяжелыми астрофизически наблюдаемыми элементами. При этом спектр и свойства однозарядного иона никеля были изучены неполностью. Диссертационная работа Е.А. Коноваловой восполняет этот пробел.

Второй задачей является учёт вклада поправок Бора-Вайскопфа и Брейта-Розенталь в константы сверхтонкой структуры (СТС). Магнитные моменты короткоживущих изотопов могут быть получены только из констант СТС. При этом поправки Бора-Вайскопфа и Брейта-Розенталь нарушают пропорциональность между ядерными g -факторами и константами СТС. Оценка этих поправок необходима для контроля погрешностей извлекаемых ядерных g -факторов. В диссертации Е.А. Коноваловой выполнен расчёт поправок Бора-Вайскопфа и Брейта-Розенталь для атомов золота и франция; проанализированы причины аномального возрастания поправки Бора-Вайскопфа для стабильного изотопа золота.

Автореферат диссертации изложен ясным языком и хорошо структурирован. Можно сделать только небольшие замечания касательно расхождений в обозначениях. Например, в тексте пишется “см⁻¹”, а на рисунках используется английский вариант “1/cm”. Другой пример – это “КЭД” (в тексте) и QED (на рисунке 2). Конечно, это замечание никак не снижает высокий уровень работы.

Результаты диссертации в полной мере апробированы на профильных научных конференциях и опубликованы в ведущих международных рецензируемых научных журналах.

В целом, диссертационная работа Е.А. Коноваловой на тему «Расчёты спектральных свойств атомов с несколькими валентными электронами» представляется законченной научной работой в области теоретической атомной физики и удовлетворяет требованиям пункта 9 «Положения о

присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 года, а её автор – Коновалова Елена Александровна заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

Доцент кафедры квантовой механики
физического факультета Санкт-Петербургского государственного университета
к. ф.-м. н.

Л.В. Скрипников

Подпись Скрипникова Л.В. заверяю



«17» февраля 2023 г.

Адрес: 198504, Санкт-Петербург, Старый Петергоф, ул. Ульяновская 1, СПбГУ, кафедра квантовой механики
тел.: 8 (812) 428-45-52;
e-mail: l.skripnikov@spbu.ru



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

ОТЗЫВ

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

Диссертационная работа Е.А. Коноваловой посвящена расчётам свойств электронной структуры атомов и ионов, которые представляют интерес для двух актуальных задач современной астрофизики и ядерной физики: (а) поиска вариации постоянной тонкой структуры α по наблюдениям абсорбционных спектров квазаров и (б) уточнение ядерных g -факторов короткоживущих изотопов за счет учета поправки на ядерную магнитную аномалию.

Спектры квазаров наблюдаются на больших красных смещениях, что позволяет проверить гипотезу П.А.М. Дирака о возможной вариации во времени фундаментальных физических констант на масштабах, сравнимых с возрастом Вселенной. При этом потребность в теоретических расчётах спектральных свойств атомов и ионов вызвана тем, что спектральные линии одного и того же элемента имеют разные коэффициенты чувствительности (q -факторы) к изменению α и величину этих коэффициентов экспериментально не измерить. В диссертационной работе проведены расчеты q -факторов для ультрафиолетовых линий однозарядного иона никеля (NiII) в диапазоне 1413 – 1940 Å, причем несколько коэффициентов получены впервые. Никель и железо являются самыми распространенными тяжелыми элементами во Вселенной, а частоты их линий обладают высокой чувствительностью к вариации α . Многочисленные линии ионов NiII и FeII наблюдаются в абсорбционных спектрах квазаров на различных красных смещениях, чем и определяется актуальность проведенных Е.А. Коноваловой расчетов q -факторов для линий NiII.

В последние годы достигнута высокая точность измерения постоянных сверхтонкой структуры короткоживущих изотопов. Из экспериментальных данных могут быть получены дифференциальные сверхтонкие магнитные аномалии. Причиной их возникновения являются изменения распределения ядерной намагниченности при переходе от одного изотопа к другому. Из дифференциальных магнитных аномалий, используя теоретические расчёты, можно уточнить магнитные моменты ядер короткоживущих изотопов. Для учёта поправок к константам сверхтонкой структуры Е.А. Коноваловой был усовершенствован метод расчёта и осуществлена проверка разработанного метода путем сравнения результатов вычислений с аналитическими данными в

водородоподобных ионах. Затем этот метод был использован для расчёта констант сверхтонкой структуры изотопов франция и золота.

Результаты диссертации в полной мере апробированы на профильных научных конференциях и опубликованы в рецензируемых научных журналах.

В целом, диссертационная работа Е.А. Коноваловой на тему «Расчёты спектральных свойств атомов с несколькими валентными электронами» представляется законченным научным исследованием в области теоретической атомной физики и удовлетворяет требованиям пункта 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 года, а её автор – Коновалова Елена Александровна заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

Ведущий научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, д. ф.-м. н.

С.А. Левшаков

Подпись Левшакова С.А. заверяю

Зам. зав. отделом кадров

И.С. Бузеник



14 февраля 2023 г.

Адрес: 194021, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26;
тел.: (812) 292-7113;
e-mail: lev.astro@mail.ioffe.ru

ОТЗЫВ

на автореферат диссертационной работы Коноваловой Елены Александровны «Расчеты спектральных свойств атомов с несколькими валентными электронами», представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.03.03 – Теоретическая физика.

Диссертация Коноваловой Е.А. посвящена изучению свойств электронной структуры атомом и ионов в приложении к поиску возможной вариации постоянной тонкой структуры во времени и исследованию сверхтонкой структуры тяжелых атомов с учётом распределения ядерной намагниченности.

В работе произведен расчёт спектров изоэлектронной серии атома магния оценена точность методов: CI (configuration interaction), CI+MBPT (configuration interaction + many body perturbation method) и CI+LCC (configuration interaction + linearized coupled clusters). Показано, что 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 два раза.

Важным результатом работы является расчёт коэффициентов чувствительности низколежащих спектральных линий однозарядного иона никеля на возможные изменения постоянной тонкой структуры во времени, который ранее не проводился и произведен автором впервые. Хотелось бы отметить, что автором найден переход с рекордно большим для Ni⁺ коэффициентом чувствительности к α -вариации, который может послужить отправной точкой для дельнейшего анализа возможной вариации константы тонкой структуры.

Все результаты работы получены хорошо разработанными методами, которые подробно описаны автором. А именно, в качестве начального приближения для расчёта энергетического спектра и свойств атомных систем использовался метод Хартри–Фока–Дирака. Электронные корреляции учитывались с помощью комбинированных методов расчёта. Полное многоэлектронное пространство конфигураций разделялось на два подпространства: валентное и остовное. Остовные и остовно-валентные корреляции учитывались согласно многочастичной теории возмущений (MBPT) или же при помощи линейризованного метода связанных кластеров. Валентные корреляции были учтены в рамках метода наложения конфигураций.

По материалам автореферата можно сделать следующие замечания:

- Рисунки, представленные в автореферате, имеют местами слишком мелкий шрифт и трудно читаемы. Некоторые подписи к осям можно было существенно упростить, сократив количество нулей.
- В Таблице 1 явно не указана погрешность теоретического расчета

Указанные замечания не затрагивают основных положений представленной диссертации и носят лишь косметический характер.

Можно заключить, что представленная к защите работа является законченным исследованием с убедительными результатами и выводами. Её основное содержание отражено в научных публикациях, в том числе – в авторитетных рецензируемых международных журналах и доложено на ряде престижных конференций. Достоверность полученных результатов и сделанные выводы сомнений не вызывают.

Представленная диссертационная работа отвечает всем требованиям пункта 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 года, её автор – Коновалова Елена Александровна – заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.03.03 – теоретическая физика. Диссертация соответствует.

Ведущий научный сотрудник
Физический факультет
Университета ИТМО

С.С. Батурич

15 февраля 2023 г.

*Поручить Батуричу С.С.
уточнить
менеджер ОПС
Герзев Д.В.*



ОТЗЫВ

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

Диссертационная работа Е.А. Коноваловой посвящена расчётам электронной структуры многоэлектронных атомов и ионов с целью решения двух задач фундаментальной физики. Первая – поиск вариации постоянной тонкой структуры. Для этого спектры, полученные в лабораторных условиях необходимо сравнить со спектрами квазаров, наблюдаемых на больших красных смещениях. Чувствительность спектральных линий к возможной вариации α не может быть определена экспериментально и требует проведения теоретического расчёта. Никель наряду с железом являются наиболее тяжелыми астрофизически наблюдаемыми элементами. При этом спектр и свойства однозарядного иона никеля были неполностью изучены. Диссертационная работа Е.А. Коноваловой восполняет этот пробел.

Второй задачей является учёт вклада поправок Бора-Вайскопфа и Брейта-Розенталь в константы сверхтонкой структуры (СТС). Магнитные моменты короткоживущих изотопов могут быть получены только из констант СТС. При этом поправки Бора-Вайскопфа и Брейта-Розенталь нарушают пропорциональность между ядерными g -факторами и константами СТС. Оценка этих поправок необходима для контроля за погрешностью извлекаемых ядерных g -факторов. В диссертации Е.А. Коноваловой выполнен расчёт поправок Бора-Вайскопфа и Брейта-Розенталь для атомов золота и франция; проанализированы причины аномального возрастания поправки Бора-Вайскопфа для стабильного изотопа золота.

Используемые в диссертационной работе теоретические методы и подходы полностью соответствуют поставленным задачам. Полученные результаты обладают значительной степенью научной новизны и оригинальности, а их достоверность не вызывает сомнений. Сформулированные в работе выводы обоснованы и достаточно полны.

При прочтении автореферата я заметил, что для обозначения поправок квантовой электродинамики используются как русское, так и английское сокращения; подписи на рисунке 3 плохо читаемы и используется английское сокращение $1/\text{cm}$, для обозначения cm^{-1} . Высказанные замечания не снижают достоинств данной диссертационной работы.

Основные результаты диссертационного исследования были опубликованы в научных рецензируемых журналах, входящих в перечень ВАК и базы научного цитирования Web of Science и Scopus, представлены на международных научных конференциях и включены в гранты РФФИ и РНФ.

Диссертационная работа Е.А. Коноваловой на тему «Расчёты спектральных свойств атомов с несколькими валентными электронами» является законченной научной работой в области теоретической атомной физики и удовлетворяет требованиям пункта 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации №842 от 24 сентября 2013 года (пп. 9 –14). Коновалова Елена Александровна заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

Заведующий кафедрой физики Санкт-Петербургского государственного электротехнического университета
д. т. н.

А.С. Чирцов

Подпись Чирцова А.С. заверяю



ЗАВЕРЯЮ:
М.В. СОКОЛОВА
2023

«13» февраля 2023 г.

Адрес: 197022, Санкт-Петербург, ул. Профессора Попова, д. 5
тел.: 8 (812) 346-29-82;
e-mail: alex_chirtsov@mail.ru