

**ЗАКЛЮЧЕНИЕ ОБЪЕДИНЕННОГО ДИССЕРТАЦИОННОГО  
СОВЕТА 99.2.018.02,**

созданного на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена» Министерства просвещения Российской Федерации и федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации по **диссертации на соискание ученой степени кандидата наук**

аттестационное дело № \_\_\_\_\_

решение диссертационного совета от 2 марта 2023 г. протокол № 3

О присуждении Коноваловой Елене Александровне,  
гражданке Российской Федерации,  
ученой степени кандидата физико-математических наук

Диссертация «Расчёты спектральных свойств атомов с несколькими валентными электронами» по специальности 1.3.3. Теоретическая физика принята к защите 2 декабря 2022 года, протокол № 13-2 объединенным диссертационным советом 99.2.018.02, созданным на базе федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена» Министерства просвещения Российской Федерации (191186, Санкт-Петербург, наб. р. Мойки, 48) и федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО» Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (197101 Санкт-Петербург, Кронверкский пр., д. 49) приказ № 248/нк от 03.03.2016 г.

Соискатель Коновалова Елена Александровна, 21 августа 1988 года рождения.

В 2010 году соискатель с отличием окончила Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Марийский государственный университет». Присвоена квалификация физик, специальность физика.

В 2013 году прошла обучение в аспирантуре федерального государственного бюджетного учреждения «Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра «Курчатовский институт» по специальности 01.04.02 Теоретическая физика.

С 29.09.2013 по настоящее время Коновалова Елена Александровна работает младшим научным сотрудником 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».

Диссертация 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** – КОЗЛОВ МИХАИЛ ГЕННАДЬЕВИЧ, 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».

**ОФИЦИАЛЬНЫЕ ОППОНЕНТЫ:**

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

- ПАЗЮК ЕЛЕНА АЛЕКСАНДРОВНА, доктор физико-математических наук, доцент, профессор кафедры физической химии химического факультета федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова».

Дали положительные отзывы на диссертацию.

**ВЕДУЩАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ:** федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого», г. Санкт-Петербург в своем положительном отзыве, подписанным доктором физико-математических наук, профессором кафедры физики Ивановым Вадимом Константиновичем, доктором физико-математических наук, заведующим кафедрой физики Апушкинским Евгением Геннадиевичем указала, что 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.

Помимо этого, в диссертационной 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.

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.

**По теме диссертации опубликовано 12 работ** общим объемом (2,8 п.л. авторский вклад 1,2 п.л.), в изданиях, индексируемых в Web of Science и Scopus, в рецензируемых журналах, включенных в перечень изданий, рекомендованных ВАК опубликовано 5 статей (2,25 п.л./ 0,77 п.л.), 6 статей в других изданиях (0,55 п.л./0,43 п.л.) и 1 свидетельство о регистрации программы для ЭВМ. В диссертации отсутствуют недостоверные сведения об опубликованных соискателем ученой степени работах.

**Наиболее значимые работы:**

- 1. Konovalova E.A. Coefficients of sensitivity to  $\alpha$  variation for astrophysically relevant transitions in Ni II / E.A. Konovalova, M.G. Kozlov, R.T. Imanbaeva // Physical Review A. – 2014. – V. 90. – 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. – V. 92. – P. 042508 (0,5 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. – V.6. – 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. – 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. – V. 103. – P. 032824 (0,44 п.л. / 0,13 п.л.).

На диссертацию и автореферат поступило 4 отзыва, их прислали:

1. Кандидат физико-математических наук, доцент кафедры квантовой механики физического факультета федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет» Скрипников Леонид Владимирович.

Отзыв положительный. Содержит замечание:

- В тексте пишется “см<sup>-1</sup>”, а на рисунках используется английский вариант “1/cm”.
- Используется “КЭД” – в тексте, и “QED” на рисунке 2.

2. Кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник физического факультета федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО» Батурин Станислав Сергеевич.

Отзыв положительный. Содержит 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 расчёта.

3. Доктор технических наук, заведующий кафедрой физики федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)» Чирцов Александр Сергеевич.

Отзыв положительный. Содержит замечание:

- 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  $\text{cm}^{-1}$ .

4. Доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник федерального государственного бюджетного учреждения науки «Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе» Российской академии наук Левшаков Сергей Анатольевич.

Отзыв положительный. Отзыв без замечаний.

Выбор официальных оппонентов и ведущей организации обосновывается их компетентностью и достижениями в соответствующей отрасли науки, наличием публикаций в соответствующей сфере исследования, а также решением объединенного диссертационного совета 99.2.018.02 от 2 декабря 2022 г. протокол № 13-2 в соответствии пунктам 22, 24 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденным постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (в действующей редакции).

**ДИССЕРТАЦИОННЫЙ СОВЕТ ОТМЕТИЛ, ЧТО СОИСКАТЕЛЕМ  
ПОЛУЧЕНЫ СЛЕДУЮЩИЕ НОВЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ**

- дана оценка точности использованных в работе численных методов на примере изоэлектронной серии магния;
- рассчитаны коэффициенты чувствительности и силы осцилляторов для переходов в однозарядном ионе никеля;
- получено аналитическое выражение для отношения сверхтонких магнитных аномалий для  $s_{1/2}$  и  $p_{1/2}$  состояний тяжелых атомов;
- определены постоянные сверхтонкой структуры нейтральных атомов франция, золота, а также золотоподобных ионов ртути и таллия с учётом поправок на конечный размер ядра;
- на основании экспериментальных данных **вычислены** ядерные множители, которые описывают распределение намагниченности в ядрах изотопов франция и золота.

**Теоретическая значимость исследования обоснована тем, что:**

- рассчитанные в работе коэффициенты чувствительности частоты переходов ионов  $Ni^+$  позволяют наложить ограничение на изменение постоянной тонкой структуры во времени при анализе лабораторных и астрофизических измерений;
- сверхтонкая магнитная аномалия между изомерами золота со спином  $11/2$  и стабильным изотопом  $^{197}Au$  составляет  $11\% \pm 1\%$  для состояния  $6s_{1/2}$ , поэтому при определении ядерных магнитных моментов короткоживущих изотопов золота без потери экспериментальной точности эту поправку необходимо учитывать.

**Значение полученных результатов исследования для практики подтверждается тем, что:**

- частоты переходов иона  $^{27}Al^+$  могут использоваться в оптических атомных

часах;

– полученные в работе результаты могут быть использованы для анализа астрофизических наблюдений на больших красных смещениях и уточнения ядерных магнитных моментов короткоживущих изотопов.

**Достоверность результатов исследования обеспечена тем, что:**

- в работе использованы апробированные теоретические подходы;
- 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 спектральных линий  $Ni^+$ , которые изучались ранее, находятся в хорошем согласии с опубликованными данными;
- разработанный метод расчёта констант сверхтонкой структуры, учитывающий сверхтонкую магнитную аномалию, проверялся на водородоподобных ионах, для которых можно провести сравнение с аналитическими вычислениями.

**Личный вклад соискателя состоит в его непосредственном участии на всех этапах научного исследования:**

- в постановке цели и задач исследования;
- в анализе литературных данных по исследованиям в области многочастичной квантовой механики;
- в выборе методов исследования;
- в проведении вычислений с использованием выбранных методов;
- в анализе полученных результатов и их сравнении с существующими экспериментальными и теоретическими данными;
- в подготовке публикаций.

**Диссертация Коноваловой Елены Александровны «Расчёты спектральных свойств атомов с несколькими валентными электронами»**



является самостоятельной, завершённой научно-квалификационной работой, в которой рассмотрены две задачи, связанные с изучением свойств электронной структуры атомов и ионов. Первая – поиск возможной вариации постоянной тонкой структуры во времени. Вторая – исследование сверхтонкой структуры тяжёлых атомов с учётом конечных размеров ядра. В работе на примере изоэлектронной серии магния исследована точность выбранных численных методов.

В рамках метода наложения конфигураций вычислены коэффициенты чувствительности к  $\alpha$ -вариации ( $q$ -факторы) и силы осцилляторов для однозарядного иона никеля. Исследованы несколько спектральных линий, которые наблюдаются в астрофизике на больших красных смещениях и 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 диапазоне частот  $q$ -фактор,  $q = -2210 \text{ см}^{-1}$ . Большие различия в коэффициентах чувствительности отдельных линий увеличивают общую чувствительность наблюдений к  $\alpha$ -вариации и позволяют эффективно контролировать систематические погрешности.

В работе показано, что полученное аналитическое выражение для отношения сверхтонких магнитных аномалий для  $s_{1/2}$  и  $p_{1/2}$  состояний тяжёлых атомов воспроизводит результаты численных расчётов и экспериментальные данные. Используя теоретическое значение этого отношения, можно получить величину сверхтонкой магнитной аномалии из экспериментальных данных и, благодаря этому уточнить значения ядерных магнитных моментов короткоживущих изотопов. Разработан метод расчёта констант сверхтонкой структуры, позволяющий оценивать сверхтонкие магнитные аномалии, точность которого исследована на примере водородоподобных ионов. В рамках этого метода 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.

В ходе защиты диссертации были высказаны некоторые критические замечания и заданы вопросы:

– В работе приведены относительные погрешности расчёта энергий переходов в изоэлектронной последовательности атома магния как с учётом КЭД поправок, так и без них. При этом непонятно, почему учёт КЭД поправок ухудшает точность расчёта триплетных состояний некоторых тяжёлых ионов. *Получен ответ: Точность учета корреляционных эффектов методом лианеризованных связанных кластеров составляет примерно 0.1%. При этом ошибки расчетов систематически отличаются для триплетов и синглетов. КЭД поправки в начале изоэлектронной серии меньше 0.1% и мало влияют на согласие с экспериментом. Для более тяжёлых ионов КЭД поправки достигают величины порядка 0.1% и в целом несколько улучшают согласие теории с экспериментом. При этом КЭД поправки мало отличаются для триплетов и синглетов, поэтому улучшая согласие для одних, они ухудшают его для других.*

– В таблице 1 автореферата явно не указана погрешность теоретического расчёта энергий переходов. *Получен ответ: Относительная погрешность расчёта энергий переходов не превышает 5%, что достаточно для их надёжной идентификации.*

– В начале главы 3 написано, что релятивистские поправки имеют порядок  $\alpha^2 Z^2$ . Видимо это связано с неудачным определением порядка поправки. *Получен ответ: В работе используется атомная система единиц, в которой нерелятивистская энергия связи электрона с ядром порядка 1 а.е.. В свою очередь в релятивистских единицах энергия покоя электрона имеет порядок 1 р.е., а энергия связи электрона с ядром –  $\alpha^2$  р.е.. Поэтому в этих системах единиц релятивистские поправки имеют разный порядок по  $\alpha$ .*

– для использования формулы 4.16 необходимо определить величину  $d_{\text{пис}}$  эталонного изотопа. Непонятно, как определяется эта величина. *Получен ответ: В качестве эталонных выбираются изотопы, для которых одночастичная ядерная модель может быть применима: сферические ядра с одним валентным нуклоном и большим ядерным магнитным моментом.*

**На заседании 2 марта 2023 года** диссертационный совет пришел к выводу, о том что диссертация представляет собой научно-квалификационную работу, которая соответствует критериям, предъявляемым к диссертациям на соискание ученой степени кандидата наук (п. 9 «Положения о присуждении ученых степеней», утвержденного Постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 года № 842) и принял решение присудить Коноваловой Е.А. ученую степень кандидата физико-математических наук за теоретические исследования, направленные на поиск возможной вариации постоянной тонкой структуры во времени и расчёт сверхтонкой структуры тяжелых атомов с учётом распределения ядерной намагниченности.

**При проведении тайного голосования** диссертационный совет в количестве 13 человек, из них 6 докторов наук по специальности рассматриваемой диссертации, участвовавших в заседании, из 18 человек, входящих в состав совета, проголосовали: «за» присуждение ученой степени – 13, «против» присуждения ученой степени – 0, «недействительных бюллетеней» – 0.

/ Председатель

диссертационного совета:

Колобов Александр Владимирович

Ученый секретарь

диссертационного совета:

Яковлева Светлана Анатольевна

«02» марта 2023 г.