

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

экспертной комиссии диссертационного совета 99.2.018.02
по диссертации **Коноваловой Елены Александровны**
«Расчёты спектральных свойств атомов с несколькими валентными электронами»

Экспертная комиссия диссертационного совета 99.2.018.02 в составе:

- д. физ.-мат. н., профессор Гаврилов Сергей Петрович;
 - д. физ.-мат. н., профессор Мирошниченко Георгий Петрович;
 - д. физ.-мат. н., профессор Беляев Андрей Константинович;
- рассмотрела материалы по диссертации Е.А. Коноваловой.

Комиссия пришла к следующим выводам.

1. Соответствие темы и содержания диссертации научной специальности и отрасли науки.

Диссертация Е.А. Коноваловой «Расчёты спектральных свойств атомов с несколькими валентными электронами» представлена на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

Диссертация соответствует паспорту специальности 1.3.3. Теоретическая физика: пункту 6 «Теория многих взаимодействующих частиц. Квантовая теория физических явлений в ядрах, атомах и молекулах».

Работа посвящена исследованию двух проблем фундаментальной физики, которые могут быть сведены к изучению свойств электронной структуры атомов и ионов. Первая – поиск вариации постоянной тонкой структуры во времени. Вторая – исследование сверхтонкой структуры тяжелых атомов с учётом распределения ядерной намагниченности. В качестве начального приближения для расчёта энергетических спектров и свойств рассмотренных атомных систем в диссертации 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 учитывались, с помощью многочастичной теории возмущений или линеаризованного метода связанных кластеров, а валентные корреляции обрабатывались в рамках метода наложения конфигураций. Точность использованных методов была оценена на примере расчёта спектров ионов изоэлектронной серии атома Mg. Далее был 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. Последняя глава диссертации посвящена изучению аномалий сверхтонкой структуры в атомных спектрах. Для того, чтобы получить сверхтонкие магнитные аномалии из экспериментальных данных, требуется выполнить расчёт отношения аномалий для основного и возбуждённого состояний атома. В работе проведены аналитические и численные расчёты отношения аномалий. Выполнен расчёт постоянных сверхтонкой структуры нейтральных атомов Fr, Au, а также золотоподобных ионов Hg и Tl с учётом конечных размеров ядра. На основании экспериментальных данных исследованы изменения в распределении ядерной намагниченности в изотопических рядах Fr и Au, сделано сравнение с предсказаниями одночастичной ядерной модели.

Диссертация по содержанию соответствует специальности 1.3.3. Теоретическая физика, по которой совету предоставлено право проведения защит диссертаций.

2. Полнота изложения материалов диссертации в работах, опубликованных автором и выполнение требований к публикации основных научных результатов диссертации

По теме диссертационной работы автором опубликовано 5 статей в журналах, входящих в перечень ВАК, а также цитируемых в базах данных Web of Science, Scopus, РИНЦ. Общий объём – 4,5 печ. л., вклад автора диссертации – 1,71 печ. л.

Web of Science и Scopus:

1. Konovalova, E. A. Coefficients of sensitivity to α variation for astrophysically relevant transitions in Ni II / Konovalova E.A., Kozlov M.G., Imanbaeva R.T. // Physical Review A. — 2014 — Vol. 90. — P. 042512.

2. Konovalova, E.A. Correlation, Breit, and QED effects in spectra of Mg-like ions / Konovalova E.A., Kozlov M.G. // Physical Review A. — 2015 — Vol. 92. — P. 042508.

3. Konovalova, E.A. Calculation of Francium Hyperfine Anomaly / Konovalova E.A., Kozlov M.G., Demidov Yu.A., Barzakh A.E. // Atoms. — 2018 — Vol.6. — P. 39.

4. Коновалова, Е.А. Расчёт сверхтонкой магнитной аномалии в многоэлектронных атомах / Коновалова Е.А., Демидов Ю.А., Козлов М.Г. // Оптика и спектроскопия. — 2020 — Т. 128. — С. 1420 – 1426.

5. Demidov, Yu.A. Atomic calculations of the hyperfine-structure anomaly in gold / Demidov Yu.A., Konovalova E.A., Imanbaeva R.T., Kozlov M.G., Barzakh A.E. // Physical Review A. — 2021 — Vol. 103. — P. 032824.

В опубликованных автором диссертации печатных работах основные положения и результаты диссертационного исследования отражены достаточно полно.

3. Отсутствие в диссертации заимствованного материала без ссылки на автора и (или) источник заимствования, результатов научных работ, выполненных соискателем в соавторстве, без ссылок на соавторов.

Отчет о выявленных текстовых совпадениях и о количественно оцененной степени близости каждого выявленного совпадения (технический отчет о текстовых совпадениях) был проведен в системе «Антиплагиат ВУЗ» «15» июля 2022 года.

Анализ информации о совпадающих фрагментах, их источниках и количественно оценённой степени близости каждого выявленного совпадения показал, что **оригинальный текст в проверяемом документе составляет 88,13%, что является допустимым** для рассмотрения рукописи как оригинальной научной работы.

Содержательная экспертиза текстовых совпадений с учетом ссылок на источники совпадающих фрагментов, детальной информации о совпадающих фрагментах показала, что выявленные совпадения представляют собой корректное цитирование источников с указанием ссылок на них.

4. Выводы.

Комиссия считает:

1. Диссертация **Коноваловой Елены Александровны** «Расчёты спектральных свойств атомов с несколькими валентными электронами» по теме и содержанию соответствует специальности и отрасли науки, по которым диссертационному совету предоставлено право принимать к защите диссертации.

2. Результаты диссертационного исследования достаточно полно отражены в публикациях, в том числе цитируемых в базах данных Web of Science, Scopus – 5 публикаций.

3. Диссертация Коноваловой Е.А. «Расчёты спектральных свойств атомов с несколькими валентными электронами» является оригинальной авторской научной работой.

4. Диссертация соответствует требованиям ВАК РФ к кандидатским диссертациям (п. 9 Положения о присуждении ученых степеней), так как является самостоятельной научно-квалификационной работой, в которой на примере расчёта спектров ионов изоэлектронной серии атома магния оценена точность использованных теоретических методов; выполнен расчёт коэффициентов чувствительности низколежащих спектральных линий однозарядного иона никеля на возможные изменения постоянной тонкой структуры во времени; проведены аналитические и численные расчёты отношения аномалий для основного и первого возбуждённого состояний атома, что позволяет получить сверхтонкие

постоянных сверхтонкой структуры нейтральных атомов Fr, Au, а также золотоподобных ионов Hg и Tl.

5. Диссертация может быть принята к защите в диссертационном совете 99.2.018.02.

Председатель:  д.ф.-м.н., профессор Гаврилов С.П.

Члены комиссии:  д.ф.-м.н., профессор Мирошниченко Г. П.

 д.ф.-м.н., профессор Беяев А. К.