

## ОТЗЫВ

председателя диссертационного совета Андреева Олега Юрьевича на диссертацию Олейниченко Александра Витальевича на тему: «Развитие релятивистского метода связанных кластеров для электронных состояний молекул с несколькими открытыми оболочками», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

Диссертация Олейниченко А.В. посвящена изучению свойств молекул в рамках квантовой механики. В работе представлен оригинальный метод для численного моделирования электронной структуры атомов и двухатомных молекул. Метод основан на релятивистском методе связанных кластеров. Разработанный в рамках диссертации численный метод по многим параметрам является наиболее точным методом расчёта свойств молекул и определяет мировой уровень в данной области. В настоящее время численное моделирование молекул очень востребовано, и используется как для подготовки современных экспериментов, так и для анализа и интерпретации экспериментальных данных. Для многих наиболее значимых экспериментов теоретические расчёты играют ключевую роль. Рекордная точность разработанного метода и востребованность численного моделирования определяют высокую актуальность диссертации Олейниченко А.В..

Диссертация состоит из введения, четырёх глав и заключения.

В введении чётко сформулированы актуальность работы, современное состояние области исследования, сформулированы положения, выносимые на защиту.

В первой главе диссертации обсуждается развитие теории связанных кластеров, в частности, развитие релятивистского подхода. В главе сформулирован формализм эффективных операторов, действующих в конечномерном подпространстве, и обсуждается решение обобщённого уравнения Блоха. Далее рассматривается метод связанных кластеров в пространстве Фока (FS-CC), подробно описана структура кластерного оператора. Обсуждается проблема вторгающихся состояний: состояний из внешнего пространства, близких по энергии к состояниям из активного подпространства, и способы её решения. Рассматривается возможность учёта релятивистских и КЭД поправок с помощью гамильтониана Дирака-Кулона-Брейта и модельного потенциала, описывающего радиационные КЭД поправки. В конце главы обсуждается алгоритм реализации моделей FS-CC.

Во второй главе рассматриваются модели учёта трёхкратных возбуждений в секторах  $0h1p$  и  $0h2p$ . Обсуждаются критерии отбора значимых диаграмм в модели FS-CCSDT и возникающие при этом погрешности. Разработан подход для отбора значимых амплитуд при сохранении всех слагаемых в амплитудных уравнениях модели FS-CCSDT. Проведена численная проверка эффективности предложенного подхода.

В третьей главе представлена реализация метода связанных кластеров для молекул с тремя и более открытыми оболочками. В главе исследуются подходы к учёту трёхкратных возбуждения для сектора  $0h3p$ . Программная реализация разработанных подходов

проверялась на конкретных расчётах электронных состояний нескольких атомов и молекул. В частности, представлен расчёт уровней энергий атома La.

В четвёртой главе представлены применения разработанного метода для вычисления матричных элементов операторов. Вычисление матричных элементов в методе связанных кластеров представляет определённую проблему. В связи с этим в диссертации рассматриваются возможные подходы к расчёту матричных элементов. Были проведены расчёты низколежащих электронных состояний молекулы RbCs и дипольных моментов электронных переходов между ними. Также исследовалось сверхтонкое взаимодействие в молекуле KCs. Была исследована зависимость матричных элементов сверхтонкого расщепления от колебательного квантового числа, от межъядерного расстояния. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными.

В диссертации Олейниченко А.В. разработан метод расчёта электронной структуры молекул релятивистским методом связанных кластеров. Метод применён для исследования свойств атома La с учётом трёхкратных возбуждений и свойств молекул RbCs и KCs, где также была разработана конечно-разностная техника для расчёта матричных элементов операторов. В диссертации Олейниченко А.В. содержится решение важной научной задачи реализации релятивистского метода связанных кластеров с учётом двукратных и трёхкратных возбуждений. Эта задача имеет огромное значение для развития моделирования молекулярных систем и его приложения к решению актуальных задач современной физики, в частности, поиска новой физики.

Диссертация написана очень хорошо. Разработанные методы представлены достаточно подробно, но имеется несколько вопросов:

1. В каком виде учитывалось брейтовское взаимодействие. Учитывалось ли запаздывание?
2. Учитывался ли вклад отрицательного спектра уравнения Дирака?
3. Какое время и какие компьютерные ресурсы потребовались для проведения расчётов с учётом трёхкратных возбуждений и расчётов, представленных в четвёртой главе?
4. Что сейчас является основным ограничением точности расчётов с применением метода связанных кластеров?

Диссертация Олейниченко Александра Витальевича на тему: «Развитие релятивистского метода связанных кластеров для электронных состояний молекул с несколькими открытыми оболочками» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 01.09.2016 № 6821/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Олейниченко Александр Витальевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика. Пункты 9 и 11 указанного Порядка диссертантом не нарушены.

Председатель диссертационного совета

Доктор физико-математических наук, без учёного звания,

профессор, кафедра квантовой механики  
Санкт-Петербургского государственного университета

*Олег Андреев*

Андреев О.Ю.

27 октября 2021 г.

Личную подпись  
*Андреев О.Ю.*  
заверяю  
И.О. начальника отдела кадров МЭЭ  
И.И. Константинова  
*Конст*  
*27.10.2021*

