

## ОТЗЫВ

**члена диссертационного совета Ерохина Владимира Анатольевича 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.**

Диссертационная работа А. В. Олейниченко посвящена развитию теории связанных кластеров для прецизионных расчетов электронной структуры и матричных элементов одночастичных операторов в атомах и двухатомных молекулах. Важно, что развивается релятивистский вариант метода, применимый для тяжелых атомов и молекул и для расчетов матричных элементов операторов, локализованных вблизи ядра (в частности, сверхтонкого взаимодействия и P- и T-нечетных взаимодействий). Вычисление матричных элементов таких операторов в молекулах, содержащих атомы тяжелых элементов, является сложной задачей, в которой необходимо надежно учитывать как релятивистские эффекты, так и эффекты электронной корреляции.

Одним из основных результатов работы является разработка и численная реализация метода связанных кластеров с полным учетом трехкратных возбуждений для атомов и молекул с одним и двумя электронами (дырками) в валентной оболочке. Полный учет трехкратных возбуждений является весьма сложной и ресурсоемкой вычислительной задачей; ее решение позволяет улучшить точность расчетов на порядок по сравнению с учетом только одно- и двукратных возбуждений. Впечатляющие возможности метода продемонстрированы расчетами электронной структуры атомов таллия и свинца. Эти расчеты являются на сегодняшний день наиболее точными в мире для атомов тяжелых щелочных элементов.

Другим важным результатом диссертации является обобщение метода связанных кластеров и его численная реализация для систем с тремя электронами (дырками) вне вакуума Ферми. Это обобщение необходимо для выполнения расчетов, в частности, электронной структуры атомов лантанидов и ионов ранних актинидов, которые сейчас активно используются в экспериментах по поискам новой физики. Выполнены расчеты с полным учетом трехкратных возбуждений для уровней энергии низколежащих электронных состояний атома лантана. Продемонстрировано значительное увеличение точности расчета по сравнению с методами, учитывающими только одно- и двукратные возбуждения.

Третьим важным результатом диссертационной работы является обобщение метода связанных кластеров для расчетов матричных элементов одночастичных операторов. Обобщение включает случай недиагональных матричных элементов, требуемый, в частности, для расчетов вероятностей электронных переходов в атомах и молекулах. Для вычисления матричных элементов использована конечно-разностная схема, основанная на включении дополнительного оператора в начальный гамильтониан и последующей линеаризации возникающих поправок к энергии. Разработанная теория была применена для расчета дипольных моментов электронных переходов в молекуле RbCs. Полученные результаты позволили экспериментально наблюдать и интерпретировать ровибронные

переходы низкой интенсивности для молекулы RbCs. Разработанная конечно-разностная техника адаптирована для вычисления матричных элементов операторов, описывающих так называемые «остовные» свойства. Выполнен количественный расчет зависимости сверхтонкой структуры спектров молекулы KCs от межъядерного расстояния.

Актуальность диссертационной работы несомненна в связи с впечатляющим прогрессом экспериментальной спектроскопии ультрахолодных атомов и молекул, достигнутым за последние годы. Особо важными являются исследования эффектов, нарушающих пространственную четность и временную инвариантность. Благодаря очень высокой точности спектроскопических измерений, таким экспериментам удается получать ограничения на расширения Стандартной модели, которые успешно конкурируют с результатами, получаемыми на ускорителях в области высоких энергий. Методы теории связанных кластеров, разрабатываемые в диссертационной работе, позволяют выполнять расчеты электронных состояний атомов и молекул на высоком уровне точности, необходимом для интерпретации уже существующих и подготовки будущих экспериментов.

Достоверность результатов, полученных в диссертационной работе, подтверждается хорошим согласием теоретических расчетов с имеющимися экспериментальными данными, проведением вычислений различными методами и использованием комплекса программных кодов, разработанных автором диссертации. Результаты работы докладывались на российских и международных конференциях и своевременно опубликованы в ведущих международных научных журналах.

В целом, диссертация представляет собой законченную научную работу, выполненную на высоком мировом уровне. Стоит особо отметить высокое качество написания диссертации: продуманность текста, ясность изложения материала и наглядность анализа и представления результатов.

По содержанию диссертации можно сделать следующие замечания:

- В работе выполнен сравнительный анализ различных методов частичного учета трехкратных возбуждений для описания уровней энергий. Такой анализ является весьма ценным, так как приближенные методы являются существенно более дешевыми с точки зрения вычислительных ресурсов. Было бы полезно выполнить такой анализ не только для уровней энергии, но и для матричных элементов «остовных» операторов. Из атомных расчетов известно, что приближенный метод, пригодный для описания энергий, не всегда успешен для описания сверхтонкого расщепления.
- В главе 4 развивается конечно-разностная схема для вычисления матричных элементов одночастичных операторов в методе связанных кластеров. Было бы полезно более подробно обсудить область применимости этой схемы. Представляется, что схема может оказаться неприменимой, например, в случае когда есть два близлежащих электронных состояния и одночастичный оператор приводит к их перемешиванию.

Данные замечания являются второстепенными, не касаются основных положений диссертации и не снижают общего положительного впечатления о диссертационной работе.

Подводя итоги, можно заключить, что 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.

Член диссертационного совета  
доктор физико-математических наук  
главный научный сотрудник  
Отделения Центр перспективных исследований  
Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого

Ерохин Владимир Анатольевич

18 октября 2021 г

