

## ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Митропольского Ивана Андреевича  
на диссертацию Олейниченко Александра Витальевича  
«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

Актуальность темы диссертации А.В.Олейниченко определяется экспериментальным развитием прецизионных исследований в области атомной и молекулярной физики, которое требует все более точных расчетов свойств многоэлектронных систем. Это достигается не только совершенствованием компьютерных технологий и наращиванием вычислительных мощностей, но и созданием новых алгоритмов и теоретических схем, которые приводят к надежным результатам и позволяют контролировать точность использованных приближений. Диссертационная работа А.В.Олейниченко является примером успешной реализации такой программы. Она посвящена развитию релятивистского метода связанных кластеров, расширению его возможностей и области применимости, а также приложению к решению актуальных задач современной физики.

Актуальность работы А.В.Олейниченко связана и с тем, что развиваемый в ней метод связанных кластеров и подобные ему подходы, в основе которых лежит идея экспоненциальной параметризации волновых функций, представляются наиболее перспективными для достижения нового уровня точности численного моделирования электронной структуры атомов и молекул, адекватного современному уровню развития экспериментальных методик. К преимуществам метода связанных кластеров можно отнести возможность систематического построения последовательно улучшаемых приближений при решении многоэлектронного уравнения Шредингера (или его релятивистских аналогов). Вместе с тем, для метода характерны и ограничения, подходы к преодолению которых также были предложены соискателем в диссертационной работе. В их числе ограниченность множества электронных состояний, доступных для моделирования, и недостаточная приспособленность найденных волновых функций к расчету матричных элементов от операторов, описывающих физические свойства системы.

Научная новизна и практическая значимость результатов диссертации состоят в создании высокоточных версий релятивистского метода связанных кластеров в пространстве Фока. Они могут быть использованы, в частности, для прецизионного моделирования электронной структуры молекул, использующихся для проведения экспериментов по поиску физики за пределами Стандартной модели; для теоретического поиска молекул, перспективных с точки зрения возможности лазерного охлаждения; для анализа и интерпретации данных спектроскопических экспериментов. Предложенные соискателем методики открывают путь к моделированию электронной структуры и свойств атомов и молекул тяжелых элементов на принципиально новом уровне точности.

Диссертацию А.В.Олейниченко отличает высокая степень оригинальности и новизны представленных результатов. Впервые предложен ряд новых версий релятивистской теории связанных кластеров в пространстве Фока, полностью или частично учитывающих вклады трехкратных возбуждений, разработана их классификация и проведен их подробный анализ с применением аргументов многочастичной теории возмущений. Также разработан первый релятивистский вариант метода для описания состояний, определяемых конфигурациями типа «три частицы над вакуумом Ферми». Не имеет аналогов систематический анализ вкладов эффектов остоной релаксации и корреляции в матричные элементы остоного свойства, проведенный для достаточно частного, но вместе с тем весьма показательного случая константы магнитного дипольного сверхтонкого взаимодействия.

В диссертации не только предложены новые подходы, но выявлены области применимости предложенных моделей и предварительно оценены пределы их погрешностей. Разработанные модели применены для наиболее точных на данный момент расчетов электронных состояний атомов с несколькими электронами на валентной оболочке (Tl, Pb). Выполненные в работе прецизионные расчеты функций дипольных моментов электронных переходов в RbCs позволили впервые экспериментально наблюдать для этой молекулы ровибронные переходы низкой интенсивности, а также интерпретировать их.

Конечно-разностная техника, хорошо зарекомендовавшая себя ранее при расчете валентных свойств, впервые успешно применена для вычисления матричных элементов оператора остоного свойства (магнитного дипольного сверхтонкого взаимодействия). Впервые с высокой точностью установлена зависимость от межъядерного расстояния как диагональных, так и внедиагональных матричных элементов сверхтонкого взаимодействия в молекуле KCs. Впервые систематически проанализирован вклад эффектов остоной релаксации и корреляции в матричные элементы остоного свойства. Достоверность полученных результатов подтверждается хорошим согласием рассчитанных величин как с данными спектроскопических экспериментов, так и с доступными результатами других теоретических расчетов.

По уровню результатов, объему исследования и публикации результатов диссертация А.В.Олейниченко существенно превосходит требования к кандидатским диссертациям.

Замечаний по существу работы у меня нет. К недостаткам работы можно отнести обилие аббревиатур и обозначений, затрудняющих чтение. Обойтись совсем без них, по-видимому, нельзя, но можно было бы время от времени напоминать их содержание. Например, «теорию возмущений» лучше было бы сохранить, не прибегая к сокращению «ТВ», а загадочный «атом N» лучше было бы назвать азотом.

В целом диссертация Александра Витальевича Олейниченко 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 соискателем не нарушены.

Член диссертационного совета  
доктор физ.-мат. наук,  
профессор кафедры ядерно-физических  
методов исследования СПбГУ



И.А.Митропольский

25 октября 2021 г.

