

**INSTITUTE OF MATHEMATICS AND
DIGITAL TECHNOLOGY**

MONGOLIAN ACADEMY OF SCIENCES
Enkhtaivan avenue 54b, Bayanzurkh district,
Ulaanbaatar 13330, Mongolia
Tel: (976-11) 45 80 90, E-mail: imdt@mas.ac.mn

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Чулуунбаатара Очбадраха на диссертацию Волчковой Анны Михайловны на тему «Эффект Зеемана и сверхтонкое расщепление в бороподобных многозарядных ионах с ненулевым спином ядра», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

Диссертация Волчковой А. М. посвящена изучению эффекта Зеемана и сверхтонкой структуры в многозарядных ионах с ненулевым спином ядра. Исследования в этой области очень востребованы в настоящее время. Результаты теоретических расчётов используются для интерпретации экспериментов и определения фундаментальных констант, а также построения новых моделей квантовой электродинамики. В связи с недавно открывшейся проблемой погрешности затабулированных значений ядерных магнитных моментов отдельный интерес привлекают ионы с ненулевым спином ядра. Небольшое число электронов даёт преимущество в точности вычисления константы ядерного магнитного экранирования. Однако для таких систем требуется полностью релятивистский подход на основе уравнения Дирака. Ранее в литературе рассматривались одноэлектронные ионы атомов, для которых вычисления выполняются аналитически в приближении точечного ядра. Для основного состояния таких ионов были вычислены квантовые электродинамические поправки. Актуальность работы подтверждает тот факт, что релятивистские расчеты межэлектронного взаимодействия были выполнены для ионов с тремя электронами, при этом расчеты, выполненные в диссертационной работе, являются самыми точными на текущий момент времени. Развитый численный подход может быть применен и в других задачах. В частности, он может быть полезен при расчетах вкладов более высоких порядков, а также квантовых электродинамических поправок.

Диссертация состоит из введения, шести глав и заключения, 10 рисунков и 16 таблиц, список литературы, включающего 136 наименований.

Во введении обосновывается актуальность работы, освещается современное положение дел, формулируются цели и задачи.

33-06-491 от 17.04.2023

В первой главе рассмотрен эффект Зеемана в рамках теории возмущений до третьего порядка по магнитному полю. В качестве нулевого приближения использовалось уравнение Дирака для электрона в поле ядра. Приведены формулы для поправок второго и третьего порядка к значению g -фактора. Особое внимание уделено их обсуждению для гелиеподобных и бороподобных систем.

Во второй главе рассматривается теория сверхтонкого расщепления и обсуждается современное состояние исследований. Приводятся формулы для сдвига уровней энергии и для релятивистского множителя.

В третьей главе обсуждается зеемановское расщепление в ионах с ненулевым спином ядра. Рассматривается способ определения ядерного g -фактора из экспериментальных данных с использованием теоретических значений электронного g -фактора и константы ядерного магнитного экранирования. Также описывается метод конечного поля для расчета константы ядерного магнитного экранирования.

В четвертой главе рассматривается вклад межэлектронного взаимодействия в поправки второго и третьего порядка к значению g -фактора для гелие-, литие- и бороподобных ионов. С помощью фейнмановских диаграмм получены формулы для указанных поправок, которые учитывают однофотонный обмен в первом порядке и, частично, межэлектронное взаимодействие в высших порядках, для чего используется 4 экранирующих потенциала: Хартри, Дирака-Хартри, Кон-Шема и Дирака-Слейтера.

В пятой главе представлены численные подходы к решению задач, сформулированные в предыдущих главах. Для решения уравнения Дирака использовалась программа А-ДКБ, реализующая метод дуального кинетического баланса для систем с аксиальной симметрией, в которую автором диссертации был внесён ряд изменений, например, добавлен отбор по четности состояния, который решил проблему пересечения уровней. Матричные элементы одноэлектронных операторов, трёхкратные интегралы, берутся аналитически по одной переменной и по квадратурной формуле Гаусса по двум переменным. Необходимые для расчётов производные по параметрам магнитного поля вычисляются по пятиточечным формулам, при этом оптимальный шаг подбирается исходя из тестовых вычислений на небольшом базисе.

В шестой главе представлены результаты диссертационной работы: g -фактор, релятивистский фактор, квадратичный и кубический эффект Зеемана, константа ядерного магнитного экранирования для литие-, боро- и гелиеподобных ионов при различных экранирующих потенциалах Хартри, Кон-Шема, Дирака-Слейтера и Дирак-Хартри. Проводится обсуждение и анализ результатов. Показано сравнение результатов, полученных по теории возмущений и методом конечного поля, а также с ранее опубликованными. С помощью разработанной методики теоретически исследованы водородо-, литие- и бороподобные ионы тория-229.

В заключении сформулированы основные результаты проделанной работы.

В диссертации Волчковой А. М. проводится теоретическое исследование эффекта Зеемана в многозарядных ионах. Был развит новый численный подход, позволяющий упростить формулы для расчетов вкладов высших порядков. Представлены расчеты нелинейных вкладов в эффект Зеемана и константы ядерного магнитного экранирования для многозарядных ионов с ненулевым спином ядра. Эти результаты имеют большое значение для разработки квантовых электродинамических моделей и интерпретации экспериментов. Результаты диссертационной работы опубликованы в шести статьях в журналах с импакт-факторами, рекомендованных ВАК РФ и индексируемых в Scopus и Web of Science и неоднократно докладывались на международных и российских научных конференциях, и научных семинарах кафедры квантовой механики СПбГУ.

По диссертационной работе Волчковой А. М. можно сделать следующие замечания:

1. Диссертация состоит из шести глав, причем первые 3 главы посвящены описанию эффекта Зеемана, теории сверхтонкого расщепления и расщеплению Зеемана в ионах с ненулевым спином ядра, соответственно. При этом первая глава состоит всего из 4 страниц, вторая глава – меньше, чем из 5 страниц, а третья глава – почти из 4 страниц. Поэтому диссертантке лучше было бы объединить эти три главы.
2. Согласно описанию, в методе конечного поля находятся значения энергии, а потом из них извлекаются поправки с помощью численного дифференцирования по параметру. В разделе 5.2.3 обсуждается выбор оптимальных шагов для численного дифференцирования до третьего порядка, которые зависят от точности самой функции (энергии), и, следовательно, от точности вычисления матричных элементов. Соответствующие интегралы вычисляются методом Гаусса, при этом ни порядок используемых квадратур, ни точность вычисления не указаны. Кроме того, формулы (5.42), (5.43) аппроксимации пятиточечных конечных разностных схем для производных первого, второго порядков имеют четвертый порядок сходимости, а не второй как указано в диссертационной работе.
3. На стр. 8 упоминается программа А-ДКБ, реализующая метод дуального-кинетического баланса для аксиально-симметричного поля, который был разработан проф. В.М. Шабаевым, которая была модифицирована при участии диссертантки. При этом следовало добавить раздел, который содержит её краткое описание.
4. Работа содержит опечатки, например: на стр. 44 для полиномов Лежандра, как следует из контекста первого рода, введено обозначение $Q_l(x)$, которое является стандартным для функций Лежандра второго рода.

Данные замечания, однако, не снижают научной и практической ценности диссертационной работы.

Диссертация Волчковой Анны Михайловны на тему: «Эффект Зеемана и сверхтонкое расщепление в бороподобных многозарядных ионах с ненулевым спином ядра» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 19.11.2021 № 11181/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Волчкова Анна Михайловна заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика. Нарушения пунктов 9 и 11 указанного Порядка в диссертации не обнаружены.

Член диссертационного совета

доктор физико-математических наук,
академик,
ведущий научный сотрудник,
Института математики и цифровой технологии,
Монгольской академии наук



Чулуунбаатар Очбадрах

Дата 07.04.2023