

ОТЗЫВ

председателя диссертационного совета Тупицына Илья Игоревича 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.

Совместные экспериментальные и теоретические исследования многозарядных ионов во внешних полях являются универсальным инструментом для проверки квантовой электродинамики и высокоточного определения фундаментальных констант и параметров ядер. В связи с тем, что современные экспериментальные методы исследования позволяют измерять магнитные эффекты с очень высокой степенью точности, становится актуальным проведение высокоточных расчетов нелинейных вкладов в эффект Зеемана и параметров сверхтонких расщеплений. Результаты этих расчетов позволяют уточнять значения магнитных моментов и других свойств ядер. Помимо определения магнитных моментов, оказывается возможным определение вероятностей ядерных переходов, например, для изотопа тория-229. В связи с этим я считаю что тема данной работы является актуальной и практически важной.

Диссертация состоит из введения, 6-ти глав, заключения, списка сокращений и условных обозначений и списка литературы. Работа включает 96-ти страниц, 10-ти рисунков и 16-ти таблиц. Список литературы содержит 136 наименований.

Первые три главы диссертации по существу являются литературным обзором, посвященным современному состоянию теории эффекта Зеемана и сверхтонкого взаимодействия.

В 4-ой главе описаны теоретические методы расчетов g -фактора и констант ядерного магнитного экранирования в многоэлектронных системах, использующие релятивистскую многочастичную теорию возмущений.

Пятая глава диссертации посвящена подробному изложению так называемого метода А-ДКБ, разработанного ранее на кафедре квантовой механики СПбГУ для построения одноэлектронного базиса в расчетах аксиально-симметричных систем (см. [E.V. Rozenbaum, et al. PRA, 89, 012514 (2014)]).

Основные результаты, полученные в данной работе, представлены в заключительной в шестой главе диссертации. Здесь приведены, рассчитанные автором, значения поправок второго и третьего порядков к величине g -фактора и констант ядерного магнитного экранирования большого числа многозарядных ионов. Рассмотрен эффект ядерного сверхтонкого смешивание в тории-229.

В качестве основных важнейших научных результатов, полученных в данной работе, я бы отметил следующие. Получены наиболее точные в настоящее время нелинейные вклады второго и третьего порядков в эффект Зеемана в водородо-, гелие-, литие- и бороподобных ионах в диапазоне $Z=8-82$, что позволило определить g -фактор этих ионов с очень высокой степенью точности. Вычислена поправка к g -фактору на

сверхтонкое взаимодействие в водородо-, гелие-, и бороподобных ионах в диапазоне $Z=8-90$. Было показано, что из высокоточного измерения g -фактора основного состояния водородоподобного тория-229 можно получить значение амплитуды ядерного перехода с точностью порядка процента. Полученные в данной работе результаты представляют большой интерес в астрофизике, они важны для проекта так называемых "ядерных часов", а также могут быть использованы для определения ядерных магнитных моментов.

Достоверность полученных результатов не вызывает сомнений, поскольку в работе были использованы самые современные теоретические методы, такие как метод релятивистской многочастичной теории возмущений, метод дуального кинетического баланса, метод конечного поля и т.д. Сравнение результатов расчетов, полученных методами теории возмущений и конечного поля свидетельствует о высокой точности и надежности полученных данных.

Существенных замечаний, которые бы могли поставить под сомнение основные выводы данной работы, у меня не имеется. Однако, после чтения текста диссертации у меня возник один вопрос, одно пожелание и ряд мелких замечаний.

Вопрос:

В данной работе в качестве одноэлектронного базиса используется базис аксиальных функций А-ДКБ, которые не обладают ни сферической симметрией, ни определенной четностью. В результате при вычислении матричных элементов приходится вычислять двумерные интегралы по радиальной переменной r и полярному углу θ , а четность полученных волновых функций определять как среднее значение оператора четности.

Если же использовать базис функций центрального поля (сферических спиноров), то с использованием коэффициентов Клебша-Гордана зависимость от полярного угла вычисляется аналитически. В результате в расчетах матричных элементов одночастичных и двухчастичных операторов достаточно вычислять одномерные интегралы по радиальной переменной. Кроме того, сферические спиноры имеют определенную четность, что также сокращает и упрощает процедуру вычислений.

В связи с этим у меня возникает вопрос *какие преимущества в одноцентральной задаче имеет базис А-ДКБ по сравнению с базисом сферических спиноров?*

Пожелание

Я считаю, что было бы интересным выделить вклад отрицательного спектра Дирака в величину g -фактора.

Мелкие замечания:

1) Мне кажется, что автор диссертации использовала неудачные термины, такие как потенциал Дирака-Хартри, потенциал Дирака Слейтера (см. стр.36). Можно говорить об уравнении Дирака-Хартри и

уравнении Дирака-Слейтера или точнее об уравнении Дирака-Фока-Слейтера, но не о потенциалах. В частности, поэтому трудно понять, чем потенциал Хартри отличается от потенциала Дирака-Хартри в таблицах 6.5, 6.10 и 6.11. Можно, однако, предположить, что потенциал Хартри это кулоновский потенциал остова (Core-Hartree), а потенциал Дирака-Хартри – это полный кулоновский потенциал атома или иона.

2) Величина ρ в формулах (4.24) и (4.25) имеет смысл *радиальной плотности*, а не *электронной плотности*, которая отличается на множитель $4\pi r^2$.

3) Зачем матричный элемент гамильтониана в формуле (5.8) заменен на полусумму двух матричных элементов? Во первых, это ненужно, поскольку гамильтониан – эрмитовый оператор, а во-вторых, это неверно в случае комплексных матриц.

4) На стр. 41 написано: "Сумма всех B-сплайнов в данной точке r , равна единице". Это равенство имеет место только в узле при $r=t_i$.

5) В формуле (5.14) неправильный знак у релятивистского квантового числа k .

Отмеченные мелкие замечания и возникшие вопросы не влияют на общую положительную оценку диссертации. Диссертационная работа выполнена на высоком научном уровне и содержит целый ряд новых интересных результатов, достоверность и научная новизна которых не вызывает сомнений. Полученные Анной Михайловной Волчковой научные результаты достаточно полно отражены в публикациях в высокорейтинговых международных журналах и неоднократно докладывались на научных конференциях и семинарах.

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.

Председатель диссертационного совета
Доктор физ.мат.наук, ст.научн.сотр.,
профессор кафедры квантовой механики
физического ф-та СПбГУ

/Тупицын Илья Игоревич/

Дата 07.04.2023