

УТВЕРЖДАЮ

И.о. заместителя декана  
Физического факультета СПбГУ  
(должность)



А. В. ТИТОВ  
(инициалы, фамилия)

« 17 » июня 2024

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет»

По итогам рассмотрения и обсуждения  
Диссертации Просняк Сергея Дмитриевича  
(ф.и.о. соискателя ученой степени)

представленной на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук  
Ученная степень

по теме «Квантово-механическое изучение атомно-молекулярных систем для анализа свойств ядер»  
(тема диссертации)

по научной специальности 1.3.3. Теоретическая физика  
цифр и наименование научной специальности (научных специальностей)

и выполненной в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Санкт-Петербургский государственный университет», кафедра квантовой механики, год представления 2024  
наименование организации и год представления

а также представленных соискателем научных публикаций, в которых излагаются основные научные результаты диссертации, приняты следующие решения, замечания и рекомендации:

---

**Актуальность исследования** по теме диссертации обусловлена тем, что успехи в развитии методов современной спектроскопии в последние десятилетия позволили значительно повысить точность экспериментов на атомно-молекулярных системах. В результате повысились требования и к теоретической интерпретации таких экспериментов, появилась необходимость в проведении квантово-механических расчётов на новом уровне точности.

Одними из экспериментов, где такие расчёты необходимы для интерпретации результатов измерений, являются эксперименты, направленные на определение ядерных магнитных дипольных моментов. Магнитные моменты ядер интересны для различных областей физики с нескольких точек зрения. Прежде всего, с помощью сравнения экспериментальных значений с результатами расчёта ядерной структуры

можно проводить тестирование моделей ядра. Кроме того, значение магнитного момента необходимо для вычисления сверхтонкого расщепления в спектрах ионов, атомов и молекул. Сравнение теоретической и экспериментальной констант сверхтонкого расщепления является надёжным способом проверки точности расчёта электронной волновой функции вблизи ядра для атомов и молекул. Оно необходимо для оценки погрешности расчёта других величин, необходимых современной физике, но недоступных для прямого измерения. К таким величинам относятся коэффициент усиления электрического дипольного момента (ЭДМ) электрона, константа скалярно-псевдоскалярного взаимодействия, параметры индуцированного аксионоподобными частицами (АПЧ) T, P-нечётного электрон-ядерного взаимодействия и другие характеристики, описывающие возможные источники нарушения T, P-чётности в атомно-молекулярных системах. Не менее важно знать величину магнитного момента ядра и для тестирования квантовой электродинамики при помощи экспериментов на многозарядных ионах. При определении магнитных моментов стабильных ядер с помощью молекулярного ЯМР эксперимента необходимо учитывать константу экранирования внешнего магнитного поля на ядре электронами молекулы. Для этого необходимо провести прецизионный квантово-химический расчёт. Кроме того, проведение квантово-химических расчётов необходимо для прецизионной интерпретации спектроскопических экспериментов по определению магнитных моментов короткоживущих ядер.

Не менее актуальной задачей является интерпретация экспериментов по измерению изотопических сдвигов. С их помощью можно определять среднеквадратичные зарядовые радиусы ядер. Эта величина широко используется при проведении различных расчётов, в том числе квантово-химических. Сравнение экспериментального значения и результата теоретических расчётов является хорошим тестом для методов моделирования структуры атомных ядер. Кроме того, зная с высокой точностью радиусы для изотопов некоторых элементов оказывается возможным ставить ограничения на свойства ядерной материи. Для этого, однако, также необходимо проведение прецизионного квантово-химического моделирования.

Ещё одним интересным для физики свойством ядра является его способность к взаимодействию с аксионами и аксионоподобными частицами. Эти гипотетические частицы могут быть решением для многих неразгаданных задач. Так, они возникают в решении Печей-Квин сильной CP проблемы и различных компактификациях теории струн. Кроме того, эти частицы являются популярными кандидатами на роль темной материи, а также могут быть источником нарушения T, P-чётности в атомно-молекулярных системах. В связи с этим, их поиску посвящено множество теоретических и экспериментальных работ. Одними из экспериментов, в которых можно поставить ограничение на константу взаимодействия ядра с АПЧ являются эксперименты по поиску ЭДМ электрона. Если точнее, то из экспериментальных данных можно поставить ограничение на произведение констант взаимодействия АПЧ с ядром и АПЧ с электроном. Для этого, однако, необходимо с помощью методов релятивистской квантовой химии вычислить молекулярные параметры этого взаимодействия, определяемые электронной структурой используемой в эксперименте молекулы.

**Основной целью** работы являлось развитие методов теоретического исследования атомно-молекулярных систем для анализа свойств ядер. В работе решались следующие задачи:

1. Развитие методов вычисления поправки на конечное распределение намагниченности ядра к сверхтонкому расщеплению атомов, необходимой для интерпретации экспериментов по определению магнитного дипольного момента короткоживущих ядер из спектроскопических экспериментов.
2. Развитие методов расчёта констант изотопического сдвига для нейтральных

атомов, необходимых для определения среднеквадратичных зарядовых радиусов короткоживущих изотопов.

3. Моделирование  $T$ ,  $P$ -нечётного индуцированного аксиноподобными частицами взаимодействия в молекулах. Постановка ограничений на произведение констант взаимодействия аксиноподобных частиц с атомными ядрами и электронами.

**Научная новизна** работы состоит в том, что автором диссертации:

1. Были предложены методы расчёта поправки Бора-Вайскопфа с использованием различных моделей намагниченности ядра с одновременным учётом межэлектронных корреляционных эффектов на уровне метода релятивистских связанных кластеров для нейтральных атомов. Это позволило, в частности, продемонстрировать верность гипотезы о достаточной независимости отношения сверхтонких магнитных аномалий от выбора ядерной модели на примере атома таллия. Данный факт был использован при определении магнитных моментов короткоживущих изотопов таллия. Впервые был учтён эффект конечного распределения намагниченности по ядру при вычислении константы экранирования ядерного магнитного момента в молекуле для задач интерпретации экспериментов по ядерному магнитному резонансу.

2. Методы, использовавшиеся при расчёте изотопических сдвигов в многозарядных ионах, были адаптированы для применения в нейтральных атомах с использованием высокоточных методов связанных кластеров вплоть до учёта четырёхкратных амплитуд. Это позволило провести релятивистские расчёты с одновременным учётом межэлектронной корреляции и детальным анализом теоретической погрешности.

3. Впервые для молекулярного катиона  $HfF^+$  из первых принципов вычислены молекулярные параметры индуцированного аксиноподобными частицами  $T$ ,  $P$ -нечётного взаимодействия методом релятивистских связанных кластеров. При этом расчёты были проведены для большого диапазона масс аксиноподобных частиц. С их помощью определены более точные ограничения на произведение констант взаимодействия аксиноподобных частиц с ядрами и электронами.

---

**Научная и практическая значимость** данной работы заключается в следующем. В диссертационной работе разработаны методы расчёта константы сверхтонкого расщепления с учётом конечного распределения намагниченности ядра и межэлектронной корреляции методом связанных кластеров для нейтральных атомов. Они могут быть использованы для интерпретации будущих спектроскопических экспериментов направленных на определение магнитных моментов короткоживущих ядер. Теоретический подход, использованный для расчёта поправки на конечное распределение намагниченности к константе экранирования магнитного момента ядра в молекулярном ЯМР эксперименте, может быть использован для более точного определения магнитных моментов стабильных ядер. Кроме того, разработанные для расчёта параметров изотопических сдвигов подходы могут быть применены для определения зарядовых радиусов короткоживущих изотопов из спектроскопических экспериментальных данных. Программы, написанные для моделирования электрон-ядерного индуцируемого аксиноподобными частицами  $T$ ,  $P$ -нечётного взаимодействия, могут быть использованы для интерпретации новых экспериментов по поиску ЭДМ электрона в терминах ограничений на константы этого взаимодействия.

---

---

**Обоснованность и достоверность** полученных результатов подтверждается сравнением с другими теоретическими работами и экспериментальными данными, а также тщательным тестированием и проверкой разработанных для проведения вычислений программ. Результаты работы опубликованы в ведущих рецензируемых журналах и обсуждались на нескольких всероссийских и международных конференциях.

---

**Личное участие автора в получении результатов** заключается в самостоятельном изучении необходимой литературы по теме диссертации, проведении численных расчётов и анализе полученных результатов. Все основные представленные в диссертации и вынесенные на защиту результаты получены соискателем лично. В случае использования данных из совместных работ с другими исследователями для исключения двусмысленности в диссертации явно указаны авторы соответствующих результатов.

---

**Полнота изложения материалов диссертации в публикациях и апробация работы.** По материалам диссертации опубликованы 8 статей в ведущих международных рецензируемых физических журналах, входящих в перечень ВАК и/или базы данных РИНЦ, Web of Science и Scopus. Все положения, выносимые на защиту, нашли отражение в публикациях. Результаты работы были доложены на всероссийских и международных конференциях.

---

Диссертационное исследование Просняка Сергея Дмитриевича «Квантово-механическое изучение атомно-молекулярных систем для анализа свойств ядер» соответствует паспорту по научной специальности 1.3.3. «Теоретическая физика» и рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук.

---

Нарушения со стороны Просняка Сергея Дмитриевича

ФИО соискателя

п. 11 Приказа СПбГУ от «19» ноября 2021 г. №11181/1

не выявлены

не выявлены, выявлены

и Приказа СПбГУ от 03.07.2023 № 9287/1

не выявлены

не выявлены, выявлены

Все основные выносимые на защиту научные материалы диссертации опубликованы в предложенных соискателем статьях.

---

**Коллектив сотрудников кафедры квантовой механики Физического факультета СПбГУ**

*наименование подразделения*

рекомендовал

*рекомендовал / не рекомендовал / рекомендовал при условии устранения замечаний*

**диссертацию** Просняка Сергея Дмитриевича

*физ. соискателя*

**по теме** «Квантово-механическое изучение атомно-молекулярных систем для анализа свойств ядер»

*тема диссертации*

**к защите на соискание ученой степени**

кандидата физико-математических наук

*ученая степень*

**по научной специальности** 1.3.3. Теоретическая физика

*шифр и наименование научной специальности (научных специальностей)*

При проведении голосования коллектива сотрудников кафедры квантовой механики (протокол заседания № 44/12/3-02-2 от 01 марта 2024 г.) в количестве 17 человек, участвовавших в заседании из 20 человек штатного состава:

Проголосовали «за»: 17,

«против»: 0,

«воздержались»: 0.

Профессор, заведующий кафедрой  
квантовой механики

*(должность)*

Физический факультет СПбГУ

*(наименование структурного подразделения)*

доктор физ.-мат. наук

*(ученая степень)*

профессор

*(ученое звание)*

В. М. Шабаев

17.06.2024

*(подпись)*

*Расшифровка подписи, дата*



17.06.2024

