

ОТЗЫВ

председателя диссертационного совета Петрова Александра Николаевича
на диссертацию Просняк Сергея Дмитриевича на тему «Квантово-механическое изучение
атомно-молекулярных систем для анализа свойств ядер», представленную
на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук
по специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

Одними из наиболее интересных для ядерной физики свойств атомных ядер являются их магнитные дипольные моменты и зарядовые радиусы. Получить информацию об этих свойствах можно из прецизионных спектроскопических экспериментов с атомно-молекулярными системами. Однако, для интерпретации таких экспериментов требуется проведение высокоточных квантово-механических расчётов электронной структуры этих атомов и молекул. Развитию методов выполнения таких расчётов и их практическому проведению посвящена рассматриваемая диссертационная работа. Разработанные при этом подходы могут быть применены для множества других систем помимо рассматриваемых в данном исследовании.

Диссертация состоит из введения, четырёх глав и заключения. Список литературы содержит 214 наименований. Во введении описана актуальность работы, сформулированы основные цели и задачи диссертации. В первой главе представлен обзор используемых в диссертации теоретических методов. Дано описание метода Дирака – Хартри – Фока, метода связанных кластеров, представлена информация о методе конечного поля. В главе 2 описываются расчёты сверхтонкого расщепления с учётом поправки на конечное распределение ядерной намагниченности. Третья глава посвящена расчётам параметров изотопических сдвигов в нейтральных атомах. В главе 4 рассматриваются расчёты молекулярных параметров индуцированных обменом аксионоподобными частицами нарушающих симметрии инверсии пространства и обращения времени.

Автором диссертационного исследования был проведён высокоточный расчет поправки Бора-Вайскопфа для основного и первого возбужденного состояний нейтрального атома Tl. Также, с учетом этой поправки, было вычислено отношение сверхтонких магнитных аномалий, специальных комбинаций ядерных g-факторов и сверхтонких констант для двух исследуемых электронных состояний. Это позволило уточнить магнитные моменты ряда короткоживущих изотопов Tl. Далее, С. Д. Просняк впервые изучил влияние эффекта конечного распределения намагниченности ядра на константу экранирования магнитного момента в эксперименте по ядерному магнитному резонансу с молекулярным анионом ReO_4^- . Еще одной задачей, решенной в ходе работы, стал расчет атомных параметров изотопического сдвига для атома Au. Для этого была разработана вычислительная схема, которая позволила с высокой точностью рассчитать эти параметры с учетом множества различных эффектов, а также получить хорошо обоснованное значение теоретической погрешности. Оценка погрешностей вычисленных атомных параметров, не менее важна, чем сам непосредственный расчёт значения. Тем не менее, в литературе по данной теме практически отсутствуют исследования, посвященные оценке погрешностей. Вычисленные для атома Au параметры были использованы для определения среднеквадратичных зарядовых радиусов ряда изотопов Au. Кроме того, была решена задача по установлению ограничений на свойства аксионоподобных частиц на основе эксперимента по поиску электрического дипольного момента электрона с молекулярным катионом HfF^+ . Для этого были выполнены вычисления молекулярных параметров, характеризующих индуцированные аксионоподобными частицами взаимодействия. На основе этих данных были установлены ограничения на произведения констант взаимодействия аксионоподобных частиц с ядрами и электронами.

36-06-32 от 13.01.2025

По диссертационной работе Просняк С. Д. Можно сделать следующие замечания.

- При проведении расчётов в качестве базисных наборов использовались неконтрактированные базисные наборы гауссовых функций Dyal [Theor. Chem. Acc. 1998. Т. 99, № 6. С. 366–371; Theor. Chem. Acc. 2004. Т. 112. С. 403–409.; Theor. Chem. Acc. 2006. Т. 115, № 5. С. 441–447; Theor. Chem. Acc. 2012. Т. 131, № 5. С. 1217; Theor. Chem. Acc. 2010. Т. 125. С. 97–100; Theor. Chem. Acc. 2016. Apr. Т. 135, № 5. С. 128]. Использование оптимизированных наборов, состоящих из контрактированных гауссовых функций позволило бы уменьшить размер используемых базисных наборов. Это бы могло помочь более точно вычислить эффекты электронной корреляции высоких порядков. Почему не были использованы такие базисы?

- Вклад взаимодействия Гаунта при проведении ряда расчётов был учтён на уровне поправки, вычисленной с помощью метода Дирака – Хартри – Фока. Однако, большей точности вычислений удалось бы добиться, если бы основной корреляционный расчёт был выполнен с гамильтонианом Дирака – Кулона – Гаунта.

Указанные замечания не имеют принципиального характера и не снижают высокую оценку проведённой работы.

Диссертация Просняк Сергея Дмитриевича на тему: «Квантово-механическое изучение атомно-молекулярных систем для анализа свойств ядер» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 19.11.2021 №11181/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Просняк Сергей Дмитриевич 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 обнаружено.

Председатель диссертационного совета

д.ф.-м.н., доцент,
профессор кафедры квантовой
механики СПбГУ

08.01.2025



Петров А.Н.