

## ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Шабаева В. М. на диссертацию Просняк Сергея Дмитриевича на тему: «Квантово-механическое изучение атомно-молекулярных систем для анализа свойств ядер», представленную на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

Диссертация Просняк С. Д. посвящена квантово-механическому исследованию атомно-молекулярных систем, необходимому для изучения свойств ядер при интерпретации экспериментов с атомами или молекулами. Актуальность исследования определяется тем, что точность определения величины различных свойств ядер, таких как магнитный дипольный момент или среднеквадратичный зарядовый радиус, важны не только для ядерной физики, но и, для других задач атомной физики, где свойства ядра рассматриваются как надёжные входные параметры. Для достижения высокой точности расчёты электронной структуры в данном исследовании были выполнены с помощью самых современных подходов, которые не только позволяют провести прецизионный расчёт, но и предоставить обоснованную оценку итоговой теоретической погрешности. Полученные результаты могут быть использованы и при интерпретации будущих экспериментов по измерению изотопических сдвигов и магнитных дипольных моментов ядер Tl и Au и поиску новой физики.

Диссертация состоит из введения, 4 глав и заключения.

Во введении сформулирована актуальность исследования, дано описание современного состояния данной области исследований, а также приведены основные научные результаты и сформулированы положения, выносимые на защиту.

В первой главе представлены используемые в данной диссертации методы расчёта электронной структуры и свойств рассматриваемых далее атомов и молекул. Сначала приводится описание метода Дирака – Фока, используемого для получения начального приближения к электронной волновой функции рассматриваемой системы. Далее приведены сведения о методе связанных кластеров, используемого для учёта эффектов электронной корреляции. В завершение главы дано описание метода конечного поля, применяемого для расчёта свойств атомов и молекул.

Во второй главе рассматривается задача о вычислении поправки на конечное распределение намагниченности ядра к сверхтонкому расщеплению в атомных спектрах. При решении этой задачи было использовано несколько моделей распределения намагниченности. Это позволило оценить, как разные теоретические величины зависят от выбора ядерной модели. Полученные результаты расчётов были использованы для уточнения магнитных дипольных моментов нескольких короткоживущих изотопов таллия. Кроме того, было рассмотрено влияние конечного размера ядра на константу экранирования магнитного дипольного момента ядра электронами при проведении ЯМР эксперимента с молекулярным анионом  $\text{ReO}_4^-$ . Это влияние оказалось довольно значительным и было учтено при определении магнитных моментов изотопов рения  $^{185}\text{Re}$  и  $^{187}\text{Re}$ .

Третья глава посвящена исследованию изотопических сдвигов в оптических спектрах нейтральных атомов. В ней подробно описана схема вычисления атомных параметров изотопических сдвигов, а также проведено тестирование этой схемы на литиеподобных ионах. Для атома золота приведены все подробности проделанных вычислений, а для атома таллия приведено краткое описание результатов расчётов. Полученные значения атомных параметров



используются для интерпретации экспериментальных данных по изотопическим сдвигам и уточнения зарядовых радиусов.

В четвертой главе рассматривается задача интерпретации экспериментов по поиску электрического дипольного момента электрона в молекулах с точки зрения постановки ограничений на произведения констант, нарушающих T и P-симметрии электрон-ядерного и электрон-электронного взаимодействий, индуцированных обменом аксиноподобными частицами. Для этого были проведены расчёты молекулярных параметров рассматриваемых взаимодействий для молекулярного катиона  $\text{HfF}^+$ . При этом эффект конечного размера ядра был учтён для электрон-ядерного взаимодействия не только при вычислении электронной волновой функции с конечным распределением ядерного заряда, но и в самом потенциале взаимодействия. Полученные результаты позволили установить новые ограничения на произведения констант рассматриваемых взаимодействий.

В заключении приведены главные результаты и выводы, полученные в ходе диссертационного исследования.

Несмотря на высокое качество диссертационной работы, по её содержанию могут быть высказаны следующие замечания:

- 1) Уравнения (2.7)-(2.8) содержат спин-орбитальную поправку, которая впервые была введена в эффект Бора-Вайскопфа в работе [118]. Поэтому приведенные перед этими уравнениями ссылки [60,126-127] должны быть дополнены ссылкой [118].
- 2) При определении погрешности расчёта параметра полевого изотопического сдвига в атоме Au был оценен порядок вклада эффектов квантовой электродинамики. В то же время, для массового сдвига этот вопрос остался не затронут. Думаю, автору следовало бы дать хотя бы грубую оценку КЭД вклада в массовый сдвиг, который в настоящее время может быть учтен посредством модельного оператора [I.S. Anisimova et al., Phys. Rev. A 106, 062823 (2022)] .

Указанные замечания не снижают общей ценности работы и очень хорошего впечатления от неё. С учётом всего вышесказанного полагаю:

Диссертация Просняка 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. Пункты 9 и 11 указанного Порядка диссертантом не нарушены.

Член диссертационного совета,  
д. ф.-м. н., профессор, профессор СПбГУ

Шабает В. М.

09.01.2025