

## ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Титова А.В. на диссертацию *Просняка 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.

### **Актуальность темы исследования.**

В работе С.Д. Просняка разрабатываются методы теоретического квантово–механического расчёта свойств атомов и молекул, которые требуются для интерпретации атомно–молекулярных экспериментов, направленных на изучение свойств атомных ядер. Разработка прецизионных теоретических методов исследования эффектов, обусловленных структурой и свойствами ядер в оптических спектрах атомно–молекулярных систем является одной из наиболее интересных и актуальных задач на стыке теоретической физики и релятивистской квантовой химии. Одной из целей диссертационной работы стала разработка методов вычисления постоянной сверхтонкого взаимодействия с учётом конечного распределения ядерной намагниченности и межэлектронных корреляций с использованием релятивистской теории связанных кластеров для нейтральных атомов. Эти методы могут быть применены для анализа планируемых спектроскопических экспериментов, направленных в первую очередь на определение магнитных моментов короткоживущих ядер. Теоретический подход, использованный для учёта вклада конечного распределения ядерной намагниченности в параметр экранирования магнитного момента ядра в молекулярном ЯМР–эксперименте, может быть применен также при определении магнитных моментов стабильных ядер с высокой степенью точности. Кроме того, методы, разработанные для расчёта параметров изотопических сдвигов, можно будет использовать для определения зарядовых радиусов короткоживущих изотопов на основе спектроскопических данных. Программы, разработанные для моделирования нарушающего симметрию по отношению к обращению времени (Т) и инверсии пространства (чётность, Р) электрон–ядерного взаимодействия, индуцируемого аксиноподобными частицами, также весьма перспективны для анализа новых экспериментов по поиску перманентного электрического дипольного момента электрона (еЭДМ) с целью установления ограничений на величину этого гипотетического свойства электрона.

### **Оценка проведённого исследования и полученных результатов.**

Во введении рассказывается об актуальности работы, степени разработанности темы исследования, формулируются основные цели и задачи работы. Отдельно описывается научная новизна работы, её теоретическая и практическая значимость. В заключительной его части приводятся основные научные результаты и положения, выносимые на защиту.

В первой главе обсуждаются основные методы, используемые далее для выполнения квантово-механических расчётов. Сначала вкратце представлен метод Дирака–Хартри–Фока, используемый для получения стартового приближения к электронной волновой функции в виде детерминанта Слэтера. Далее описывается релятивистский вариант метода связанных кластеров, позволяет с наивысшей на сегодня точностью учесть межэлектронные корреляции и релятивистские эффекты, очень важные для тяжелых атомов. Затем вкратце приводится информация о методе конечного поля, используемом для расчёта свойств рассматриваемых

атомов и молекул. Выбранные С.Д. Просняком теоретические методы в оптимальной и достаточно полной мере соответствуют задачам, рассматриваемым в диссертации.

Во второй главе исследуется эффект Бора–Вайскопфа, а именно вклад конечного распределения ядерной намагниченности в постоянную сверхтонкого взаимодействия. Вычисление этого вклада проводится с использованием нескольких моделей ядра, что позволяет провести оценку, как зависит конечный результат от выбора модели. Сначала проводятся тесты для нескольких водородоподобных ионов, благодаря которым удаётся установить, что матричные элементы оператора искомой поправки вычисляются корректно. Далее проводятся расчёты для электронных состояний  $6p^2P_{1/2}$  и  $6p^2P_{3/2}$  нейтрального атома таллия. Полученные постоянные хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными. Затем для пары состояний  $7s^2S_{1/2}$  и  $6p^2P_{1/2}$  показано, что сверхтонкая магнитная аномалия, специальная комбинация сверхтонких постоянных и g-факторов, с высокой степенью точности не зависит от выбора модели ядра. В результате удаётся уточнить значения магнитных моментов короткоживущих изотопов атома таллия. В последней части главы рассказывается об учёте вклада конечного распределения намагниченности ядра в параметр экранирования в ЯМР-эксперименте. Показано, что для молекулярного иона  $(\text{ReO}_4)^-$  вклад этого эффекта оказывается значительным. В частности, он оказывается больше влияния растворителя, который довольно часто учитывается в других работах по данной тематике. Используемые в данной главе методы и применяемые модели ядра полностью соответствуют рассматриваемым задачам.

В третьей главе рассматривается задача вычисления параметров изотопических сдвигов. Сначала описывается то, как были адаптированы для нейтральных атомов численные методы, ранее использовавшиеся для проведения расчётов с многозарядными ионами. Далее проводится анализ корректности работы программ и методов на литиеподобных ионах, на основе чего делается вывод о корректной работе программной реализации используемых методов. Затем выполняется расчёт параметров изотопического сдвига для перехода  $6s^2S_{1/2} - 6p^2P_{1/2}$  в нейтральном атоме золота. Полученные результаты расчётов используются для уточнения среднеквадратичных зарядовых радиусов, полученным из экспериментальных данных по изотопическим сдвигам для ряда изотопов золота. Кроме того, вкратце приведены сведения о том, какие результаты даёт такой подход при рассмотрении аналогичной задачи для переходов  $6p^2P_{3/2} - 7s^2S_{1/2}$ ,  $6p^2P_{1/2} - 6d^2D_{3/2}$  и  $6p^2P_{1/2} - 7s^2S_{1/2}$  в нейтральном атоме таллия. В этом случае полученные параметры также используются для уточнения зарядовых радиусов. Используемые в данной главе подходы позволяют не только выполнять вычисления с достаточно высокой точностью, но и дать хорошо обоснованную оценку теоретической погрешности.

Четвёртая глава посвящена рассмотрению T,P-нечётных взаимодействий, индуцированных аксионоподобными частицами. Подробно описывается техника расчёта, позволяющая вычислить параметры рассматриваемых взаимодействий. С её помощью выполняются расчёты молекулярного катиона  $\text{HfF}^+$ . Полученные значения использованы для установления ограничений на постоянные электрон-ядерного и электрон-электронного взаимодействий в комбинации с данными эксперимента по поиску eЭДМ на молекулярных катионах  $\text{HfF}^+$ . Применяемые в этой главе методы также адекватно соответствуют рассматриваемой задаче.

Далее представлено заключение, которое мне представляется весьма убедительным и обоснованным.

## Научная новизна работы.

С. Д. Просняк выполнил серию интересных и глубоких исследований, дающих значительный вклад в теорию вычисления свойств атомов и молекул, зависящих от свойств ядер. Развиваемая автором техника проведения расчётов точно определена, обоснована и отработана. Впервые с высокой точностью с помощью метода связанных кластеров был вычислен вклад конечного распределения ядерной намагниченности в параметр экранирования магнитного момента ядра в эксперименте по ядерному магнитному резонансу в нейтральной молекуле. Также стоит выделить, что для расчёта параметров изотопического сдвига в нейтральных атомах применяется вычислительная схема, учитывающая множество вкладов в итоговую погрешность, в том числе впервые корреляционный вклад от четырёхкратных амплитуд в методе связанных кластеров, что позволяет дать хорошо обоснованную оценку получаемой точности. Кроме того, интересной является и техника расчёта интегралов с операторами типа потенциала Юкавы, применяемая при решении задачи об электрон-ядерном взаимодействии, индуцированном нарушающими  $T$  и  $P$  симметрии аксионоподобными частицами, на примере молекулярного катиона  $\text{HfF}^+$ . С её помощью были впервые выполнены необходимые расчёты для  $\text{HfF}^+$  из первых принципов для широкого диапазона масс аксионоподобных частиц.

## Замечания и вопросы по диссертации.

1. Замечания по терминологии:

- Что значит «квантово-химический расчет атома»? На стр. 6 и 7 неоднократно используется такое словосочетание.

- В диссертации (особенно во введении) часто встречается формулировка «метод связанных кластеров», при этом не конкретизируется, какой из многочисленных методов в рамках теории связанных кластеров используется.

2. Согласно формуле (2.40), для вычисления константы экранирования магнитного момента ядра в ЯМР-эксперименте, а следовательно, и поправки на конечное распределение намагниченности ядра, необходимо вычисление второй производной от энергии. Как эта задача была решена в диссертационной работе практически?

3. В главе 4 весьма желательно было бы представить визуализацию полученных результатов по текущим ограничениям на произведения констант взаимодействия. Данные в Таблицах 4.1 и 4.2 были бы проще для анализа, если бы к ним были добавлены графики.

4. В то время как расчеты электронной структуры выполнялись в работе на очень высоком уровне с оценкой погрешностей используемых моделей, расчеты ядерных вкладов приводятся без оценки погрешностей в рамках относительно простой модели Вудса-Саксона. Предпринимались ли попытки учесть распределение намагниченности ядра за пределами модели Вудса-Саксона с целью оценки погрешности этой модели для рассматриваемых систем? Делались ли такие оценки другими группами?

## Заключение о соответствии диссертации критериям, установленным Приказом о порядке присуждения учёных степеней.

В целом представленная к защите работа выполнена на очень высоком теоретическом уровне, а сделанные выводы заслуживают доверия. Все расчеты в работе также выполнены с использованием самых современных подходов теории волновой функции. Основные результаты

обладают практической значимостью и новизной, а также были представлены в виде публикаций в ведущих международных журналах. Сформулированные автором выводы многократно и всесторонне обоснованы и проверены. Развиваемые теоретические методы и подходы будут весьма полезны для дальнейшего применения при анализе уже выполненных и планируемых на данный момент экспериментов.

Таким образом, диссертация С.Д. Просняка на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. «Теоретическая физика» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 19.11.2021 №11181/1 «О порядке присуждения учёных степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», а её автор, Сергей Дмитриевич Просняк, заслуживает присуждения искомой учёной степени. Пункты 9 и 11 указанного Порядка диссертантом не нарушены.

Член диссертационного совета,  
д. ф.-м. н., профессор СПбГУ,  
руководитель Отделения перспективных разработок  
и заведующий отделом квантовой физики и химии  
НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ;  
тел./факс: +7(81371) 3-10-55,

E-mail: [Titov\\_AV@pnpi.nrcki.ru](mailto:Titov_AV@pnpi.nrcki.ru)

/ А.В. Титов /

09 января 2025 г.

*Поручив А.В. Титова  
заверить*



Ученый секретарь  
**Воробьев С.И.**