


УТВЕРЖДАЮ

Проректор по научной работе Федерального  
государственного автономного  
образовательного учреждения высшего  
образования «Национальный  
исследовательский университет ИТМО»

доктор технических наук, профессор

  
В.О. Никифоров

« 9 » января 2025 г.

### ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ

Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО» на диссертационную работу Просняка Сергея Дмитриевича «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 диссертационной работы и соответствие специальности.**

Диссертационная работа Просняка Сергея Дмитриевича посвящена задаче теоретического исследования атомно-молекулярных систем с помощью методов квантовой механики, необходимого для анализа результатов экспериментов с атомами и молекулами. В первой главе приведено описание методов расчёта электронной волновой функции, а также представлено описание метода конечного поля, используемого для расчёта свойств. Вторая глава посвящена вычислению сверхтонкого расщепления с учётом поправки на конечный размер ядра, а также учёту этой поправки при расчёте константы экранирования магнитного момента ядра в эксперименте по ядерному магнитному резонансу. В третьей главе рассматривается задача о вычислении изотопических сдвигов в оптических спектрах нейтральных атомов Au и Tl, а также тесты на литиеподобных ионах. Вычисленные значения атомных параметров используются для интерпретации экспериментальных данных по изотопическим сдвигам и уточнения зарядовых радиусов. Четвёртая глава посвящена решению задачи об 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 аксионоподобными частицами. В ходе решения этой задачи были выполнены расчёты молекулярных параметров рассматриваемых взаимодействий для молекулярного катиона  $\text{HfF}^+$ . Вычисленные в ходе работы

значения молекулярных параметров в комбинации с имеющимися в литературе экспериментальными данными позволили уточнить ограничения на произведение констант рассматриваемых взаимодействий.

Учитывая значительный прогресс методов современной прецизионной атомной и молекулярной спектроскопии, решение описанных выше задач для анализа и интерпретации результатов экспериментов является актуальной задачей. В связи с тем, что сейчас планируется множество ещё более точных экспериментов с атомами и молекулами в будущем, разработанные в настоящем исследовании методы долго не потеряют актуальность.

Проблематика работы, её цели и задачи, а также применённые автором подходы и методы подтверждают, что данное диссертационное исследование соответствует паспорту специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

**Научная новизна работы.** В работе были предложены методы расчёта поправки на конечное распределение намагниченности ядра к сверхтонкой структуре в оптических спектрах нейтральных атомов с использованием нескольких моделей ядра и одновременным учётом электронной корреляции методом релятивистских связанных кластеров. Это позволило добиться высокой точности полученных результатов. Кроме того, для атома таллия было напрямую показано, что отношение сверхтонких магнитных аномалий с достаточной степенью точности не зависит от выбора модели распределения ядерной намагниченности. Этот факт был использован для уточнения магнитных дипольных моментов нескольких короткоживущих изотопов таллия. Впервые с помощью метода релятивистских связанных кластеров был вычислен вклад конечного распределения ядерной намагниченности в константу экранирования магнитного момента ядра в молекуле для задачи интерпретации эксперимента по ядерному магнитному резонансу.

Методы, использовавшиеся ранее для расчёта изотопических сдвигов в спектрах многозарядных ионов, были адаптированы для проведения расчётов в нейтральных атомах с применением метода релятивистских связанных кластеров вплоть до учёта четырёхкратных амплитуд. Это позволило выполнить релятивистские расчёты с одновременным учётом электронной корреляции. При этом был выполнен детальный анализ теоретической погрешности.

Впервые из первых принципов были рассчитаны молекулярные параметры индуцированного аксионоподобными частицами  $T$ ,  $P$  – нечётного взаимодействия методом релятивистских связанных кластеров для молекулярного катиона  $HfF^+$ . При этом расчёты были выполнены для широкого диапазона масс аксионоподобных частиц. С их помощью были уточнены ограничения на произведение констант взаимодействия аксионоподобных частиц с ядрами и электронами.

**Достоверность полученных в диссертационной работе результатов** была подтверждена сравнением с экспериментальными данными и результатами независимых теоретических исследований. Результаты проведённого автором исследования были многократно представлены на международных и всероссийских конференциях, а также опубликованы в мировых ведущих рецензируемых научных журналах.

**Значимость полученных результатов диссертационного исследования заключается** в разработке методов расчёта свойств атомов и молекул, необходимых для интерпретации прецизионных атомно-молекулярных экспериментов, направленных на исследование свойств атомных ядер. Так, расчёт сверхтонкого расщепления в оптическом спектре атома таллия с учётом поправки на конечное распределение намагниченности ядра и одновременным учётом электронной корреляции методом связанных кластеров позволил уточнить магнитные моменты нескольких короткоживущих изотопов, а разработанный для проведения таких расчётов подход может быть использован для уточнения магнитных моментов короткоживущих изотопов других элементов. Кроме того, в ходе работы был разработан подход, позволяющий учитывать поправку на конечное распределение намагниченности при расчёте константы экранирования в эксперименте по ядерному магнитному резонансу. Этот подход был применён для уточнения магнитного момента рения в эксперименте с молекулярным анионом  $\text{ReO}_4^-$  и может быть использован при интерпретации других экспериментов. Разработанные в ходе исследования методы расчёта параметров изотопического сдвига, применённые для интерпретации эксперимента с атомом золота, также могут быть применены и для других элементов. Ситуация с методами расчёта параметров нарушающего T, P – симметрию индуцированного обменом аксионоподобными частицами электрон-ядерного взаимодействия аналогична. Помимо интерпретации направленного на поиск электрического дипольного момента электрона эксперимента с молекулярным катионом  $\text{HfF}^+$  в терминах ограничений на константы рассматриваемого взаимодействия, разработанный подход может быть применён для интерпретации похожих экспериментов с другими молекулами.

**В качестве вопросов и замечаний можно отметить следующие:**

- Для расчёта параметра полевого сдвига в атоме золота был использован базисный набор LНbas. В то же время, для расчёта параметра аномального массового сдвига в следствии большей вычислительной сложности был использован базис меньшего размера Мbas. По какой причине расчёт этой величины более сложен?

- Основной расчёт параметров полевого сдвига был выполнен с гауссовым распределением заряда ядра, а для оценки погрешности были проведены вспомогательные расчёты с распределением Ферми. Хотя модель ядра не является основным источником погрешности, всё же для тяжёлых атомов более естественно было бы основной расчёт провести с моделью Ферми.

Следует отметить, что эти замечания не носят принципиального характера и не снижают высокую оценку рассматриваемой диссертации Просняк С.Д.

### **Заключение**

Характеризуя диссертационную работу в целом, необходимо отметить, что она является законченным исследованием, в рамках которого было решено несколько важных научных задач. Диссертация свидетельствует о личном вкладе автора в область теоретического исследования атомно-молекулярных систем с помощью методов квантовой механики. Диссертационная работа Просняк Сергея Дмитриевича выполнена на высоком научном уровне, текст хорошо структурирован, основные результаты являются новыми, имеют высокую значимость, изложены логично и ясно.

Заключение ведущей организации Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО» на диссертационную работу Просняк Сергея Дмитриевича «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, является положительным.

Диссертационная работа Просняк Сергея Дмитриевича «Квантово-механическое изучение атомно-молекулярных систем для анализа свойств ядер» является завершённым научным исследованием. Рукопись диссертации соответствует пунктам 4 и 6 паспорта специальности 1.3.3. Теоретическая физика и удовлетворяет требованиям, предъявляемым к диссертациям на соискание степени кандидата физико-математических наук, установленных пунктом 9 «Положения о присуждении учёных степеней», утверждённым постановлением Правительства Российской Федерации от 24.09.2013 года № 842 и требованиям, установленным приказом от 19.11.2021 № 11181/1 «О порядке присуждения учёных степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», а её автор Просняк Сергей Дмитриевич

заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

Отзыв подготовлен доктором физико-математических наук, ведущим научным сотрудником Карловцем Дмитрием Валерьевичем, профиль 1.3.3 Теоретическая физика.

Результаты диссертации и отзыв на диссертацию обсуждены и одобрены на семинаре Физического факультета Университета ИТМО.

Ведущий научный сотрудник  
Университета ИТМО,  
доктор физико-математических наук

  
Карловец Д.В.  
Подпись Карловца  
удостоверяю  
Менеджер ОПС  
Пономарева О.В.  


***Сведения о ведущей организации:***

***Полное наименование организации на русском языке:*** Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования «Национальный исследовательский университет ИТМО»

***Сокращённое наименование организации на русском языке:*** Университет ИТМО

***Почтовый (фактический) адрес организации:*** 197101, Санкт-Петербург, Кронверкский пр., д. 49, лит. А.

***Адрес официального сайта в сети Интернет:*** <https://itmo.ru/>

***E-mail:*** [od@itmo.ru](mailto:od@itmo.ru)

***Контактный телефон:*** +7 (812) 480-00-00