

ОТЗЫВ

председателя диссертационного совета на диссертацию Чубукова Дмитрия Валерьевича на тему: «Нарушение фундаментальных симметрий в атомах и молекулах: P, T-нечетный эффект Фарадея и P-нечетная оптическая активность», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности

01.04.02 — Теоретическая физика

Диссертация Дмитрия Чубукова посвящена исследованию эффектов, нарушающих пространственную четность и инвариантность относительно обращения времени при низких энергиях, в физике атомов и легких молекул. P-нечетные эффекты в электрон-электронном взаимодействии ранее были только обнаружены при высоких энергиях, поэтому крайне важной задачей представляется найти возможность наблюдения этого взаимодействия при низких энергиях. Такие исследования на атомных и молекулярных системах являются *важной и фундаментальной задачей* современной теоретической физики, поскольку позволяют искать «новую физику» за пределами Стандартной модели.

Поиск взаимодействий, неинвариантных относительно обращения времени, в природе представляет собой одну из наиболее фундаментальных неразрешенных проблем в современной физике. Наиболее точные на данный момент экспериментальные ограничения сверху на величину ЭДМ электрона принадлежат в настоящее время коллаборации АСМЕ (США). Верхняя граница, которая была установлена в этих экспериментах путем измерения прецессии спина электрона на молекуле ThO в электрическом поле, на 9 порядков превышает максимальное значение ЭДМ электрона, предсказываемое Стандартной моделью.

Актуальность работы состоит в том, что из-за очень большого разрыва между текущим экспериментальным ограничением на величину электрического дипольного момента (ЭДМ), электрона, и максимальным теоретическим предсказанием в рамках Стандартной модели, необходимо разрабатывать альтернативные методы наблюдения P, T -нечетных эффектов.

Научная и практическая ценность работы состоит в том, что в данной диссертации были предложены подходы и получены результаты, которые в дальнейшем могут быть использованы в экспериментах по наблюдению ЭДМ электрона, P-нечетного электрон-электронного и электрон-ядерного взаимодействий. Эти подходы основаны на использовании современных *ab initio* методов релятивистской квантовой химии и программных кодов, разработанных автором в сотрудничестве с лабораторией квантовой химии ПИЯФ.

Диссертация состоит из четырех глав. В двух первых обсуждаются P-нечетные эффекты в двухатомных легких гомоядерных молекулах, таких как молекулы кислорода, пара- и орто- водорода. В первой главе диссертации Дмитрия Чубукова было показано, что параводород является уникальным кандидатом для непосредственного наблюдения P-нечетного электрон-электронного взаимодействия впервые на низких энергиях. Во второй главе автор работы продемонстрировал возможность наблюдения прямого P-нечетного взаимодействия электрона с анапольным моментом ядра в ортоводороде.

В следующих двух главах изучаются P, T-нечетные эффекты в тяжелых атомах и в молекуле монофторида свинца. Диссертант изучает и развивает альтернативный подход к измерению ЭДМ электрона, основанный на наблюдении P, T-нечетного аналога эффекта Фарадея во внешнем электрическом поле на атомах и молекулах.

В последней главе данный подход развивается дальше и предлагается использование данной техники в комбинации с молекулярным пучком,

09/2-02-337 от 08.06.2020

пересекающим полость. Одним из важных результатов, полученных в диссертационной работе, является вывод о том, что с учетом такой экспериментальной схемы при использовании пучка монофторида свинца есть принципиальная возможность улучшить уже достигнутую верхнюю границу на P-, T-нечетные эффекты на несколько порядков.

Определение величины ЭДМ электрона из экспериментальных данных является непрямым и использует результаты теоретического расчета коэффициентов усиления. Такой расчет является весьма непростой задачей. В диссертации выполнены необходимые для этого высокоточные расчеты электронной структуры различных атомов и молекул.

Полагаю, что настоящая работа значительным образом дополняет результаты по изучению эффектов, нарушающих фундаментальные дискретные симметрии в физике низких энергий, проводимые ранее различными научными группами. Диссертация Дмитрия Чубукова основана на очень серьёзных теоретических работах, которые опубликованы в восьми высокорейтинговых международных журналах, что наряду с использованием современных теоретических методов, **подчеркивает достоверность полученных результатов**. Во всех восьми статьях, указанных в диссертации, диссертант выступает в качестве первого автора, что свидетельствует о *большом вкладе диссертанта* в разработку исследуемых проблем. Количество из восьми опубликованных работ намного превышает требования, предъявляемые к количеству публикаций по материалам кандидатской работы.. Кроме того, результаты, представленные в диссертации, обсуждались на нескольких международных конференциях. Все это говорит о высоком уровне и большой значимости проделанной работы.

Замечаний по существу работы, которые могли бы подвергнуть сомнению достоверность полученных результатов у меня не имеется. Отмечу лишь некоторые неточности, пожелания и возникшие у меня вопросы.

1. Прежде всего я хотел бы отметить, что автор не обсуждает в работе проблему учета вкладов брейтовского взаимодействия и отрицательного спектра Дирака в величины запрещенных E1- и M1- переходов, средних значений операторов P-, T-нечетных взаимодействий и т.д.. Эти вклады могут быть значительными особенно для операторов, меняющих местами большие и малые компоненты волновой функции. Вопрос состоит в следующем: можно ли оценить погрешность, вносимую использованием приближенного гамильтониана Дирака-Кулона? В качестве пожелания я предложил бы диссертанту продолжить расчеты электронной структуры атомов и молекул с учетом взаимодействия Брейта.

2. На стр.23 указано, что M1 $b \rightarrow X$ переход в молекуле кислорода запрещен в нерелятивистском приближении по правилу g-ч. Я не понял это утверждение. Если речь идет о правиле четности, то оба состояния — одной четности и причем здесь нерелятивистское приближение.

3. На стр.48 написано про смешивание основного состояния молекуле водорода с первым возбужденным состоянием Π_u . Но первым возбужденным состоянием является Σ_u .

4. На стр. 52 обсуждаются две различные формы эффективного ЭДМ гамильтониана. В своих расчетах автор использует вторую форму, которая представляет собой одночастичный оператор. Я согласен с тем, что эта форма более простая. Однако, как показано в работе E.Lindroth, et.al,1989 первая форма оператора дает более точные

результаты, поскольку представляет собой величину порядка α^2 (α — постоянная тонкой структуры), тогда как среднее значения второй формы оператора содержит большие по величине слагаемые, вклады от которых сокращаются в конечном результате.

5. На стр. 61-62 отмечено, что $1s..3d$ и $1s...4f$ электроны были «исключены из корреляционного рассмотрения». Вопрос состоит в следующем: что значит исключены? Использовалось приближение замороженного остова в полноэлектронном расчете или приближение псевдопотенциала? Если использовались псевдопотенциалы (эффективные потенциалы остова (ЭПО)), то, я думаю, надо указать какие ЭПО были использованы.

В целом, диссертация Дмитрия Чубукова выполнена на высоком научном уровне, является законченной научно-исследовательской работой и представляет значительный интерес с теоретической точки зрения, а также дальнейших перспектив для практического применения результатов.

Диссертация Чубукова Дмитрия Валерьевича на тему: «Нарушение фундаментальных симметрий в атомах и молекулах: P, T-нечетный эффект Фарадея и P-нечетная оптическая активность» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 01.09.2016 №6821/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Чубуков Дмитрий Валерьевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 - Теоретическая физика. Пункт 11 указанного Порядка диссертантом не нарушен.

Председатель диссертационного совета

Доктор физико-математических наук, ст.научн.сотр.,
профессор кафедры квантовой механики
физического факультета Санкт-Петербургского
государственного университета

 /Тупицын Илья Игоревич/

5 июня 2020 г