

## ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Андреева Олега Юрьевича на диссертацию Захаровой Анны Вадимовны на тему «Влияние колебаний и вращений на эффекты нарушения пространственной четности и временной инвариантности в многоатомных молекулах», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

Диссертация Захаровой А.И. посвящена изучению свойств молекул, содержащих тяжёлые атомы. В работе представлены прецизионные расчёты различных свойств таких молекул и показана возможность использования результатов этих свойств для изучения нарушений пространственной и временной чётности. Для ряда атомных систем совместное экспериментальное и теоретическое изучение уже позволило или, в принципе, может позволить получить наиболее строгие ограничения на возможные эффекты, вызванные проявлением новой физики. Расчёты, представленные в диссертации, выполнены с использованием самых современных, наиболее точных методов. Численное моделирование многоэлектронных систем в настоящее время очень востребовано, и используется как для подготовки современных экспериментов, так и для анализа и интерпретации экспериментальных данных. Для многих наиболее значимых экспериментов теоретические расчёты играют ключевую роль. Высокая точность представленных расчётов и исключительная сложность рассматриваемых систем определяют высокую актуальность диссертации Захаровой А.В..

Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения.

В введении чётко сформулированы актуальность работы, современное состояние области исследования, сформулированы положения, выносимые на защиту.

В первой главе представлены основные методы расчёта, использованные в диссертации. В частности, в главе представлено уравнение Дирака, вводится крамерсовское сопряжение, обсуждается возможность измерения спина у релятивистского электрона. Также рассматривается межэлектронное взаимодействие с учётом ведущих поправок на брейтовское взаимодействие. Обсуждается учёт межэлектронного взаимодействия с помощью метода Хартри-Фока и учёт корреляция с помощью метода связанных кластеров. Отдельно рассматриваются методы вычисления матричных элементов одноэлектронных операторов. В заключении главы приводятся детали метода псевдопотенциала остова, который позволяет с одной стороны уменьшить количество активных электронов в расчёте, с другой стороны позволяет учитывать такие поправки на брейтовское взаимодействие и радиационные поправки.

Во второй главе представлен довольно подробно статус исследований несохранения P, T-чётности в атомных системах, в частности, в молекулах. Не смотря на слабость слабых взаимодействия в атомных системах по сравнению с электромагнитным взаимодействием, достигаемая высокая точность теоретических расчётов и экспериментальных данных позволяет успешно исследовать эффекты несохранения P, T-чётности в атомных системах и даже зачастую показывать более выдающиеся результаты, чем физика высоких энергий.

**33-06-483 от 17.04.2023**

В главе обсуждается, что для исследований таких тонких эффектов наиболее подходящими являются молекулы, во-первых, допускающие лазерное охлаждение и, во-вторых, должны обладать близкими уровнями противоположной чётности. В главе обсуждается наличие дублетов противоположной чётности: омега-удвоения и l-удвоения. В заключении главы представлен статус исследований трёхатомных и шестиатомных молекул на предмет удовлетворения минимальным требованиям для возможности проведения экспериментов по поиску P,T-нечётных эффектов в этих молекулах.

В третьей главе представлено теоретическое исследование трёхатомной молекулы RaOH. В частности, представлены детали построения гамильтониана, учитывающего движения ядер, нахождения волновых функций ядер и формулы для расчёта параметров усиления на колебательно-вращательных состояниях. Далее, представлены детали расчёта электронной структуры с использованием метода связанных кластеров. В конце главы приведены основные результаты. Среди них можно выделить расчёт потенциальных поверхностей и величину l-удвоения, которые являются очень важными для планирования и интерпретации экспериментов на этой молекуле.

В четвёртой главе рассматривается трёхатомная молекула YbOH. В расчёте использовался метод восстановления четырёхкомпонентных спиноров из двухкомпонентных, использующий разложение соответствующих спиноров по базисам. Корреляции как и предыдущей главе учитывались с помощью методом связанных кластеров. На основе этих электронных расчётов (с фиксированными положениями ядер) был построен потенциал, который использовался для построения ядерных функций в рамках метода связанных каналов. Для расчёта l-удвоения в работе учитывались колебания лиганда OH. Результаты расчётов и соответствующие экспериментальные данные представлены в таблицах. В заключении главы исследуется степень поляризации молекулы и её чувствительность к P,T-нечётным эффектам.

В пятой главе исследуется шестиатомная молекула RaOCH<sub>3</sub>. В начале главы на основе модели жёсткого ротора строится гамильтониан системы. Для отделения вращений и колебаний молекулы рассмотрение ограничилось случаем малых колебаний. Расчёт электронной структуры проводился методами, описанными в предыдущих главах. Полученные электронные потенциалы использовались построения потенциальных поверхностей для ядер исследуемой молекулы. Были вычислены параметры усиления P, T-нечётных эффектов для различных конфигураций молекулы и для различных колебательно-вращательных уровней.

В диссертации Захаровой А.В. представлено теоретическое исследование свойств молекул, содержащих тяжёлые атомы. Учёт колебательных уровней молекул проводился на основе оригинальных методов численного моделирования многоэлектронных систем. В диссертации Захаровой А.В. представлены новые результаты расчётов расщепления уровней энергий и различных параметров поляризации молекул и коэффициентов усиления, необходимых для экспериментального изучения эффектов нарушающих P,T-чётность. Результаты, полученные в диссертации, имеют большое значение для развития моделирования атомных систем и его приложения к решению актуальных задач современной физики, в частности, поиска новой физики.

В целом диссертация написана хорошо, основная, оригинальная, часть работы представлена достаточно подробно и на очень хорошем уровне. Однако надо отметить, что вводная часть диссертации, где представлены используемые методы, местами написана неаккуратно и содержит опечатки и неточности.

К диссертации имеется несколько вопросов.

- 1) Были ли учтены радиационные поправки?
- 2) Расчёт корреляционных эффектов проводился методом связанных кластеров. Почему не проводился их учёт методом наложения конфигураций?
- 3) При экспериментальном исследовании эффектов несохранения чётности проводятся измерения расщепления уровней энергии, вызванные внешними электрическими и магнитными полями. На может ли появление этих внешних полей привести к нарушению симметрии молекулы и неприменимости используемых моделей?

Диссертация Захаровой Анны Вадимовны на тему: «Влияние колебаний и вращений на эффекты нарушения пространственной четности и временной инвариантности в многоатомных молекулах» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 19.11.2021 № 11181/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Захарова Анна Вадимовна 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 обнаружены.

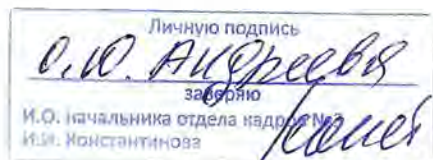
Член диссертационного совета

Доктор физико-математических наук, без учёного звания,  
профессор, кафедра квантовой механики  
Санкт-Петербургского государственного университета

Андреев О.Ю.

29 марта 2023 г.

*Олег Андреев*



*Конст*  
*28.03.2023*

