

## ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Козлова Михаила Геннадьевича 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.

Диссертационная работа А. В. Захаровой посвящена расчетам P,T-нечетных эффектов в многоатомных молекулах-радикалах, имеющих неспаренный электрон. Проведены расчеты трех таких молекул: YbOH, RaOH и RaOCH<sub>3</sub>. Молекулы с ненулевым спином электронов можно использовать для поиска электрического дипольного момента (ЭДМ) электрона и скалярно-псевдоскалярных P,T-нечетных электрон-ядерных взаимодействий. В последнее время, большинство теоретических работ фокусируются на ЭДМ электрона. Отличительная особенность этой диссертации заключается в том, что одинаково подробно рассмотрены оба типа P,T-нечетных вкладов. Такой подход представляется более логичным, поскольку и те, и другие приводят к одним и тем же экспериментально наблюдаемым эффектам, а природа нарушения P- и T-инвариантности до сих пор недостаточно хорошо понятна. Некоторые теоретические модели предсказывают ЭДМ электрона, но в них отсутствуют P,T-нечетные электрон-ядерные силы, тогда как другие модели предсказывают существование таких сил.

Тема диссертации представляется актуальной и проведенные в ней расчеты весьма своевременны. Дело в том, что сейчас происходит быстрое развитие методов прецизионных экспериментов с молекулами. Это позволило недавно провести несколько прорывных экспериментов с двухатомными молекулами и существенно понизить ограничение на величину ЭДМ электрона. Сейчас появляются возможности прецизионных экспериментов и с многоатомными молекулами. Более того, развитие методов охлаждения молекул до сверхнизких температур позволяет ожидать в ближайшее время существенного повышения точности молекулярных экспериментов. Поэтому крайне важно провести теоретические исследования, определить наиболее перспективные многоатомные молекулы и выяснить, какие преимущества они дают, по сравнению с уже используемыми и более простыми двухатомными молекулами.

Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения. Во введении обосновывается выбор темы исследования, объясняются его цели и формулируются положения, выносимые на защиту. Первые две главы описывают современное состояние исследований в данной области и используемый теоретический аппарат. По сути, они являются продолжением введения. Оставшиеся три главы посвящены результатам диссертанта. В каждой из них описан расчет конкретной молекулы. Эти расчеты приведены, по-видимому, в хронологическом порядке, хотя логически было бы естественно начать с более легкой молекулы YbOH, а потом перейти к Ra-содержащим молекулам RaOH и RaOCH<sub>3</sub>.

Диссертация в целом хорошо написана. Изложение достаточно аргументировано и логично. Даются ссылки на все свежие работы по теме диссертации. В тоже время,

некоторые важные результаты, полученные ранее, даются без ссылок. Текст не лишен и некоторых других недостатков. В нем встречается много стилистических небрежностей. В некоторых случаях обсуждение заканчивается без ясно сформулированных выводов. Автор не всегда грамматически верно встраивает уравнения в текст. Например, уравнение (1.52) начинает предложение, в котором нет ни подлежащего, ни сказуемого. Несколько раз в уравнениях появляются величины, которые никак не определены в тексте, или ранее использовались в другом смысле (см., например, уравнение (2.136)). Определение одноэлектронного оператора (1.74) содержит лишний нормировочный множитель, который пропадает в уравнении (1.84). В формуле (3.149) в нескольких местах вместо момента  $k$  стоит момент  $\lambda$ .

По тексту диссертации можно сделать еще несколько замечаний.

1. При формулировании целей работы на стр. 10 сказано, что: «Основная цель диссертационной работы заключается в развитии метода расчета Р,Т-нечетных свойств многоатомных молекул...». Далее идет описание шести решавшихся в диссертации задач. Все они являются конкретными расчетами и нигде не упоминается о методах и об их развитии.
2. Два из семи положений, выносимых на защиту, а именно пятое и шестое, не содержат конкретных физических результатов, которые можно оспорить.
3. При цитировании важной работы [28] приводятся разные результаты, отличающиеся значением величины  $\Omega$ , смысл которой нигде не объяснен.
4. Координаты Якоби впервые появляются на стр. 62 с отсылкой к Рис. 3.3, но этот рисунок показывает только одну из трех координат.
5. На стр. 84 говорится, что учет колебаний лиганда улучшает согласие с экспериментом. Однако, из Таблицы 4.9 видно, что улучшение есть только для одной колебательной моды. Для другой моды экспериментальные результаты плохо согласуются друг с другом и сравнение затруднено. Наконец, для вращательной постоянной согласие с экспериментом при учете колебаний лиганда даже несколько ухудшается.
6. Параграф 4.3 про степень поляризации молекулы  $YbOH$  заканчивается расплывчатым утверждением, что для большинства спин-вращательных уровней коэффициент поляризации не превышает 50%. Остается непонятным, о каких внешних полях идет речь и какова поляризация других уровней. Эта информация принципиальна для эксперимента по поиску ЭДМ молекул и тут надо было провести подробный анализ поляризации всех уровней как функции внешнего поля и привести графики.

Все сделанные выше замечания и пожелания носят частный характер и не влияют на общую оценку работы. Автором получены новые результаты, которые важны для выбора оптимальной молекулы для экспериментов по поиску Р,Т-нечетных эффектов, связанных с электронным спином. Работа выполнена на высоком профессиональном уровне, результаты полностью опубликованы в пяти статьях в ведущих международных рецензируемых журналах *Physical Review A* и *Journal of Chemical Physics* и неоднократно докладывались на научных конференциях. Публикации диссертанта активно цитируются специалистами.

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 ф.-м. н.,

ведущий научный сотрудник,

Петербургский институт ядерной  
физики НИЦ «Курчатовский  
институт»



Козлов Михаил Геннадьевич

3 апреля 2023 г.