

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Столярова Андрея Владиславовича 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.В. посвящена квантово-механическому расчету из первых принципов коэффициентов чувствительности колебательно-вращательных уровней основного электронного состояния ряда линейных многоатомных молекул к возможному нарушению пространственной четности и временной инвариантности, вызванных выходом за рамки Стандартной Модели (СМ) за счет присутствия, так называемых, слабых взаимодействий. Экспериментальный поиск нарушения выводов СМ в лабораторных (земных) условиях требует, очевидно, систематических измерений на беспрецедентно высоком уровне точности. Такая сверхвысокая точность может быть достигнута, в настоящее время, с помощью суб-доплеровской лазерной спектроскопии атомов и молекул, охлажденных до сверхнизких температур. Поиск максимально эффективных путей лазерного синтеза, охлаждения, удержания и манипулирования устойчивых ансамблей ультрахолодных молекул с высокой пространственной плотностью частиц является одной из наиболее **актуальных задач** современной физики. Кроме того, принципиальное повышение предела обнаружения слабых взаимодействий может быть достигнуто за счет прогнозируемого выбора для спектральных измерений уровней энергии, которые в силу своего строения оказались максимально чувствительны к наличию искомых эффектов. Решению именно этой **теоретической задачи** и посвящена работа Захаровой А.В., которая имеет, прежде всего, фундаментальное значение, с точки зрения, получения **новых прецизионных** структурных данных для изолированных молекул, а отдельные ее результаты принципиально важны для решения прикладных задач в области молекулярной спектроскопии сверхвысокого разрешения.

Известно, что более высокая чувствительность молекулярных спектров к нарушению СМ (по сравнению с их атомными аналогами) связана с обилием квазивырожденных уровней энергии, вызванных, прежде всего, наличием у молекул дополнительных (вращательных и колебательных) степеней свободы. В случае двухатомных молекул, эффект квазивырождения электронных термов с ненулевой проекцией электронного углового момента

на межъядерную ось (и соответствующий ему эффект $\Lambda(\Omega)$ -удвоения) хорошо известен и широко эксплуатируется в экспериментах по измерению собственного дипольного момента электрона. В линейных и высоко симметричных многоатомных молекулах данный эффект сопровождается так называемым эффектом l -удвоения, вызванного вырождением колебательных мод. Этот тип вырождения также хорошо известен в спектроскопии многоатомных молекул, но еще ни разу не рассматривался с точки зрения чувствительности спектральных измерений к слабым взаимодействиям. Таким образом, **научная новизна** диссертации Захаровой А.В. не вызывает у меня никаких сомнений.

Автором проведена масштабная сначала теоретическая, а потом и вычислительная работа, направленная на получение уникальной спектроскопической информации о строении колебательно-вращательных уровней трехатомных молекул RaOH и YbOH , а также шестиатомной молекулы RaOCH_3 . Для этого были построены в адиабатическом приближении многомерные поверхности потенциальной энергии для основного электронного состояния молекул с помощью наиболее точных методов релятивистской квантовой химии, которые затем использовались для решения колебательно-вращательной задачи на максимально возможном (для данной размерности) уровне точности. **Достоверность** полученных **теоретических** результатов обеспечивается использованием наиболее точных и надежных методов решения многомерного уравнения Шредингера, а подтверждается их совпадением с имеющимися высокоточными спектральными (экспериментальными) данными. Представленные в работе Захаровой А.В. расчетно-теоретические результаты имеют, на мой взгляд, не только очевидную теоретическую, но и **практическую значимость**, прежде всего, с точки зрения планирования и оптимизации будущих спектральных экспериментов, направленных на поиск неопровержимых доказательств нарушений выводов Стандартной Модели.

По результатам диссертации опубликовано 5 оригинальных статей в ведущих (высокорейтинговых) международных научных журналах. Промежуточные результаты работы неоднократно представлялись автором на всероссийских и международных конференциях различных уровней.

У меня нет принципиальных возражений по содержанию и форме изложения диссертационной работы Захаровой А.В., но в ходе прочтения у меня возникли следующий вопрос и замечания:

1. Почему для численного решения колебательно-вращательного уравнения Шредингера (в случае линейных молекул RaOH и YbOH) Вы использовали собственные «home-made» разработки, а

не воспользовались “стандартной” программой DVR3D (J. Tennyson *et al*, “DVR3D: a program suite for the calculation of rotation–vibration spectra of triatomic molecules” *Comp. Phys. Comm.*, V.163(2), 2004, P 85-116; doi:10.1016/j.cpc.2003.10.003), широко используемой для оценки энергий и волновых функций 3-х атомных молекул?

- У меня есть большие сомнения в степени общности Вашего утверждения на стр.7 (верх): «Близко расположенные дублеты противоположной четности в двухатомных молекулах, такие как Λ и Ω -дублеты, соответствуют возбужденным электронным состояниям».
- Используемый Вами термин (на стр. 3, раздела «Содержание») «размер лиганда OH» я бы заменил на «пространственную геометрию OH группы»

В заключении могу подтвердить следующие утверждения:

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

Столяров Андрей Владиславович

Доктор физико-математических наук
Заведующий кафедрой лазерной химии,
Московский государственный
университет имени М.В. Ломоносова

10.04.2023

