

ОТЗЫВ

председателя диссертационного совета Тупицына Ильи Игоревича 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 Захаровой А.В. посвящена развитию метода расчета P,T-нечетных свойств многоатомных молекул, с учётом их колебательно-вращательной структуры. В работе рассматриваются такие одноэлектронные свойства молекул, в которых может проявляться влияние электрического дипольного момента электрона (eEDM) и скалярно-псевдоскалярного электрон-ядерного взаимодействия (слабого взаимодействия электронов с ядром).

Актуальность диссертационной работы обусловлена тем, что P-, T-нечетные свойства молекул представляют большой интерес для фундаментальной физики. В данной работе рассмотрены многоатомные молекулы, которые в отличие от двухатомных, допускают поперечные вибрационные степени свободы. Такие состояния могут быть хорошей платформой для поиска новой физики за пределами Стандартной модели взаимодействий. Важным является тот факт, что рассмотренные в работе трехатомные молекулы RaOH и YbOH допускают лазерное охлаждение. Кроме того, возбужденные состояния этих молекул образуют так называемые l-дублеты противоположной четности. Для планирования экспериментов по поиску новой физики нужны высокоточные расчеты параметров, которые устанавливают связь величины расщепления энергетических уровней l-дублета с коэффициентами усиления эффектов нарушения пространственной и временной четности. Поэтому актуальность темы диссертации не вызывает сомнения.

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка использованных обозначений, приложения, списка литературы. Работа включает 136 страниц, 21 рисунок и 12 таблиц. Список литературы состоит из 127 наименований.

Во введении описывается актуальность темы исследования, степень её разработанности, цели и задачи диссертационной работы, её научная новизна, значимость, применяемые методы исследования. Кроме того, формулируются выносимые на защиту положения и представляется апробация работы.

В первой главе содержится подробный обзор различных релятивистских методов расчета электронной структуры молекул, основанных на использовании одноэлектронных уравнений Дирака-Фока и многоэлектронных уравнений Дирака-Кулона-Брейта. Подробно описаны метод связанных кластеров, метод псевдопотенциала, а также процедуры вычисления одноэлектронных свойств молекул, основанные на использовании одночастичной матрицы плотности.

Вторая глава диссертации посвящена обзору полученных к данному моменту результатов исследований P-, T-нечетных эффектов в

молекулах. Обсуждаются эффекты нарушения четности в Стандартной модели и в сценариях Новой физики, а также методы их поиска в трехатомных и шестиатомных молекулах.

В главе 3 выполнены расчеты колебательно-вращательных состояний трехатомной молекулы RaOH методом связанных каналов в адиабатическом приближении Борна-Оппенгеймера. Рассчитаны соответствующие им значения параметров усиления Р-, Т-нечетных взаимодействий. Подробно анализируются полученные результаты.

Глава 4 посвящена расчетам электронной и колебательно-вращательной структуры трехатомной молекулы YbOH с фиксированной геометрической конфигурацией лиганда, а также вычислениям параметров усиления Р-, Т-нечетных эффектов в молекуле YbOH . Для расчета колебательно-вращательных состояний здесь также применен метод связанных каналов. Выполнен подробный анализ полученных результатов.

В главе 5 в рамках приближения малых колебаний аналитически рассмотрена задача колебаний шестиатомной молекулы типа «симметричный волчок» RaOCH_3 . Рассчитаны Р-, Т- нечетные свойства.

В заключении приведены основные результаты и выводы, полученные в рамках диссертационной работы.

Остановливаясь на работе в целом, можно отметить, что Анна Вадимовна Захарова успешно справилась с поставленными перед ней задачами. Был получен целый ряд важных результатов, которые свидетельствуют о высокой научной ценности и новизне работы.

Среди основных результатов следует отметить следующие.

Разработаны специальные методы, которые были использованы для расчета величины l -удвоения в трёхатомных молекулах RaOH и YbOH . Результаты этих расчетов позволили определить напряженность внешнего поля, которое нужно приложить к трехатомной молекуле для ее поляризации.

Была изучена зависимость параметров усиления Р-, Т-нечетных эффектов от геометрии трёхатомных молекул RaOH и YbOH . Исследовано влияние колебаний лиганда OH на величину l -удвоения в YbOH .

Разработана программа, реализующая метод конечного поля на CCSD уровне для Т-нечетных свойств, рассчитываемых с помощью метода одноцентрового восстановления спиноров.

На CCSD(T) уровне была получена потенциальная поверхность шестиатомной молекулы RaOCH_3 . Были получены аналитические волновые функции ядер в гармоническом приближении. Был развит метод расчета и изучены Р-, Т-нечетные эффекты в шестиатомной молекуле типа «симметричный волчок». При этом параметр усиления для скалярно-псевдоскалярного электрон-ядерного взаимодействия и влияние колебаний молекулы ранее не изучались для шестиатомных молекул.

Достоверность полученных результатов подтверждается хорошим согласием с данными экспериментов и расчетами других авторов. Результаты работы отражены в пяти публикациях в высокорейтинговых международных журналах, а также неоднократно докладывались на международных и российских конференциях, на научных семинарах

кафедры квантовой механики СПбГУ и отделения перспективных разработок ПИЯФ.

Существенных замечаний по диссертационной работе Захаровой А. В. , которые могли бы поставить под сомнение основные выводы работы, у меня не имеется. Однако у меня имеется три вопроса и ряд мелких замечаний по тексту диссертации.

Вопросы:

- 1) В расчетах колебательно-вращательной структуры молекул RaOH и YbOH был использован метод связанных каналов, который позволяет решить уравнения, описывающее движение ядер, с высокой степенью точности. Однако само уравнение было получено в адиабатическом приближении Борна-Оппенгеймера. В связи с этим возникает вопрос. Можно ли оценить погрешность, вносимую пренебрежением неадиабатическими слагаемыми?
- 2) В параграфе 1.3.1 описан метод вычисления средних значений операторов с использованием одночастичной матрицы плотности, построение которой основано на знании многоэлектронной волновой функции. Кроме того, на стр.67 отмечено, что корреляционные одноэлектронные матрицы плотности были получены использованием метода CCSD. Насколько я представляю, многоэлектронная волновая функция в методе связанных кластеров определяется с большой погрешностью. Поэтому обычно при вычислении средних значений физических величин используется метод конечного поля. Почему в диссертационной работе используется построение одночастичной матрицы плотности в методе CCSD вместо использования метода конечного поля?
- 3) В работе использовано нестандартные выражения (1.101) и (1.103) для биспинора Дирака в центральном поле. Отсутствует множитель мнимой единицы перед малой компонентой. Это означает, что радиальная часть малой компоненты атомной волновой функции должна быть комплексной. Можно ли пояснить, почему использовано такое представление?

Мелкие замечания:

- а) опечатка в ф-ле (1.20)
- б) в ф-ле (1.35) пропущена 2
- в) в формуле (1.43) неправильно дано разбиение взаимодействия Брейта на два вклада Гаунта и запаздывания. Вклад Гаунта должен быть в два раза больше.
- г) ссылка [31] не содержит название журнала
- д) непонятный термин на стр.73: «ядерный спинор Yb »
- и др.

Конечно, перечисленные выше замечания являются несущественными, и их наличие объясняется большим объемом текста диссертации (более

130 стр.)

В заключение я хотел бы отметить, что Захаровой А.В. выполнен очень большой объем работы. Предложенные в диссертационной работе теоретические методы позволяют проводить высокоточные расчеты колебательно-вращательных характеристик трехатомных молекул, а также с высокой степенью надежности оценивать коэффициенты усиления Р-, Т- нечетных эффектов. Полученные Захаровой А.В. результаты имеют важное значение как для планирования, так и для интерпретации экспериментов по поиску новой физики за пределами стандартной модели.

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.

Председатель диссертационного совета
Доктор физ.мат.наук, ст.научн.сотр.,
профессор кафедры квантовой механики
СПбГУ

/Тупицын Илья Игоревич/

Дата 07.04.2023