

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Зайцевского Андрея Вениаминовича 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.

Исследование эффектов нарушения дискретных симметрий фундаментальных взаимодействий в низкоэнергетических экспериментах с атомными и молекулярными системами представляет собой одну из важнейших задач современной физики. Планирование подобных экспериментов, в том числе оптимальный выбор объектов для них, и интерпретация их результатов невозможны без моделирования электронной структуры молекул и теоретического прогнозирования параметров усиления нечетных взаимодействий. Наиболее перспективными в настоящее время считаются эксперименты с многоатомными молекулами, для которых в той или иной степени характерна структурная жесткость и соответственно можно ожидать существенного влияния вращений и колебаний на их свойства. Ввиду этого *актуальность и своевременность* диссертационной работы А.В. Захаровой, в которой детально рассматривается такое влияние в перспективных для экспериментальных исследований системах, не вызывает сомнений. Дополнительным аргументом в пользу необходимости такого исследования послужило недавнее сообщение Prasnaa с соавт. (*Phys. Rev. A* 99, 062502 (2019)) о весьма сильном и нерегулярном изменении молекулярных параметров, определяющих усиление P, T -нечетных эффектов в молекуле $YbOH$, при ее деформации. Уместно подчеркнуть, что тема работы является совершенно *новой*: вычисления параметров усиления для конкретных ровибрационных состояний многоатомных молекул никогда ранее не проводились, и все важнейшие результаты работы *оригинальны*.

Первые две главы диссертации представляют обзор литературы; стоит отметить компактную и информативную вторую главу, посвященную современному состоянию исследований P, T -нечетных эффектов на молекулах, которую можно рекомендовать широкому кругу читателей для знакомства с предметом. Основное содержание работы распределено по трем последующим главам в соответствии с объектами исследования — молекулами $RaOH$, $YbOH$ и $RaOCH_3$. Для каждой из исследованных систем релятивистским методом связанных кластеров построена поверхность потенциальной энергии основного состояния и рассчитаны коэффициенты усиления собственного электрического дипольного момента электрона и скаляр-псевдоскалярного электрон-ядерного взаимодействия. Методом связанных каналов с высокой точностью решена колебательно-вращательная задача, определены параметры l -удвоения в трехатомных молекулах и средние значения коэффициентов усиления для индивидуальных колебательно-вращательных состояний. На примере $YbOH$ показано, что учет деформируемости фрагмента $O-H$, часто игнорируемой при моделировании наиболее

низких колебательно-вращательных состояний молекул моногидроксидов металлов, на самом деле необходим для прецизионного воспроизведения параметров I -удвоения.

Результаты работы и сделанные на их основании выводы имеют принципиальное *значение* для попыток экспериментальной регистрации P , T -нечетных эффектов и, следовательно, *для фундаментальной физики*. Уже одно только исключение возможности катастрофических изменений параметров нечетных взаимодействий при деформации ядерной конфигурации значительно упростит жизнь исследователям. Следует особо отметить *значимость* программных разработок А.Захаровой (реализация метода одноцентрового восстановления структуры волновой функции вблизи ядра с использованием кватернионного представления молекулярных спиноров, которая найдет применение для численного моделирования широкого круга свойств молекулярных систем, и средства расчета T -нечетных свойств методом конечного поля). Весьма ценным является накопленный диссертантом опыт расчета ровибрационных состояний нежестких молекул с относительно жестким фрагментом методом связанных каналов.

Достоверность полученных результатов гарантируется корректностью теоретического анализа и использованием наиболее надежных средств как релятивистского моделирования электронной структуры молекул, так и решения колебательно-вращательной задачи. Дополнительным аргументом в пользу их достоверности является публикация результатов в наиболее авторитетных международных научных изданиях, практикующих рецензирование рукописей. Отмечу, что в большинстве публикаций А.В. Захарова является первым автором (а в одной — единственным), что указывает на ее *определяющий вклад* в проведение исследований. Полная *обоснованность выводов* не вызывает сомнений. Текст работы логично построен и удобен для восприятия, несмотря на обилие опечаток и особенности авторской пунктуации.

У меня нет каких-либо возражений или замечаний по содержанию диссертационной работы, однако я полагаю уместными следующие *замечания* касательно представленного текста:

а) Утверждение “В программном пакете DIRAC взаимодействие Гонта может быть подключено ... но текущая реализация программы не позволяет использовать его за пределами SCF вычислений (стр 25)” неверно, это взаимодействие может быть включено в расчет методом связанных кластеров в приближении “среднего поля” (в сходном приближении брейтовское взаимодействие описывается обобщенными псевдопотенциалами, используемыми диссертантом).

б) Базисные системы Ra и Yb, использованные в расчетах, не описаны явным образом в диссертации; при этом указанный в работе интернет-ресурс с описанием этих базисов (<http://www.qchem.pnpi.spb.ru/Basis/>) не существует и, если верить WaybackMachine, в обозримом прошлом не существовал. Та же ссылка фигурирует в публикациях. Это осложняет оценку надежности соответствующих расчетных результатов.

Я подчеркиваю, что замечания относятся только к изложению материала и никак не затрагивают сути работы.

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, ст. научн. сотр.,
главный научн. сотр. химического факультета
МГУ им. М.В. Ломоносова

07.04.2023

А.В. Зайцевский

Подпись А.В. Зайцевского удостоверяю

