

ОТЗЫВ

Члена диссертационного совета Чувильского Юрия Михайловича на диссертацию Петрова Александра Николаевича на тему «Теоретическое исследование двухатомных молекул для поиска электрического дипольного момента электрона», представленную на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.02. — Теоретическая физика.

Диссертация А.Н. Петрова «Теоретическое исследование двухатомных молекул для поиска электрического дипольного момента электрона» посвящена разработке методов прецизионного описания свойств содержащих тяжелые атомы молекул и молекулярных ионов. Данные методы используются для расчета свойств молекулярных систем, наиболее удобных для поиска электрического дипольного момента электрона и родственных этому экзотических эффектов. Анализируются как эти эффекты, так и разнообразные явления, маскирующие их, то есть препятствующие получению экспериментальных результатов с высокой точностью.

Современный уровень теоретических исследований двухатомных молекул достаточно высок и постоянно повышается. Для молекул, содержащих относительно легкие атомы можно, по всей видимости, говорить о перспективах их вполне адекватного для подавляющего большинства задач *ab initio* (из первопринципов) описания, полностью свободного от апелляций к каким-либо феноменологическим значениям их характеристик. Для молекул, содержащих тяжелые атомы, существуют и постоянно развиваются мощные теоретические подходы, в которых влияние внутренних электронных оболочек тяжелых атомов и некоторых других факторов на свойства молекулы трактуется в несколько упрощенном виде. Движение в сторону полностью *ab initio* описания таких молекул продолжается. Именно эти подходы составляют методическую основу обсуждаемой диссертации, причем вклад автора в их развитие весьма велик.

Главной целью диссертации является разработка обладающего необходимой точностью метода и расчет с его помощью напряженности эффективного электрического поля и других свойств молекул, определяющих возможности измерения в опытах с ними электрического дипольного момента электрона и других эффектов, нарушающих P-четность и инвариантность по отношению к изменению знака времени, а также T-инвариантных P-нечетных эффектов. Для уточнения отмечу, что обсуждаемый теоретический метод должен не просто описывать свойства молекул в вакууме, но и их отклик на статические электромагнитные поля, а также не переменное поле лазерного излучения. На пути к этой цели автор ставит множество промежуточных задач, решение которых имеет самостоятельную ценность. В частности решается задача прецизионных вычислений постоянной тонкой структуры и g-факторов, оценки влияния магнитного квадрупольного момента ядра на молекулярные спектры, минимизации эффектов, приводящих к систематическим ошибкам экспериментов и ряд других проблем.

Актуальность избранной темы диссертации и выбора целей, поставленных перед собой автором, заключается в следующем.

1. Наличие постоянного дипольного момента элементарных частиц, в частности электрона, указывает на существование каких-то фундаментальных свойств материи, полей и вакуума, не известных до сих пор. Поиск эффектов, вступающих в противоречие с представлениями весьма успешно описывающей физический мир Стандартной модели, является, без преувеличения, главным направлением в современной фундаментальной физике.
2. Эксперименты, направленные на поиск таких явлений, можно разделить на два класса. Во-первых, это эксперименты на рекордных по энергии ускоряемых частиц ускорителях, во-вторых – высокочувствительные эксперименты, направленные на поиск экзотических,

09/2-130 от 20.02.2020

не предсказываемых Стандартной моделью явлений. Эксперименты первого типа ограничены по «экономическим» причинам – предел на энергию ускоряемых частиц кладет резкий рост материальных и финансовых затрат на строительство ускорителей, превосходящих существующие по энергии частиц и светимости. В связи с этим роль экспериментов второго типа в развитии физики фундаментальных взаимодействии будет, вероятно, возрастать.

3. Использование атомных и молекулярных объектов представляется наиболее перспективным для исследований такого рода в силу их широкого выбора, богатства их свойств, надежных знаний о взаимодействиях, определяющих эти свойства, высокой точности спектроскопических измерений, богатых возможностей контроля экспериментами предыдущих экспериментов и теории.

4. Эксперименты, направленные на поиск электрического дипольного момента электрона в настоящее время весьма популярны, их техника совершенствуется и в ближайшем будущем можно ожидать существенного уточнения результатов – получения более низких верхних границ эффекта. Уже достигнутое значение верхней границы – $1.1 \cdot 10^{-29}$ е·см – является уникальным в смысле точности. Достаточно указать, что размер, характеризующий указанное значение, на несколько порядков меньше длины волны электрона, получаемой в пучках ускорителей электронов с наибольшей выходной энергией.

5. Теоретическое вычисление как изучаемого, так и маскирующих эффектов, анализ взаимосогласованности различных экспериментальных данных об исследуемых молекулах является принципиально важным для анализа проведенных и планирования последующих экспериментов. Прделанная автором оптимизация разрабатываемого теоретического подхода под задачу поиска электрического дипольного момента электрона выделяется своей важностью на фоне других задач, относящихся к теории двухатомных молекул.

Приведу, в несколько сокращенном и модифицированном виде, список сформулированных автором результатов, выносимых на защиту:

1. Метод расчета сверхтонкой структуры эффектов Штарка и Зеемана (в том числе в переменных полях) двухатомных молекул, содержащих тяжелые атомы.
2. Значения констант сверхтонкой структуры, а также g -факторов во внутренней системе координат для основного электронного состояния $^2\Pi_{1/2}$ молекулы PbF.
3. Величины коэффициентов чувствительности частоты перехода между компонентами сверхтонкой структуры основного вращательного состояния молекулы PbF к вариациям фундаментальных постоянных.
4. Значения напряженности эффективного электрического поля E_{eff} в молекулах PbO, Hf⁺, PbF и HfF⁺. Функция зависимости E_{eff} для катиона HfF⁺, находящегося во внешних вращающихся электрическом и магнитном полях от величины магнитного поля.
5. Демонстрация принципиальной возможности улучшить оценку качества расчета E_{eff} в состояниях $H^3\Delta_1$ молекул ThO, WC, HfF и ThF⁺ за счет анализа возмущения сверхтонкой структуры состояния $H^3\Delta_1$.
6. Доказательство наличия корреляции частоты Раби перехода $H \rightarrow C$ в молекуле ThO с направлениями внешних магнитного и электрического полей.
7. Демонстрация взаимного сокращения эффектов, связанных с геометрической фазой (в присутствии вращающегося электрического поля) при проведении эксперимента на разных компонентах Ω -дублета вращательных состояний $H^3\Delta_1$ молекулы ThO.
8. Результаты расчета эффекта, связанного с интерференцией $E1$ и $M1$ амплитуд лазерного излучения, используемого для приготовления рабочего состояния и «считывания» сигнала электрического дипольного момента электрона в молекуле ThO.

9. Результаты первого расчета величины эффекта Зеемана для Ω -дублетов молекул ThO, HfF⁺, WC и PbO во внешних электрических и магнитных полях. Демонстрация важности учета неадиабатических эффектов.

10. Вывод, что g-факторы дублетов Штарка сверхтонкого подуровня $J = 1$, $F = 1/2$ молекул ¹⁸⁰Hf¹⁹F⁺, ²⁰⁷Pb¹⁶O, ¹⁸³W¹²C и второго вращательного подуровня $J = 2$ молекулы ThO становятся равными для величины внешнего электрического поля, находящейся в диапазоне удобных для эксперимента энергий, объяснение этого эффекта.

11. Результаты вычисления частоты f^D в катионе ¹⁸⁰Hf¹⁹F⁺ во внешних вращающихся электрическом и магнитном полях.

12. Оценка влияния магнитного квадрупольного момента ядра на спектр двухатомной молекулы.

Все указанные результаты являются новыми и значимыми для интерпретации существующих и подготовки последующих экспериментов по поиску электрического дипольного момента электрона. Развитые методы создают почву для дальнейшего развития теории двухатомных молекул.

Добавлю еще, что область применения этих методов на самом деле значительно шире, чем область непосредственных расчетов объектов, изучаемых в диссертации. Они могут использоваться в самых различных областях науки и практики, начиная от радиационной медицины и заканчивая так называемыми «ядерными часами». Продолжением этого очевидного достоинства диссертационной работы является небольшой недостаток – указанный результат было бы весьма полезно включить в представленный выше перечень.

Автор проделал очень большую и тщательную работу для достижения достоверных результатов. С этой целью:

1. Рассчитывался широкий набор характеристик изучаемых молекулярных состояний.
2. Значительная часть результатов получена в рамках двух различных подходов. Сравнением этих величин с экспериментальными, за счет выбора базиса, проводилась «калибровка» теоретической схемы.

В итоге достигнуто хорошее согласие теории с имеющимися экспериментальными данными.

Кроме указанного выше недостатка замечаний к содержанию диссертации у меня нет. Что касается формы изложения материала, то в нем можно обнаружить некоторое число опечаток, неточных терминов и неаккуратно построенных утверждений. Выделю некоторые из них.

1. Использование термина *ab initio* по отношению к методам вычислений развитым и применяемым автором, представляется некоторым преувеличением, хотя, вероятно, и общепринятым в сообществе исследователей данной области теоретической физики. Занимаясь подобными расчетами ядерных систем должен указать, что в этом, работающем над близкими в смысле используемых методик проблемами, сообществе принято называть *ab initio* подходом схему, где используется полный до какого-то уровня обрезания базис, в котором все конститuentы системы (нуклоны) могут занимать произвольные орбиты.

2. Часть опечаток вызывает сожаление. Так, на стр. 54 единицами напряженности электрического поля указаны эВ и КэВ. Или, на стр. 80 встречается оборот: «...эффектов, нарушающих пространственную и временную четности..». T-нечетные эффекты в различных процессах хотя и относятся к экзотическим, но встречаются достаточно часто (в том числе они к нарушению фундаментальной симметрии).

Все указанные недостатки малозначимы и не снижают высокой оценки качества исследования, проделанного автором и содержания диссертационной работы, представленной к защите.

Результаты диссертации представлены в 30 статьях, опубликованных в ведущих российских и международных журналах, индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus и входящих в перечень ВАК РФ. Они хорошо цитируются. Этот факт является надежным подтверждением уровня представленной работы.

Диссертация Петрова Александра Николаевича на тему: «Теоретическое исследование двухатомных молекул для поиска электрического дипольного момента электрона» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 01.09.2016 № 6821/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Петров Александр Николаевич заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01 04 02. – Теоретическая физика. Пункт 11 указанного Порядка диссертантом не нарушен.

Член диссертационного совета, ведущий научный сотрудник НИИЯФ МГУ, доктор физико-математических наук, профессор

Чувильский Ю.М.

14 февраля 2020 г.

Подпись Ю.М. Чувильского заверяю Ученый Секретарь НИИЯФ МГУ



Сигаева Е.А.