

## ОТЗЫВ

**члена диссертационного совета 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.**

Диссертационная работа А. Н. Петрова посвящена теоретическому исследованию двухатомных молекул, содержащих тяжелые атомы и являющихся актуальными для поиска «новой физики» за пределами Стандартной модели фундаментальных взаимодействий. Основной целью работы является разработка метода прецизионных расчетов структурных характеристик молекул с учетом влияния спинов ядер и в присутствии внешних электрических и магнитных полей, в том числе и зависящих от времени. Метод позволяет учитывать влияние неадиабатических эффектов, связанных с взаимодействием различных электронных и вращательных состояний, что приводит к уточнению точности и повышению надежности расчетов и позволяет обнаружить новые эффекты, не рассмотренные ранее в литературе.

Метод применен для расчетов двухатомных молекул, которые рассматриваются как наиболее перспективные для экспериментальных поисков электрического дипольного момента электрона (еЭДМ). Это фториды, карбиды и оксиды переходных элементов, лантаноидов и актиноидов, которые содержат открытые электронные оболочки и обладают сложной электронной структурой. Трудности усугубляются тем обстоятельством, что ряд вычисляемых характеристик описываются операторами, которые локализованы в области атомных ядер. Вычисление матричных элементов таких операторов в молекулах, содержащих атомы тяжелых элементов, является чрезвычайно сложной задачей, в которой необходимо надежно учитывать как релятивистские эффекты, так и эффекты электронной корреляции.

Актуальность диссертационной работы несомненна в связи с впечатляющим прогрессом экспериментальных исследований по поиску еЭДМ и других эффектов, нарушающих пространственную четность (P) и временную инвариантность (T) в молекулах, достигнутым за последние годы. Благодаря чрезвычайно высокой точности спектроскопических измерений, таким экспериментам удается получать ограничения на расширения Стандартной модели, которые успешно конкурируют с результатами, получаемыми в физике высоких энергий. В частности, ограничение на величину еЭДМ, полученное в серии экспериментов на молекуле ThO в 2014 – 2018 гг, практически закрыло минимальные модели суперсимметрии, которые до этого часто рассматривались как наиболее вероятные кандидаты на расширение Стандартной модели. Сегодня на повестке дня стоит дальнейшее увеличение точности этих экспериментов и расширение экспериментальных исследований на другие молекулы (ThF<sup>+</sup>, PbF, WC), что требует надежных теоретических расчетов на новом уровне точности. Именно такие расчеты и выполняются в диссертационной работе.

09/2 - 109 от 13.02.2020

Достоверность результатов, полученных в диссертационной работе, подтверждается хорошим согласием теоретических расчетов с имеющимися экспериментальными данными, согласием между численными и аналитическими вычислениями, проведением вычислений различными методами и использованием комплекса программных кодов, разработанных автором диссертации. Результаты работы докладывались на российских и международных конференциях и своевременно опубликованы в ведущих международных научных журналах, включая три статьи в высокоимпактном журнале *Physical Review Letters*.

Диссертация состоит из введения, восьми глав, заключения и приложения. Список литературы включает 152 наименования и достаточно полно отражает основные научные публикации по обсуждаемым вопросам.

Во введении продемонстрированы актуальность и новизна проведенного исследования, сформулированы цели и задачи диссертации, изложено краткое содержание работы и полученные результаты.

В первой главе описывается метод, разработанный для вычислений энергетических спектров двухатомных молекул, включая сверхтонкую структуру и расщепления уровней, возникающие во внешних электрических и магнитных полях (эффекты Штарка и Зеемана). В разработанном методе энергетические уровни и волновые функции молекулы получаются в результате диагонализации гамильтониана молекулы в базисе электронных колебательно-вращательных функций, полученных в адиабатическом приближении. Метод позволяет также учитывать возмущения спектра молекулы вследствие неадиабатических эффектов и взаимодействий с внешними электрическими и магнитными полями, в том числе, полями, изменяющимися во времени. Учет неадиабатических эффектов в ряде случаев оказывается критически важным для адекватного описания экспериментальных данных и получения теоретических предсказаний на необходимом уровне точности.

Важным достоинством метода является то, что он является релятивистским и, как следствие, применим для молекул, содержащих тяжелые атомы. Помимо этого, метод позволяет выполнять качественные расчеты матричных элементов сингулярных операторов, которые локализованы вблизи ядра тяжелого атома. Часть матричных элементов в этом методе удается извлекать из эксперимента (вращательные постоянные, центробежные поправки, константы сверхтонкого взаимодействия, дипольные моменты), что позволяет существенно повысить точность расчетов.

Во второй главе излагается теория  $e\text{ЭДМ}$  в двухатомной молекуле. Показано, что для извлечения величины  $e\text{ЭДМ}$  из эксперимента необходимы теоретические предсказания для так называемого параметра «эффективного электрического поля», вычисления которого для различных молекул являются одной из центральных тем диссертации. Продемонстрировано, что параметр эффективного поля определяется малыми компонентами волновой функции и, как следствие, имеет большее значение в полярных молекулах с атомами тяжелых элементов, где возрастает роль релятивистских эффектов. Изложена схема экспериментов, направленных на обнаружение  $e\text{ЭДМ}$  в молекулах. Показано, что использование дополнительного внешнего магнитного поля позволяет

значительно снизить систематические погрешности эксперимента. Проанализированы основные паразитные эффекты, приводящие к систематическим погрешностям в реальных экспериментальных условиях.

В третьей главе выполнено теоретическое исследование спектральной структуры молекулы оксида свинца  $PbO$ . Результаты расчетов использовались для интерпретации экспериментальных данных и получения экспериментальных ограничений на величину  $eЭДМ$ . Получены точные значения параметра эффективного электрического поля для состояний молекулы  $PbO$ , актуальных для эксперимента. Изучен эффект неадиабатического взаимодействия с ближайшим возбужденным состоянием для сверхтонкой структуры и магнитных свойств используемого для поиска  $eЭДМ$  состояния молекулы. Показано, что учет данного взаимодействия важен для прецизионных расчетов, особенно в случае  $g$  факторов. Обнаружено, что разность  $g$  факторов верхнего и нижнего дублетов Штарка сверхтонкого подуровня ( $J = 1, F = 1/2$ ) обращается в ноль для определенного значения внешнего электрического поля. Это обстоятельство может быть использовано в экспериментах по поиску  $eЭДМ$  для подавления систематических эффектов, связанных с неконтролируемой компонентой магнитного поля.

Четвертая глава диссертации посвящена расчету параметра эффективного электрического поля для катиона молекулы иодоводорода  $HI^+$ . На основании выполненного расчета делается вывод о перспективах экспериментов по поиску  $eЭДМ$  в данной молекуле, предложенных ранее в литературе.

В пятой главе выполняется теоретическое исследование структуры спектров молекулы фторида свинца  $PbF$ . Актуальность данной молекулы определяется тем, что в ней предсказаны значительные усиления эффектов, нарушающих пространственную и временную четности, эффектов  $P$ -нечетного анапольного момента и эффектов вариации фундаментальных постоянных со временем. Кроме того, сверхтонкая структура спектров этой молекулы известна с высокой точностью из экспериментов, что позволяет использовать эти данные для улучшения точности теоретических расчетов. В главе получены надежные теоретические значения для параметра эффективного поля и постоянных сверхтонкой структуры на ядре свинца. Найденные результаты находятся в согласии с последними экспериментальными данными. Решена проблема расхождения между некоторыми экспериментальными данными и теоретическими предсказаниями для знака постоянной сверхтонкой структуры  $PbF$ . Показано, что расхождение, существовавшее в литературе, было связано с проблемой в фазовом множителе в спин-вращательной волновой функции. Рассчитаны коэффициенты чувствительности частоты перехода между компонентами сверхтонкой структуры основного вращательного состояния молекулы  $PbF$  к вариациям фундаментальных постоянных. Найдено, что эффект вариации постоянной тонкой структуры усиливается до двух порядков величины, а коэффициент чувствительности к вариации отношения массы легкого кварка к масштабу квантовой хромодинамики усилен на два порядка по сравнению с коэффициентом чувствительности для атомных часов.

В шестой главе выполнены теоретические расчеты молекулы карбида вольфрама  $WC$ , которые необходимы для подготовки экспериментов по поиску  $eЭДМ$  в этой молекуле и анализа ожидаемых систематических эффектов. Изучено влияние неадиабатического

взаимодействия с ближайшим электронным состоянием на сверхтонкую структуру используемого для поиска  $e\text{ЭДМ}$  состояния. Рассчитаны зависимости  $g$ -факторов как функции внешнего электрического поля для основного вращательного состояния молекулы. Обнаружено, что разность  $g$ -факторов верхнего и нижнего дублетов Штарка сверхтонкого подуровня ( $J = 1, F = 1/2$ ) обращается в ноль для определенного значения электрического поля, что позволяет существенно уменьшить ведущую систематическую погрешность, связанную с неконтролируемой компонентой магнитного поля в эксперименте.

Седьмая глава диссертации посвящена теоретическому изучению структуры спектров молекулы монооксида тория  $\text{ThO}$ . Актуальность исследований определяется тем, что именно для этой молекулы получены наилучшие на сегодняшний день ограничения на величину  $e\text{ЭДМ}$ . Основное внимание уделено изучению зависимости  $g$ -факторов уровней от внешнего электрического поля, что необходимо для анализа возможных систематических эффектов и дальнейшего увеличения точности эксперимента. Детально изучены паразитные эффекты, приводящие к систематическим погрешностям и снижающим точность эксперимента: эффект геометрической фазы, связанный с неоднородностью внешнего электрического поля, эффект штарковской интерференции между  $E1$  и  $M1$  амплитудами лазерного излучения, эффект нестабильности поляризации лазерного излучения.

В восьмой главе выполнено теоретическое исследование структуры спектров катиона молекулы фторида гафния  $\text{HfF}^+$ . Эта молекула является весьма перспективной для экспериментов по поиску  $e\text{ЭДМ}$ , а также для поиска  $T, P$ -нечетных эффектов, связанных с ядерным магнитным квадрупольным моментом. Получены надежные теоретические значения параметра эффективного поля; выявлены наиболее подходящие переходы для экспериментальных поисков  $e\text{ЭДМ}$ . Вычислены неадиабатические эффекты в структуре уровней, возникающие из-за взаимодействий с соседними электронными состояниями. Найдено сокращение систематических эффектов при оптимальном значении внешнего электрического поля. Показано, что в существующем эксперименте по поиску  $e\text{ЭДМ}$  в катионе  $\text{HfF}^+$  оценки систематической экспериментальной погрешности, связанной с «загрязнением» уровней омега дублетов, могли быть существенно завышены из-за пренебрежения неадиабатическими взаимодействиями при его расчете. Этот результат подтверждает перспективность данной молекулы для дальнейших поисков  $e\text{ЭДМ}$ . Вычислены сдвиги уровней, возникающие в результате взаимодействия с ядерным магнитным квадрупольным моментом.

В заключении сформулированы основные положения диссертации, выносимые на защиту.

По содержанию диссертации можно сделать следующее замечание:

- Дипольное сверхтонкое взаимодействие в диссертации рассматривается в приближении точечного магнитного диполя. Известно, что для тяжелых атомов довольно существенным оказывается эффект распределения магнитного момента по ядру (эффект Бора-Вайскопфа). Было бы полезно обсудить насколько существенным (или несущественным) этот эффект является для вычисляемых в диссертации параметров молекул.

Данное замечание является второстепенным, не касается основных положений диссертации и не снижает общее положительное впечатление о диссертационной работе.

Подводя итоги, можно заключить, что 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», а 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  
доктор физико-математических наук

главный научный сотрудник

Отделения Центр перспективных исследований

Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого

Ерохин Владимир Анатольевич



10 февраля 2020 г