

## ОТЗЫВ

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.

Исследования по оценке возможного дипольного момента электрона ( $eЭДМ$ ) являются одними из наиболее важных и трудных задач современной физики, имеющие большое значение для современной теории фундаментальных взаимодействий. Они основываются на последних достижениях атомно-молекулярной спектроскопии и развитии современных методов квантовой теории электронного строения молекул. Диссертационная работа Петрова А. Н. посвящена развитию теоретических методов, необходимых для корректной оценки  $eЭДМ$  в экспериментальных работах, а также неэмпирических расчётах электронной структуры двухатомных молекул, перспективных для поиска  $eЭДМ$ . В диссертационной работе представлены разработанные автором метод расчёта сверхтонкой структуры уровней энергий, эффективного электрического поля, действующего на электрон в молекуле, эффектов Штарка и Зеемана, в том числе в переменных полях, для двухатомных молекул, содержащих атомы тяжелых элементов с учетом неадиабатических эффектов. Разработанные методы были использованы в неэмпирических расчётах молекул  $PbO$ ,  $Hf^+$ ,  $PbF$ ,  $HfF^+$ ,  $WC$ ,  $ThO$ , изложенные в диссертации в отдельных главах. Интерес к данным молекулам связан с их перспективностью для поиска  $eЭДМ$ . Результаты расчётов этих молекул показали, что наиболее перспективными для поиска  $eЭДМ$  являются молекулы  $PbF$ ,  $HfF^+$ ,  $ThO$ .

Для молекулы  $PbF$  была накоплена большая экспериментальная информация, требовавшая теоретического объяснения. В частности, сверхтонкая структура линий, измеренная в  $^{207}PbF$  не соответствовала прежним теоретическим предсказаниям. В диссертации было показано, что это расхождение было связано с неправильными аналитическими выражениями для сверхтонкой структуры. Для интерпретации высокоточных измерения сверхтонкой структуры линий к стандартному эффективному гамильтониану сверхтонкой структуры в литературе стали добавлять новые слагаемые физический, смысл которых был не вполне ясен. В диссертации, на основе неэмпирических расчетов из “первых принципов”, было показано, что новые слагаемые соответствуют учету центробежных поправок для констант сверхтонкого взаимодействия.

Наилучшие ограничения на  $eЭДМ$ , известные в настоящее время,  $d_e < 1.1 \cdot 10^{-29}$  е·см и  $d_e < 1.3 \cdot 10^{-28}$  е·см были получены при исследовании молекул  $ThO$  и  $HfF^+$ , соответственно.

09/2-111 от 14.02.2020

Эксперименты с этими молекулами продолжаются. Для дальнейшего увеличения точности в этих экспериментах необходимо не только набрать большую статистику измерений, но и иметь возможность подавлять различные систематические эффекты. В диссертации было показано, что разработанные автором методы расчета молекул во внешних полях с учетом различных возмущений выявляют их физическую сущность и позволяют и найти способ подавлять многие из них. Например, систематический эффект, связанный с неполным контролем магнитного поля в эксперименте, подавляется тем больше, чем меньше разность между  $g$ -факторами  $\Omega$ -дублетов. Диссертантом впервые найдены уровни и рассчитаны значения внешних электрических полей, при которых разница между  $g$ -факторами зануляется, и дано объяснение этого эффекта. Для молекулы  $\text{HfF}^+$  проведённые расчёты выявили ошибку в знаке  $g$ -фактора ранее измеренного в эксперименте.

Вышеприведённый пример с  $g$ -фактором показывает, что близость свойств уровней  $\Omega$ -дублетов играет большую роль в подавлении систематических эффектов по поиску  $e$ ЭДМ. Однако, эти свойства не идентичны. Поэтому, расчет связанных с этим систематических эффектов является нетривиальной задачей для квантовой теории молекул и требует учета взаимодействий между различными уровнями молекулы.

В частности, с помощью развитых методов Петрову А.Н. удалось проанализировать ряд таких эффектов, связанных с геометрической фазой (связан с возможным существованием небольшой вращающейся компоненты лабораторного электрического поля) и неидеальной поляризацией используемых в эксперименте на  $\text{ThO}$  лазеров. В диссертации был получен важный результат. Показано, что частота Раби перехода  $H^3\Delta_1 \rightarrow C^1\Pi$  в молекуле  $\text{ThO}$ , используемая для регистрации сигнала от  $e$ ЭДМ, коррелирует с компонентой  $\Omega$ -дублета. Этот эффект, первоначально упущенный, учитывался затем коллаборацией АСМЕ при анализе систематических ошибок в эксперименте.

Для катиона  $\text{HfF}^+$  был получен один из самых важных результатов, заключающийся в расчете наибольшего в настоящий момент систематического эффекта, связанного с «загрязнением» уровней  $\Omega$ -дублетов. Ранее данный эффект был рассчитан группой нобелевского лауреата Эрик Корнелла без учета неадиабатических эффектов и был уточнен автором диссертации.

В диссертации рассчитаны значения эффективного электрического поля ( $E_{\text{eff}}$ ) в молекулах  $\text{PbO}$ ,  $\text{HI}^+$ ,  $\text{PbF}$  и  $\text{HfF}^+$ , которое составило, за исключением  $\text{HI}^+$ , несколько десятков ГВ/см. Это на несколько порядков выше величин, достижимых лабораторных условиях, что и определяет перспективность этих молекул для поиска  $e$ ЭДМ.

Результаты диссертационной работы широко представлялись на международных и Российских научных конференциях. Отметим единую методологию проведения всех



расчётов, представленных в работе. Поэтому, полученные результаты представляются согласованными, надёжными и достоверными.

Диссертация не лишена некоторых незначительных недостатков. В работе встречаются опечатки. Определения g-факторов для разных молекул, например, PbO с одной стороны и HfF<sup>+</sup> и ThO с другой не совпадают друг с другом. Возможно, в работе следовало бы принять однозначное определение для всех рассматриваемых молекул.

Вышеуказанные замечания на снижают общей положительной оценки диссертации. Диссертация Петрова Александра Николаевича «Теоретическое исследование двухатомных молекул для поиска электрического дипольного момента электрона» соответствует всем требованиям, установленным Приказом № 6821/1 от 1 сентября 2016 г. «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Петров Александр Николаевич безусловно заслуживает присуждения ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.02. — Теоретическая физика. Пункт 11 указанного Приказа диссертантом не нарушен.

Д.ф.-м.н., руководитель департамента химии  
Московского физико-технического института  
(Национальный исследовательский университет)  
141701 Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9.  
тел: +7 (495) 408-74-41, e-mail: mitin.av@mipt.ru

*Митин*

Митин Александр Васильевич

Подпись Митина А. В. заверяю

Ученый секретарь МФТИ  
к.ф.-м.н.



*Скалко*

Скалко Юрий Иванович

« 13 » февраля 2020