

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.

Разработка прецизионных неэмпирических методов расчета параметров сверхтонкой структуры молекул, содержащих тяжелые атомы, с учетом внешних магнитных и электрических полей, а также внутримолекулярных гомогенных и гетерогенных неадиабатических взаимодействий является, безусловно, наиболее перспективной тематикой современной теоретической молекулярной спектроскопии в связи с бурным развитием лазерных методов синтеза и манипулирования ансамблями молекул при сверхнизких температурах. Эффективное формирование устойчивых ультрахолодных ансамблей дало уникальную возможность для проведения беспрецедентно точных спектральных измерений не только на атомах, но и молекулах, что позволило использовать последние для поиска так называемой «новой физики», связанной, с прежде всего, с измерением собственного электрического дипольного момента электрона и вариации фундаментальных физических констант в космологическом масштабе времени.

Актуальность избранной диссертантом темы объясняется, прежде всего, тем, что сверхтонкая структура большинства электронно-возбужденных состояний молекул изучена (причем как теоретически, так экспериментально) в гораздо меньшей степени, чем ровибронная структура молекул без учета очень слабых сверхтонких взаимодействий. Основная причина - сложность теоретического расчета сверхтонкой структуры молекул, содержащих тяжелые атомы, из-за доминирования в них сильных релятивистских и неадиабатических эффектов, что не позволяет достичь точности предсказания положения сверхтонких компонент в наблюдаемом электронном спектре на уровне, необходимом для их однозначного спектрального (экспериментального) отнесения. Очевидно, что наличие внешнего электрического и магнитного поля, используемых при измерении $e\text{ЭДМ}$, существенно усложняет и без того трудную задачу описания молекулярных спектров на экспериментальном уровне точности. На решение именно этой амбициозной задачи и направлена диссертационная работа Петрова А.Н.

На мой взгляд, поставленная в диссертации задача была успешно решена, по крайней мере, для ряда молекулярных систем, что доказывается успешным применением полученных соискателем конкретных теоретических результатов для минимизации систематической погрешности уникальных спектральных измерений, направленных на установление верхнего предела величины $e\text{ЭДМ}$.

Научная новизна и оригинальность, полученных Петровым А.Н. результатов исследований, не вызывает у меня сомнений. Среди наиболее интересных результатов следует выделить:

1. Разработанный соискателем неэмпирический метод расчета сверхтонкой структуры двухатомных молекул, содержащих тяжелые атомы, с учетом эффектов Штарка и Зеемана (в том числе в переменных полях) и неадиабатических взаимодействий.
2. Константы сверхтонкой структуры, включая центробежные поправки, а также магнитные g -факторы для основного электронного состояния молекулы PbF .
3. Коэффициенты чувствительности энергии перехода между компонентами сверхтонкой структуры основного вращательного состояния молекулы PbF к

09/2-122 07 18.02.2020

возможной вариации фундаментальных физических постоянных (прежде всего, параметра тонкой структуры).

4. Оценка величины напряженности внутреннего электрического поля в молекулах PbO , Hf^+ , PbF и HfF^+ , перспективных с точки зрения экспериментального обнаружения собственного дипольного момента электрона.
5. Минимизация систематических погрешностей, связанных с геометрической фазой (присутствием вращающегося электрического поля) при проведении спектрального эксперимента на разных компонентах Омега-дублета вращательных состояний $\text{H}^3\text{Delta}1$ молекулы ThO .
6. Расчет систематического сдвига, вызванного с интерференцией $E1$ и $M1$ амплитуд лазерного излучения, используемого для приготовления рабочего состояния и считывания $e\text{ЭДМ}$ сигнала в молекуле ThO .
7. Оценка величины расщепления зеемановских компонент для Омега-дублетов молекул ThO , HfF^+ , WC , PbO во внешних электрических и магнитных полях с учетом неадиабатических эффектов.
8. Оценка влияния магнитного квадрупольного момента ядра на спектр двухатомной молекулы.

Наиболее перспективной концепцией, развиваемой диссертантом, является, на мой взгляд, идея использования эффективных псевдопотенциалов, полученных в результате неэмпирических релятивистских расчетов высокого уровня, для построения многоэлектронной волновой функции молекулы, содержащей тяжелые атомы, с последующим восстановлением электронной плотности на ядрах, необходимой для расчета параметров сверхтонкой структуры.

Практическая ценность результатов диссертации определяется их успешным использованием для минимизации систематической погрешности спектральных измерений $e\text{ЭДМ}$ для ряда перспективных для этой цели двухатомных молекул, расчетов коэффициентов чувствительности энергий вращательных переходов молекулы PbF к возможной вариации фундаментальных физических постоянных, а также созданием универсальных вычислительных методик и пакетов прикладных программ для оценки сверхтонкой структуры и неадиабатических электронных матричных элементов в молекулах характеризующихся сильным релятивистским эффектом.

Достоверность и научная значимость полученных в диссертации результатов подтверждается достижением хорошего согласия между рассчитанным и экспериментальными структурными данными (в частности g -факторами и параметрами сверхтонкой структуры), публикациями в высокорейтинговых российских и международных изданиях, в том числе в журналах из перечня ВАК Российской Федерации, широкой апробацией на российских и международных конференциях. Количество ссылок на работы автора в SCOPUS превышает 1350, индекс Хирша – 22.

В процессе ознакомления с работой у меня возникли следующие замечания:

- (1) В работе, при оценке параметров сверхтонкой структуры, а также электрических и магнитных свойств ряда исследуемых двухатомных молекул, были учтены взаимодействия между близко лежащими электронными состояниями. Однако «технических» деталей выполненных неадиабатических расчетов (таких, например, как проверка сходимости по колебательному базисному набору и способ диагонализации конечной матрицы) я в диссертации не обнаружил. Кроме того, не представлена общая структура электронных термов исследуемых молекул, что значительно затрудняет проверку значимости неадиабатических эффектов.

- (2) В диссертации отсутствует детальное описание программ используемых автором для неэмпирического расчета электронной структуры (включая даже те оригинальные, на которые получено официальное свидетельство о государственной регистрации).
- (3) Во введении имеется ряд неудачно сформулированных предложений искажающих, на мой взгляд, реальный смысл выполненной работы. Например, раздел "Цели и задачи диссертационной работы" начинается с фразы: "Целью диссертации является разработка комплекса подходов и расчет систематических эффектов для наиболее актуальных молекулярных систем по поиску еЭДМ и других эффектов, ...". По-видимому, имелось в виду: "Целью диссертации является разработка неэмпирических методов учета систематических погрешностей, возникающих в спектральных экспериментах по поиску еЭДМ и других эффектов, ..." В разделе "Научная новизна" - "Разработан метод расчета сверхтонкой структуры эффектов Штарка и Зеемана (в том числе в переменных полях) двухатомных молекул, содержащих тяжелые атомы". По-видимому, следует читать: "Разработан метод неэмпирического расчета сверхтонкой структуры двухатомных молекул, содержащих тяжелые атомы, который позволяет учесть влияние внешнего электрического и магнитного поля (в том числе переменных полей)". В разделе "Теоретическая и практическая значимость" - "Помимо развития метода расчета систематических эффектов в диссертацию включены конкретные расчеты молекул перспективных для поиска еЭДМ". По-видимому, это следует понимать как "В диссертации содержатся результаты расчетов электронной и сверхтонкой структуры (с учетом внешних полей) ряда двухатомных молекул, которые позволяют минимизировать влияние систематических погрешностей измерений, возникающих при экспериментальном поиске еЭДМ".
- (4) В списке цитируемой литературы есть повторы (например, ссылки 139 и 149). В то же время, отсутствует ссылка на пионерскую работу А.В.Зайцевского, посвященную неэмпирическим оценкам электронных матричных элементов электронно-вращательного и магнитного взаимодействия в димерах иода и теллура (*Zaitsevskii A., Ferber R., Cimraglia R. Ab initio quasirelativistic calculations on angular momentum and magnetic couplings of molecular electronic states // Chem.Phys.Lett. 2002.V. 356, P. 277–283*).

Приведенные замечания носят, в целом, дискуссионный и рекомендательный характер и, безусловно, не снижают общего положительного впечатления о диссертационной работе соискателя.

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
д.ф.-м.н., заведующий кафедрой
лазерной химии химического факультета
МГУ имени М.В. Ломоносова
17 февраля 2020 года

