

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.

Диссертация Петрова А. Н. посвящена разработке методов расчёта сверхтонкой структуры энергетических уровней, эффективного электрического поля, действующего на электрон, эффектов Штарка и Зеемана и соответствующим вычислениям для ряда двухатомных молекул, которые представляются наиболее перспективными в поисках электрического дипольного момента электрона (еЭДМ).

Диссертация состоит из введения, 8 глав, заключения, списка сокращений, одного приложения, списков таблиц и иллюстраций, а также списка литературы. Она содержит 219 страниц, включая 23 таблицы и 27 рисунков; список литературы включает 152 наименования. Первая глава посвящена описанию методов исследования. Здесь можно отметить разработку метода, который позволяет получить требуемые свойства молекулы путём диагонализации гамильтониана в базисе электронно-колебательно-вращательных функций, а также развитие процедуры невариационного одноцентрового восстановления в области корреляционных методов. Вторая глава посвящена теории еЭДМ в двухатомной молекуле. Главы 3 — 8 содержат описание и результаты расчётов для различных двухатомных молекул. В заключении кратко сформулированы результаты диссертации и перспективы дальнейших исследований.

Актуальность темы диссертации не вызывает сомнений и обусловлена тем, что поиск еЭДМ имеет большое значение для верификации современной физической картины мира, так как является прямым тестом существования новой физики за рамками стандартной модели. Одним из наиболее перспективных объектов для поиска еЭДМ являются полярные двухатомные молекулы, содержащие атомы тяжёлых элементов. Проведение экспериментов с такими молекулами в настоящее время если и возможно, то существенно затруднено без поддержки со стороны теории. С помощью прецизионных расчётов молекул можно понять и проанализировать множество систематических эффектов в эксперименте, найти наиболее оптимальный уровень энергии молекулы и оптимальные внешние поля для проведения эксперимента; расчёт эффективного электрического поля на электроне непосредственно используется для пересчёта наблюдаемых в эксперименте сдвигов и расщеплений молекулярных уровней к величине еЭДМ. Отметим, что анализ систематики имеет принципиальное значение, так как именно она, в конечном счёте, определяет предел точности измерения еЭДМ в данной молекуле.

09/2-104 от 10.02.2020

Так как энергетические сдвиги, вызванные $e\text{ЭДМ}$, очень малы, то для анализа систематики необходимо учитывать различные возмущения, связанные со взаимодействиями между различными электронными (неадиабатические эффекты) и вращательными состояниями. Учёт таких возмущений включён в предложенный в диссертации метод расчёта и позволил не только провести высокопрецизионные расчёты, но и предсказать новые эффекты.

Например, в эксперименте на катионе HfF^+ наибольшая систематическая ошибка связана с тем, что при заселении одного (желаемого) уровня Ω -дублета, как предполагается, возможно заселение и другого, что при данной схеме эксперимента приводит к ложному сигналу $e\text{ЭДМ}$. Анализ данного эффекта сводится к расчётам квазиэнергии катиона HfF^+ во внешних вращающихся электрическом и магнитном полях. Данные расчёты, выполненные Петровым А. Н., в отличие от выполненных ранее, учитывают неадиабатические взаимодействия. Как оказалось, оценённый ранее процент загрязнения и связанный с ним систематический эффект находится на уровне учёта взаимодействий с другими электронными состояниями. Проведённые в диссертации расчёты, таким образом, показывают, что данная систематическая ошибка может быть существенно ниже заявленной ранее и подтверждают перспективность HfF^+ для поиска $e\text{ЭДМ}$.

В эксперименте на молекуле ThO приготовление начального состояния молекулы и регистрация сигнала $e\text{ЭДМ}$ производится с помощью линейно поляризованных лазеров. Как показано ранее, неидеальность поляризации вместе с не полностью контролируемой мощностью лазера может приводить к систематическим эффектам. В диссертации Петрова А. Н. впервые показано, что внутренние возмущения в молекуле могут приводить к тем же систематическим эффектам, что и неполный контроль мощности используемых лазеров. Данный эффект в дальнейшем использовался коллаборацией АСМЕ при анализе систематики в ThO . Отметим, что на данной молекуле получено лучшее на данный момент ограничение $d_e < 1.1 \cdot 10^{-29} \text{ e} \cdot \text{см}$.

Большой объем диссертации посвящён расчёту g -факторов молекул, перспективных для поиска $e\text{ЭДМ}$, что важно для анализа систематических эффектов, связанных с неполным контролем магнитного поля. С использованием развитых методов удалось достичь согласия с экспериментом для разности g -факторов Ω -дублетов молекулы ThO и PbO . Для молекул ThO , PbO , WC найдены уровни и значения внешнего электрического поля, для которых данная разность становится равной нулю, дано качественное объяснение эффекта. При данных условиях систематические эффекты, связанные с неучтенным магнитным полем, существенно подавляются. Методы расчёта спектров двухатомных молекул во внешних полях реализованы в программном пакете,

который позволяет решить и обратную задачу о нахождении g -факторов молекулы по известным из эксперимента расщеплениям Зеемана. Для молекулы PbF , таким образом, удалось получить экспериментальные значения g -факторов, определённых ранее с ошибкой.

Важным результатом диссертационной работы Петрова А. Н. является развитие метода невариационного одноцентрового восстановления, предложенного ранее научным консультантом Титовым А. В., в области корреляционных расчётов. С применением этого метода на основе *ab initio* вычислений впервые получены надёжные данные для эффективного электрического поля (E_{eff}) в молекулах PbO , Hf^+ , PbF и HfF^+ . Перспективность молекулы напрямую связана с величиной E_{eff} , кроме того, эта величина не может быть получена в эксперименте, с чем и связана большая актуальность данных расчётов. В силу малости полученной величины для Hf^+ , в дальнейшем экспериментальные усилия группы Эрика Корнелла были сосредоточены на катионе HfF^+ , на котором уже получено ограничение $d_e < 1.3 \cdot 10^{-28}$ е·см.

Сочетание тематики исследования, формулировки его целей, используемых методов решения задач, области приложения результатов подтверждает, что данная диссертация соответствует специальности 01.04.02 – теоретическая физика, по которой она представлена к защите. Достоверность результатов и научная обоснованность выводов, представленных в диссертации, подтверждается применением апробированных теоретических подходов, а также сравнением полученных результатов с данными эксперимента в тех случаях, где это возможно. Ряд численных расчётов (корреляция частоты Раби с используемой компонентой Ω -дублетов молекулы ThO , влияние магнитного квадрупольного момента ядра на спектр молекулы) согласуются с выведенными в работе аналитическими формулами. Содержание диссертационной работы нашло отражение в 30 статьях, опубликованных в рецензируемых журналах, индексируемых в базах данных Web of Science и Scopus. Результаты работы неоднократно докладывались на международных и российских конференциях, на научных семинарах кафедры квантовой механики СПбГУ и отделения перспективных разработок ПИЯФ. Оформление диссертационной работы в целом не вызывает нареканий. Работа хорошо структурирована, достаточно полно проиллюстрирована, материал работы изложен ясно и последовательно. Имеются отдельные опечатки, не влияющие на качество работы в целом.

По существу диссертационной работы Петрова А. Н. имеются следующие замечания.

1. Название диссертации не полностью отражает её содержание. Хотя электрический дипольный момент электрона, возможно, является самым важным и

наиболее обсуждаемым проявлением P,T-нечетных взаимодействий, но в диссертации обсуждаются также P,T-нечетные нейтральные токи и магнитные квадрупольные моменты ядер.

2. В разных главах для одних и тех же величин могут использоваться разные обозначения. Например, в главе, посвящённой молекуле ThO, для обозначения компонент Ω -дублетов вводится квантовое число N. В тоже время, в главе, посвящённой катиону HfF^+ , для этого используется квантовое число D.

3. Для учёта взаимодействия с вращающимися электрическим и магнитным полями используется два подхода: переход во вращающуюся систему координат и замена вращающихся полей соответствующим квантованным электромагнитным полем. Как справедливо утверждается в диссертации, второй подход, в отличие от первого, применим также и при одновременном присутствии вращающихся и статических полей произвольной направленности. Было бы полезно рассмотреть такие примеры, но в диссертации это не сделано. Для тех случаев, которые представлены в работе, применимы оба подхода.

Вышеуказанные замечания не снижают общего положительного впечатления от диссертации. Полученные результаты находятся на высшем мировом уровне в данной области исследований и представляют большой практический и теоретический интерес. 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

доктор физико-математических наук,

доцент, профессор СПбГУ

10.02.2020

Тельнов Д. А.