

Название работы: Теоретическое исследование молекулярных систем для поиска Новой физики и проверки теорий фундаментальных взаимодействий

ФИО: Скрипников Леонид Владимирович

учёная степень: к.ф.-м.н.

должность: доцент

аннотация:

Прорывные достижения в методах манипулирования малоатомными молекулами в последнее десятилетие привели к тому, что наиболее точные эксперименты по измерению такого фундаментального свойства электрона, как его электрический дипольный момент ( $e$ ЭДМ) выполняются именно с использованием тяжёлых молекул. Эти измерения являются одним из ключевых тестов фундаментальных моделей элементарных частиц: стандартной модели (СМ) и различных её расширений. Величина  $e$ ЭДМ может пролить свет на наблюдаемую асимметрию Вселенной по количествам материи и антиматерии, которая не описывается в рамках СМ. Отличная от нуля величина  $e$ ЭДМ может возникнуть только в случае одновременного нарушения двух симметрий фундаментальных взаимодействий – симметрии относительно обращения времени (Т) и относительно пространственной инверсии (Р). Популярные расширения СМ предсказывают, что величина  $e$ ЭДМ должна на 10 порядков превосходить предсказание СМ. Поэтому если  $e$ ЭДМ будет обнаружен на уровне, существенно превышающим оценку СМ, то это будет сильным указанием на наличие *Новой физики* за пределами СМ. Особенностью экспериментов по измерению  $e$ ЭДМ на молекулах является то, что в них непосредственно устанавливается ограничение на энергию взаимодействия  $e$ ЭДМ с эффективным электрическим полем внутри молекулы, которое нельзя измерить отдельно, т.е. для интерпретации эксперимента в терминах  $e$ ЭДМ необходимо привлечь наиболее точные теоретические предсказания эффективного поля. Для проведения экспериментов важно знать и другие параметры используемой системы –  $g$ -факторы, вероятности переходов и др. В представленном цикле работ развиваются и применяются теоретические подходы для предсказания всех этих характеристик. Помимо  $e$ ЭДМ рассмотрены и другие эффекты нарушения Т,Р- и Р- симметрий.

Одним из важнейших полученных результатов цикла работ является величина эффективного электрического поля, действующего на  $e$ ЭДМ в молекуле монооксида тория в первом возбуждённом электронном состоянии  $\text{H}^3\Delta_1$ , вычисленная в работах [1,7]. О признании работы научным сообществом свидетельствует тот факт, что эта величина эффективного поля была использована коллаборацией АСМЕ (состоящей из экспериментаторов из Йельского и Гарвардского университетов) для интерпретации их эксперимента в терминах ограничения на  $e$ ЭДМ в работе [*Nature* **562**, 355-360 (2018)]. Полученное ограничение является наиболее жёстким на сегодняшний день и устанавливает сильные ограничения на параметры моделей Новой физики.

Развитие теоретических подходов для релятивистского описания электронной структуры молекул позволило решить так называемую загадку сверхтонкой структуры, которая заключалась в сильном расхождении экспериментальных данных со сверхтонкому расщеплению в ионах висмута, полученных немецкими экспериментаторами [*Nature Communications* **8**, 15484 (2017)] от предсказаний, выполненных в рамках квантовой электродинамики теоретиками из СПбГУ. Как оказалось, причиной расхождения являлось неправильное значение магнитного момента ядра висмута, которое приводится в справочниках с очень малой погрешностью. Для установления нового значения в настоящей работе [4] была впервые адаптирована релятивистская теория связанных кластеров к расчёту констант экранирования в молекулах, содержащих тяжёлый атом и применена к системе  $\text{BiF}_6^-$ . Эта работа, опубликованная в журнале *Phys. Rev. Lett.*, получила резонанс в научном сообществе и СМИ, о её результатах написало в том числе авторитетное издание *Physics World* [<https://physicsworld.com/a/has-the-hyperfine-puzzle-been-solved/>].

На пути решения этих задач и совместно с ними были выполнены работы, в которых последовательно развивались подходы к теоретическому описанию электронной структуры тяжёлых молекул [1,2,4-18]. В частности, были сделаны теоретические предсказания эффективного электрического поля и других характеристик катионов  $\text{HfF}^+$  [2,5,9,12,13] и  $\text{ThF}^+$  [6]. На этих катионах выполняется эксперимент группы из США под руководством Э. Корнелла. Было также показано, что одной из перспективных систем для поиска Т,Р-нечётных эффектов является

молекула TaN [15]. В работе [13] был рассмотрен эффект, с помощью измерения которого можно судить о квадрупольном распределении нейтронов в ядре. В работе [10] рассмотрена возможность искать P-нечётные эффекты с использованием перехода в молекуле гидроида ртути.

В работе [3] предложен новый подход к вычислению таких свойств, как эффективное электрическое поле, сверхтонкие константы и др. в кристаллах с явным учётом их периодической структуры. Этот подход обобщает двухшаговый метод, развитый ранее для двухатомных молекул на случай трёхмерных кристаллов, и был применён к расчёту кристаллического коэффициента взаимодействия шиффовского момента ядра свинца с электронами в кристалле титаниста свинца,  $\text{PbTiO}_3$ . Это взаимодействие также является проявлением эффектов нарушения симметрий фундаментальных взаимодействий относительно обращения времени и инверсии пространства. Выполненный расчёт остаётся единственным в мире расчётом такого взаимодействия в кристалле с явным учётом кристаллической симметрии. Развитые и предложенные методы могут быть использованы для прецизионного расчёта различных свойств как малых молекул, содержащих атомы актинидов так и использованы для теоретического расчёта большого спектра свойств различных кристаллов и материалов с периодической трёхмерной структурой.

Важность описанных работ была отмечена международным союзом по чистой и прикладной химии, IUPAC.

1. L.V. Skripnikov, "Combined 4-component and relativistic pseudopotential study of ThO for the electron electric dipole moment search", *J. Chem. Phys.* **145**(21) 214301 (2016). [Q1]
2. L.V. Skripnikov, "Communication: Theoretical study of  $\text{HfF}^+$  cation to search for the T,P-odd interactions", *J. Chem. Phys.* **147**, 021101 (2017) [Q1]
3. L.V. Skripnikov, A.V. Titov, "LCAO-based theoretical study of  $\text{PbTiO}_3$  crystal to search for parity and time reversal violating interaction in solids", *J. Chem. Phys.*, **145**, 054115 (2016). [Q1]
4. L.V. Skripnikov, S. Schmidt, J. Ullmann, C. Geppert, F. Kraus, B. Kresse, W. Nörtershäuser, A.F. Privalov, B. Scheibe, V.M. Shabaev, M. Vogel, A.V. Volotka "New nuclear magnetic moment of  $^{209}\text{Bi}$ : Resolving the bismuth hyperfine puzzle", *Phys. Rev. Lett.*, **120**, 093001 (2018). [Q1]
5. L.V. Skripnikov, A. N. Petrov, A. V. Titov, V. V. Flambaum "HfF<sup>+</sup> as a candidate to search for the nuclear weak quadrupole moment", *Phys. Rev. A* **99**, 012517 (2019). [Q1]
6. L.V. Skripnikov, A.V. Titov, "Theoretical study of  $\text{ThF}^+$  in the search for T,P-violation effects: Effective state of a Th atom in  $\text{ThF}^+$  and  $\text{ThO}$  compounds", *Phys. Rev. A* **91**, 042504 (2015). [Q1]
7. L.V. Skripnikov, A.V. Titov, "Theoretical study of thorium monoxide for the electron electric dipole moment search: Electronic properties of  $\text{H}^3\Delta_1$  in  $\text{ThO}$ ", *J. Chem. Phys.* **142**, 024301 (2015).
8. W. Nörtershäuser, J. Ullmann, L.V. Skripnikov, et al, "The hyperfine puzzle of strong-field bound-state QED", *Hyperfine Interact*, **240**, 51 (2019)
9. A.N. Petrov, L.V. Skripnikov, A.V. Titov, V.V. Flambaum "Evaluation of CP violation in  $\text{HfF}^+$ ", *Phys. Rev. A* **98**, 042502 (2018) [Q1]
10. A.J. Geddes, L.V. Skripnikov, A. Borschevsky, J.C. Berengut, V.V. Flambaum, T.P. Rakitzis, "Enhanced nuclear-spin-dependent parity-violation effects using the  $^{199}\text{HgH}$  molecule", *Phys. Rev. A* **98**, 022508 (2018). [Q1]
11. S. Schmidt, J. Billowes, M.L. Bissell, K. Blaum, R.F. Garcia Ruiz, H. Heylen, S. Malbrunot-Ettenauer, G. Neyens, W. Nörtershäuser, G. Plunien, S. Sailer, V.M. Shabaev, L.V. Skripnikov, I.I. Tupitsyn, A.V. Volotka, X.F. Yange "The nuclear magnetic moment of  $^{208}\text{Bi}$  and its relevance for a test of bound-state strong-field QED", *Phys. Lett. B* 779(10), 324-330 (2018). [Q1]
12. A.N. Petrov, L.V. Skripnikov, A.V. Titov, "Zeeman interaction in  $^3\Delta_1$  state of  $\text{HfF}^+$  to search for the electron electric-dipole-moment", *Phys. Rev. A*, **96**, 022508 (2017) [Q1]
13. L.V. Skripnikov, A.V. Titov, V.V. Flambaum, "Enhanced effect of CP-violating nuclear magnetic quadrupole moment in a  $\text{HfF}^+$  molecule", *Phys. Rev. A* **95**, 022512 (2017). [Q1]
14. L.V. Skripnikov, D.E. Maison, N.S. Mosyagin, "Scalar-pseudoscalar interaction in the francium atom", *Phys. Rev. A* **95**, 022507 (2017). [Q1]

15. N.S. Mosyagin, A.V. Zaitsevskii, L.V. Skripnikov, A.V. Titov, "Generalized relativistic effective core potentials for actinides", *Int. J. Quant. Chem.*, 116(4), 301-315, DOI: 10.1002/qua.24978 (2015).
16. L.V. Skripnikov, A.N. Petrov, A.V. Titov, R.J. Mawhorter, A.L. Baum, T.J. Sears, J.-U. Grabow, "Further investigation of g factors for the lead monofluoride ground state", *Phys. Rev. A* **92**, 032508 (2015). [Q1]
17. L.V. Skripnikov, A.N. Petrov, N.S. Mosyagin, A.V. Titov and V.V. Flambaum, "TaN molecule as a candidate for the search for a T,P-violating nuclear magnetic quadrupole moment", *Phys. Rev. A* **92**, 012521 (2015). [Q1]
18. A.V. Zaitsevskii, L.V. Skripnikov, A.V. Kudrin, A.V. Oleinichenko, E. Eliav, A.V. Stolyarov "Electronic Transition Dipole Moments in Relativistic Coupled-Cluster Theory: the Finite-Field Method" *Optics and spectroscopy* 124(4), 451-456 (2018)

Title: Theoretical study of molecular systems to search for New Physics and verification of theories of fundamental interactions

Name: Leonid V. Skripnikov

Academic degree: Ph.D.

position: associate professor

annotation:

Breakthrough advances in the methods of manipulating small molecules in the last decade have led to the fact that the most accurate experiments to measure such a fundamental property of an electron as its electric dipole moment ( $e$ EDM) are performed with the use of heavy molecules. These measurements are one of the key tests of fundamental models of elementary particles: the Standard Model (SM) and its various extensions. The  $e$ EDM value can shed light on the observed asymmetry of the Universe in terms of the amounts of matter and antimatter, which is not described in the framework of the Standard Model. A nonzero value of  $e$ EDM can arise only in the case of simultaneous violation of two symmetries of fundamental interactions - symmetry with respect to time reversal (T) and with respect to spatial inversion (P). Popular extensions of the SM predict that the value of  $e$ EDM should be 10 orders of magnitude higher than the prediction of the SM. Therefore, if  $e$ EDM is found at a level significantly higher than the SM estimate, then this will be a strong indication of the presence of New Physics outside the SM. A feature of experiments on measuring  $e$ EDM on molecules is that they directly impose a constraint on the energy of interaction of  $e$ EDM with the effective electric field inside the molecule, which cannot be measured separately, i.e. to interpret the experiment in terms of the  $e$ EDM, it is necessary to use the most accurate theoretical predictions of the effective field. To carry out experiments, it is important to know other parameters of the system used - g-factors, transition probabilities, etc. In the presented cycle of works, theoretical approaches are developed and applied to predict all these characteristics. In addition to  $e$ EDM, other effects of violating the T, P and P symmetries are considered.

One of the most important results obtained in the cycle of papers is the value of the effective electric field acting on the  $e$ EDM in the thorium monoxide molecule in the first excited electronic state  $H^3\Delta_1$ , calculated in [1,7]. The recognition of the work by the scientific community is confirmed by the fact that this effective field value was used by the *ACME* collaboration (consisting of experimenters from Yale and Harvard Universities) to interpret their experiment in terms of the limitation on the  $e$ EDM in [*Nature* 562, 355-360 (2018)]. The resulting constraint is the most stringent to date and sets strong constraints on the parameters of the New Physics models.

The development of theoretical approaches for the relativistic description of the electronic structure of molecules made it possible to solve the so-called hyperfine structure puzzle, which consisted in a strong discrepancy between the experimental data with hyperfine splitting in bismuth ions obtained by German experimenters [*Nature Communications* 8, 15484 (2017)] from the predictions made within the framework of quantum electrodynamics by theorists from St. Petersburg State University. As it turned out, the reason for the discrepancy was the incorrect value of the

magnetic moment of the bismuth nucleus, which is given in reference books with a very small error. To establish a new value, in this work [4], the relativistic theory of coupled clusters was first adapted to the calculation of screening constants in molecules containing a heavy atom and applied to the BiF<sub>6</sub><sup>-</sup> system. This work, published in the journal Phys. Rev. Lett., received a resonance in the scientific community and the media, and the authoritative edition of Physics World wrote about these results [<https://physicsworld.com/a/has-the-hyperfine-puzzle-been-solved/>].

On the way to solving these problems and together with them, works were carried out in which approaches to the theoretical description of the electronic structure of heavy molecules were consistently developed [1,2,4-18]. In particular, theoretical predictions were made for the effective electric field and other characteristics of HfF<sup>+</sup> [2,5,9,12,13] and ThF<sup>+</sup> [6] cations. An experiment by a group from the USA led by E. Cornell is being carried out on these cations. It was also shown that one of the promising systems for searching for T,P-odd effects is the TaN molecule [15]. In [13], an effect was considered, by measuring which one can explore the quadrupole distribution of neutrons in the nucleus. The paper [10] considered the possibility of searching for P-violating effects using a transition in a mercury hydride molecule.

In [3], a new approach to the calculation of such properties as the effective electric field, hyperfine constants, etc. in crystals with an explicit account of their periodic structure is proposed. This approach generalizes the two-step method previously developed for diatomic molecules to the case of three-dimensional crystals, and was applied to the calculation of the crystal coefficient of the interaction of the Schiff moment of the lead nucleus with electrons in the lead titanate crystal, PbTiO<sub>3</sub>. This interaction is also a manifestation of the effects of violating the symmetries of fundamental interactions with respect to time reversal and space inversion. The calculation performed remains the only one in the world to calculate such an interaction in a crystal with an explicit allowance for the crystal symmetry. The developed and proposed methods can be used for precision calculation of various properties of both small molecules containing actinide atoms and used for the theoretical calculation of a wide range of properties of various crystals and materials with a periodic three-dimensional structure.

The importance of the work described has been noted by the International Union of Pure and Applied Chemistry, IUPAC.