

ОТЗЫВ

председателя 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 А.Н. Петрова представляет собой весьма важное и чрезвычайно актуальное исследование. Поиск сил (взаимодействий) в природе, инвариантных относительно обращения времени, представляет собой одну из наиболее фундаментальных неразрешенных проблем в физике и вообще в науке. 70 лет тому назад было замечено (Purcell and Ramsey, 1950), что прямым доказательством существования таких взаимодействий было бы существование электрического дипольного момента (ЭДМ) у любых частиц, не являющихся истинно нейтральными (как например, фотоны). Поиск ЭДМ различных частиц ведется с тех пор пока безуспешно. Около 40 лет тому назад было предсказано, что эффект ЭДМ электрона (еЭДМ) должен очень заметно (до миллиарда раз) усиливаться в гетероядерных двухатомных молекулах, содержащих один тяжелый атом. Наиболее продвинутые экспериментальные результаты (верхняя граница еЭДМ) принадлежат в настоящее время коллаборации АСМЕ (США). Эта верхняя граница, полученная в экспериментах АСМЕ на молекуле ThO, на 9 порядков превышает максимальное значение еЭДМ, предсказываемое Стандартной Моделью (СМ). Все же результаты АСМЕ исключительно важны, поскольку имеется целый ряд расширений СМ, предсказывающих гораздо большие значения еЭДМ, и некоторые из таких расширений уже закрыты благодаря результатам АСМЕ. Извлечение величины еЭДМ из экспериментальных данных по двухатомным молекулам является непрямой: оно требует теоретического расчета коэффициента усиления. Такой расчет является весьма непростой задачей и требует использования наиболее мощных компьютерных программ, разработанных в последние десятилетия в квантовой химии. Мировым лидером в применении этих методов к расчету коэффициентов усиления еЭДМ в тяжелых двухатомных молекулах является теоретическая группа из Петербургского Института Ядерной Физики (ПИЯФ), а А.Н. Петров является одним из лидеров этой группы. Этой группе и персонально А.Н. Петрову принадлежит большинство современных теоретических исследований тяжелых двухатомных молекул в связи с их использованием для поиска еЭДМ.

Диссертация состоит из 8 глав и Заключение и содержит большое число таблиц, графиков и обширный список цитированной литературы. Первые главы носят вводный характер. В первой главе описываются вычислительные методы, применяемые далее в диссертации. Особенностью эффекта усиления еЭДМ в тяжелых двухатомных полярных молекулах является то, что внешние электроны, определяющие эффект, оказываются в сильном внутримолекулярном электрическом поле, когда вся молекула в целом находится в относительно слабом внешнем электрическом поле. Это требует рассмотрения полной электронной системы молекулы, включая электроны атомных остовов. Для решения этой проблемы в работах группы ПИЯФ был развит специальный двухшаговый подход. В рамках этого подхода остовные электроны описываются с помощью нерелятивистских псевдопотенциалов, а затем эти псевдопотенциалы используются в полностью релятивистском расчете системы валентных электронов. Такой подход в сочетании с наиболее мощными современными компьютерными молекулярными кодами применяется А.Н. Петровым для расчета необходимых характеристик.

Хотя вторая глава диссертации отчасти тоже носит вводный характер, она содержит весьма важный и подробный анализ тех изменений, которые происходят в структуре энергетических уровней молекулы благодаря присутствию Р, Т-нечетных взаимодействий. Этот анализ, который невозможно найти в каких-либо других книгах или обзорах на данную тему,

09/2 - 113 от 14.02.2020

помогает понять, какие систематические ошибки могут возникать в современных экспериментах по поиску еЭДМ на двухатомных молекулах. Одна из таких систематических ошибок оставалась незамеченной в экспериментах АСМЕ до тех пор, пока автор диссертации, А.Н. Петров, не указал на нее.

Содержание глав с 3 по 8 составляют прецизионные расчеты коэффициентов усиления еЭДМ в различных двухатомных молекулах, базирующиеся на расчетных методах, описанных в главе 1, а также анализ возможных систематических ошибок в экспериментах на этих молекулах базирующийся на результатах главы 2. Рассматриваются следующие молекулы и молекулярные ионы: PbO , Hg^+ , PbF , WC , ThO , HfF^+ . С некоторыми из этих молекул уже проводятся эксперименты, другие являются кандидатами для будущих экспериментов. Расчеты коэффициентов усиления еЭДМ в молекулах ThO , HfF^+ , сделанные А.Н. Петровым, позволили соответствующим экспериментальным группам представить результаты своих измерений еЭДМ на этих молекулах.

В целом работы А.Н. Петрова и их результаты, представленные в диссертации, входят в число наивысших достижений в изучении фундаментальных симметрий в физике в настоящее время. 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.

Председатель диссертационного совета

Доктор физико-математических наук, профессор,
профессор кафедры квантовой механики
физического факультета Санкт-Петербургского
государственного университета

(Лабзовский Леонтий Нахимович)

14 февраля 2020 г