

## ОТЗЫВ

председателя диссертационного совета Андреева Олега Юрьевича на диссертацию Кайгородова Михаила Юрьевича на тему: «Расчеты электронной структуры сверхтяжелых элементов и многозарядных ионов», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика.

Диссертация Кайгородова М.Ю. посвящена изучению свойств сверхтяжелых элементов и многозарядных ионов. В работе представлены расчёты различных поправок к энергии электронных оболочек сверхтяжелых атомов и ионов. Расчёты выполнены с использованием самых современных, наиболее точных методов. В настоящее время численное моделирование многоэлектронных систем очень востребовано, и используется как для подготовки современных экспериментов, так и для анализа и интерпретации экспериментальных данных. Для многих наиболее значимых экспериментов теоретические расчёты играют ключевую роль. Высокая точность представленных расчётов и исключительная сложность рассматриваемых систем определяют высокую актуальность диссертации Кайгородова М.Ю..

Диссертация состоит из введения, трёх глав и заключения.

В введении чётко сформулированы актуальность работы, современное состояние области исследования, сформулированы положения, выносимые на защиту.

В первой главе диссертации обсуждается модель в рамках которой рассматривается изучаемая система (тяжелые атомы и ионы) и существующие теоретические подходы для расчётов таких систем. В частности, в главе описана применяемая теория возмущений, основанная на методе конфигурационного взаимодействия в базисе Дирака-Фока-Штурма. Этот метод реализован в пакете программ И.И Тупицына (СПбГУ). В главе описан ещё один, альтернативный, метод расчётов электронной структуры – релятивистский метод связанных кластеров. В работе этот метод используется в рамках пакета программ ЕХР-Т, развиваемый Олейниченко А.В. (ПИЯФ). Также обсуждаются методы учёта радиационных поправок и поправок на отдачу ядра. Радиационные поправки учитывались с помощью модельного оператора. Поправки на отдачу ядра учитывались с помощью релятивистского оператора ядерной отдачи.

Во второй главе представлены расчёты электронной структуры тяжелых атомов. Представлены расчёты различных поправок к энергии для атома оганесона ( $Z=118$ ). Обсуждаются детали применения методов связанных кластеров и метода конфигурационного взаимодействия. Основной целью этого исследования был точный расчёт энергии сродства электрона к атому оганесона. Интерес к расчёту этой величины объясняется тем, что формально, согласно периодической системе химических элементов Менделеева Д.И., оганесон является эка-радоном, то есть благородным газом.

Благородные газы не образуют отрицательные ионы, так как для них энергия сродства электрона отрицательна. Однако в 1996 году E. Eliav показал, что для оганесона энергия сродства электрона положительна и, тем самым, он может образовывать отрицательный ион. С тех пор вышло несколько работ подтверждающих этот вывод и представивших соответствующие расчёты. В работе Кайгородова М.Ю. проведён наиболее точный расчёт указанной величины в настоящее время. Надо отметить, что такая система как атом оганесона очень сложна для точного теоретического описания из-за большого количества электронов и необходимости учитывать релятивистские и квантовоэлектродинамические поправки. Далее в главе представлены результаты расчётов потенциалов ионизации и энергии сродства электронов для атомов ренгения ( $Z=111$ ), коперниция ( $Z=112$ ), нихония ( $Z=113$ ) и флеровия ( $Z=114$ ). Достаточно подробно представлены детали расчётов, обсуждаются различные поправки.

Во второй главе представлены расчёты электронной структуры бериллиеподобных многозарядных ионов. Подробно изучаются различные поправки к энергии основного и возбуждённого состояния на брейтовское взаимодействие. В частности, выделены поправки первого и второго порядка. Результаты расчётов, приведённые в работе Кайгородова М.Ю. являются наиболее точными в настоящее время.

В диссертации Кайгородова М.Ю. представлено теоретическое исследование электронной структуры тяжёлых атомов и многозарядных ионов. Исследование проводилось на основе различных лучших современных методов численного моделирования многоэлектронных систем. В диссертации Кайгородова М.Ю. представлены результаты расчётов энергий, потенциалов ионизации и энергии сродства электрона, которые в настоящее время определяют мировой уровень в этой области. Эти результаты имеют огромное значение для развития моделирования атомных систем и его приложения к решению актуальных задач современной физики, в частности, поиска новой физики.

Диссертация написана очень хорошо. Разработанные подходы представлены достаточно подробно. Имеются следующие вопросы:

1. Какой вклад в рассчитанные энергии вносит погрешность определения радиуса ядра и выбор модели распределения зарядовой плотности в ядре?
2. Может ли оказаться, что энергия сродства электрона будет отрицательна для соседних к оганесону элементов ( $Z=117, 119$ ).
3. Какое время и какие компьютерные ресурсы требуются для проведения расчётов с методом связанных кластеров и методом конфигурационного взаимодействия?

Диссертация Кайгородова Михаила Юрьевича на тему: «Расчеты электронной структуры сверхтяжелых элементов и многозарядных ионов» соответствует основным требованиям, установленным Приказом от 19.11.2021 № 11181/1 «О порядке присуждения ученых степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Кайгородов

Михаил Юрьевич заслуживает присуждения ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика. Пункты 9 и 11 указанного Порядка диссертантом не нарушены.

Председатель диссертационного совета



Доктор физико-математических наук, без учёного звания,  
профессор, кафедра квантовой механики  
Санкт-Петербургского государственного университета

Андреев О.Ю.

18 октября 2022 г.



18.10.2022