

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Ерохина Владимира Анатольевича 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.

Диссертационная работа М. Ю. Кайгородова посвящена развитию методов релятивистских расчетов электронной структуры многоэлектронных атомов. Основной акцент сделан на теоретическом описании структуры сверхтяжелых трансурановых элементов, спектроскопические исследования которых являются актуальной и быстро развивающейся областью современной физики. Прецизионные расчеты электронной структуры сверхтяжелых элементов являются весьма сложными и трудоемкими из-за большого числа электронов, при этом нетривиальное взаимодействие между релятивистскими, корреляционными и квантовоэлектродинамическими эффектами может приводить к новым физическим свойствам этих элементов по сравнению с более легкими гомологами. Помимо сверхтяжелых нейтральных атомов, в диссертации исследованы многозарядные ионы. В многозарядных ионах эффекты электронных корреляций ослабляются, но гораздо более сильными становятся квантовоэлектродинамические эффекты. Изучение многозарядных ионов является весьма актуальным, поскольку направлено на проверку квантовой электродинамики в области сильного внешнего поля, в котором параметр связи электронов с ядром не является малым. Методы расчетов электронной структуры, разрабатываемые в диссертационной работе, позволяют выполнять расчеты электронных состояний многоэлектронных атомов на высоком уровне точности, необходимом для интерпретации уже существующих и подготовки будущих экспериментов. Прецизионные теоретические предсказания значений потенциалов ионизации атомов и ионов необходимы также для нужд масс-спектрометрии, так как они связывают массы атомов разной степени ионизации.

В диссертации проведены детальные релятивистские расчеты и получены высокоточные результаты для потенциалов ионизации и энергий сродства к электрону сверхтяжелых элементов с зарядом ядра $Z=111-114$ (рентгений, коперниций, nihоний, флеровий) и атома оганесона ($Z=118$). Расчеты выполнялись двумя независимыми методами: методом связанных кластеров с учетом однократных, двукратных и трехкратных возбуждений и методом наложения конфигураций. Согласие данных, полученных разными методами, является важным свидетельством надежности результатов. В расчетах учитывались релятивистские поправки к кулоновскому взаимодействию (гаунтовское взаимодействие, частотная зависимость брейтовского взаимодействия) и ведущие квантовоэлектродинамические эффекты в приближении модельного КЭД оператора.

Успешное выполнение расчетов такого уровня связано с преодолением ряда серьезных технических проблем. В частности, для оганесона Og эффекты электронных корреляций настолько сильны, что в приближении Дирака-Фока связанное состояние аниона Og отсутствует. Это состояние может быть корректно описано только путем надлежащего учета релятивистских эффектов и эффектов межэлектронного взаимодействия за рамками приближения Дирака-Фока. Другой сложностью является то, что энергия сродства к

электрону в Og порядка 0.1 эВ находится как разность энергий двух зарядовых состояний атома порядка 1 МэВ. Это приводит к большим численным сокращениям и необходимости построения специальной процедуры оптимизации базиса орбиталей, сбалансированной относительно разницы энергий.

Эти и многочисленные другие технические проблемы были успешно преодолены автором. В результате получены наиболее точные на сегодняшний день теоретические предсказания для энергии сродства к электрону и потенциалов ионизации сверхтяжелых элементов. Проведено детальное и систематическое исследование погрешностей, связанных со сходимостью результатов по числу виртуальных орбиталей. Построены оптимизированные базисные наборы, которые могут быть использованы в дальнейших исследованиях данных систем.

Во второй части диссертации выполнены расчеты уровней энергии основного и первых возбужденных состояний берилиеподобных ионов. Межэлектронное взаимодействие учитывалось в рамках приближения Брейта. Дополнительно учитывались поправки на частотную зависимость брейтовского взаимодействия, отдачу ядра и ведущие квантовоэлектродинамические эффекты в приближении модельного КЭД оператора. Расчеты выполнены для ионов изоэлектронной последовательности бериллия для зарядов ядра от 10 до 92. Проведен систематический анализ сходимости результатов в зависимости от размера одноэлектронного базиса и от типов возбуждений в конфигурационных функциях. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с имеющимися экспериментальными данными и расчетами других авторов.

Достоверность результатов, полученных в диссертационной работе, подтверждается хорошим согласием теоретических расчетов с имеющимися литературными данными, проведением вычислений различными методами и разработанной автором процедурой оценки погрешности вычислений путем экстраполяции к пределу полного одноэлектронного базиса. Результаты работы докладывались на российских и международных конференциях и своевременно опубликованы в ведущих международных научных журналах.

По содержанию диссертации у меня возникли следующие вопросы/замечания:

- Стр. 17: «Если размер матрицы N больше, чем некоторое значение N_0 , то выполняется полная диагонализация, в противном случае применяется процедура Дэвидсона». Обычно метод Дэвидсона применяется для больших, а не для малых матриц.
- Стр. 46: «погрешность ... включает не только часть, связанную со сходимостью результата по числу виртуальных орбиталей, но и консервативную оценку КЭД эффектов более высокого порядка, которые выходят за рамки модельного КЭД оператора.» Как именно оценивалась погрешность КЭД эффектов высших порядков?
- В работе отмечается, что расчеты электронной структуры для берилиеподобных ионов выполнены в схеме, которая позволяет объединить их со строгими КЭД расчетами, выполненными по теории возмущений. Было бы полезно обсудить более детально такое объединение и продемонстрировать на примере основного

состояния, для которого КЭД поправки уже вычислены в работе [202] (Malyshev et al. 2014). Можно ли адаптировать эту схему на случай теории возмущений для квазивыврожденных состояний?

Данные замечания являются второстепенными, не касаются основных положений диссертации и не снижают общего положительного впечатления о диссертационной работе.

Подводя итоги, можно заключить, что 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. Нарушения пунктов 9 и 11 указанного Порядка в диссертации не обнаружены.

Член диссертационного совета
доктор физико-математических наук
главный научный сотрудник
Института электроники и телекоммуникаций
Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого

Ерохин Владимир Анатольевич

18 октября 2022 г

