

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Козлова Михаила Геннадьевича
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 теоретическому исследованию методами релятивистской квантовой механики электронной структуры сверхтяжелых элементов и четырехэлектронных многозарядных ионов. Теорию этих систем объединяет необходимость одновременно учитывать как релятивистские эффекты, так и электронные корреляции. Это создает серьезные проблемы, поскольку последовательный релятивистский подход требует использования методов квантовой электродинамики (КЭД), а эффективный учет корреляций пока возможен только в рамках квантовой механики. В диссертации Кайгородова это противоречие решается за счет гибкого сочетания различных методов. С одной стороны, КЭД поправки учитываются с помощью модельного оператора лэмбовского сдвига, релятивистского оператора отдачи и оператора брейтовского взаимодействия с частотно-зависимой поправкой. С другой стороны, для учета электронных корреляций используется несколько методов, начиная с теории возмущений по остаточному взаимодействию, до методов связанных кластеров и конфигурационного взаимодействия. Для проведения входящих в диссертацию расчетов необходимо в совершенстве овладеть всеми перечисленными выше методами. Именно это и продемонстрировал соискатель в своей работе.

Диссертация состоит из трех глав. Первая глава содержит описание используемых методов. Во второй главе приведены расчеты потенциалов ионизации и энергии сродства электрона для нескольких сверхтяжелых элементов. Наиболее подробно описан расчет оганесона ($Z=118$). Природа этого элемента вызывает дискуссии. С одной стороны, по электронной структуре его можно отнести к благородным газам. С другой, его расчетный потенциал ионизации ниже, чем у других благородных газов. Кроме того, некоторые расчеты предсказывают довольно большую энергию сродства к электрону, но между разными расчетами имеются существенные различия. Поэтому, важно уточнить эту энергию и, главное, оценить теоретическую погрешность. Кайгородов провел расчеты двумя существенно разными методами и оценил величину различных вкладов в энергию сродства. Это позволило получить оценку точности расчета и подтвердить большую величину энергии сродства оганесона к электрону.

Во втором параграфе этой главы те же методы применены для расчетов четырех других сверхтяжелых элементов и их ионов. Для всех этих атомов найдены несколько первых потенциалов ионизации, а в некоторых случаях и энергии сродства к электрону. Важным достоинством проведенных расчетов, как и в случае оганесона, является аккуратный анализ

всех сделанных приближений и оценка точности результатов. На настоящее время проведенные диссертантом расчеты являются одними из самых надежных и точных.

В третьей главе диссертации описаны расчеты берилиеподобных многозарядных ионов. Такие ионы представляют особый интерес, поскольку они являются одними из наиболее сложных систем, для которых можно проводить последовательные КЭД расчеты. Однако в таких расчетах электронные корреляции учитываются по теории возмущений, что ограничивает их точность. Для улучшения результатов можно сочетать КЭД расчет с квантовомеханическим расчетом. Это дает возможность выделить корреляционные поправки высших порядков и добавить их к результатам КЭД расчета. Эта цель и была поставлена в диссертации. Расчеты проводились для ионов с зарядами $10 \leq Z \leq 92$. Как и при расчетах свойств сверхтяжелых элементов, большое внимание было уделено оценке погрешностей. В результате установлено, что основной причиной расхождения результатов разных расчетов являются различия в выборе начального приближения. Различные начальные приближения приводят к разному определению проекционного оператора на положительную часть дираковского спектра. Показано, что для существенного уменьшения связанной с этим ошибки надо учитывать частотно-зависимую поправку к оператору Брейта. Результаты этой главы важны для дальнейшего развития теории многозарядных ионов и позволяют последовательно уточнять результаты КЭД расчетов, добавляя к ним корреляционные поправки высших порядков.

Диссертация в целом хорошо написана. Изложение логично, хорошо аргументировано и снабжено всеми необходимыми ссылками. При этом, текст не лишен некоторых недостатков. В нем встречается много стилистических небрежностей и грамматических ошибок. В некоторых местах попадаются некорректные, или неясные утверждения. Например, на странице 28, при описании метода построения модельного КЭД потенциала, имеется загадочная фраза: «Высокочастотная и низкочастотная части в какой-то момент совпадают.»

На стр. 52 при сравнении результатов двух расчетов говорится, что «Максимальное отклонение между результатами не превышает 0.015 эВ, что полностью покрывается погрешностью поправки от T-амплитуд.» Однако в следующей фразе сказано, что последняя составляет всего «несколько десятых мэВ».

На страницах 69 – 71, при обсуждении зависимости результатов от выбора проектора на положительночастотные состояния дираковского спектра, не объяснено, как эта ошибка связана с учетом частотно-зависимой части оператора Брейта. В результате этот важный вывод данной работы остается непонятным.

Кроме этого, хочется высказать еще одно пожелание. В таблице 12 приводятся результаты экстраполяции расчётов на базисах разной длины к пределу $N_{\max}, L_{\max} \rightarrow \infty$. В работе используются более длинные ряды, чем в большинстве других расчетов, особенно по L_{\max} . Хотелось бы знать, как результаты экстраполяции зависят от длины этих рядов, и насколько надежны экстраполяции по рядам, где L_{\max} не превышает 6, или 7.

Сделанные выше замечания и пожелания носят частный характер и не влияют на общую оценку работы. Автором получены новые важные результаты в теории релятивистских многоэлектронных атомов и ионов, которые представляют интерес для специалистов.

Работа выполнена на высоком профессиональном уровне, результаты полностью опубликованы, а публикации диссертанта цитируются в ведущих международных научных журналах.

Диссертация Михаила Юрьевича Кайгородова 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 ф.-м. н.,

ведущий научный сотрудник,

Петербургский институт ядерной
физики НИЦ «Курчатовский
институт»



Козлов Михаил Геннадьевич

17 октября 2022 г.