

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Петрова Александра Николаевича 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.

Экспериментальное изучение спектроскопических свойств относительно долгоживущих сверхтяжелых элементов седьмого периода возможно только на единичных атомах. Поэтому ясно, что развитие точных методов и проведение расчетов электронной структуры атомов сверхтяжелых элементов, которые выполнены в диссертации Кайгородова М. Ю., является очень актуальной задачей. Задача является крайне сложной из-за необходимости одновременного учета с высокой точностью корреляционных, релятивистских и квантово-электродинамических эффектов. Из-за нетривиальных свойств валентных электронов обусловленных особой важностью релятивистских эффектов, многие свойства сверхтяжелых элементов являются уникальными, в связи с чем возникает вопрос об области применимости периодического закона. Другим типом систем, рассмотренных в диссертации, являются многозарядные ионы. Актуальность исследования таких систем связана с проведением прецизионных экспериментов по определению фундаментальных констант, их вариаций во времени, проверкой КЭД в сильных полях и, в частности, определения точности модельных КЭД операторов, использованных в первой части диссертации при расчетах атомов сверхтяжелых элементов. Разработанные в диссертации методы могут быть применены и ко многим другим задачам, требующим выполнения расчета электронной структуры атомов тяжелых элементов. Такие задачи возникают, например, при охлаждении и удержании в ловушке атомов и их ионов.

Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и приложения. Список литературы включает 207 наименований. Во введении описывается актуальность работы, формулируются цели и задачи диссертации. В первой главе дается обзор теоретических методов, используемых в диссертации. Вводятся эффективные модельные операторы, дается описание методов связанных кластеров в пространстве Фока (FS-CC), метода конфигурационного взаимодействия (КВ), сочетание метода КВ с методом теории возмущений, метода Дирака-Фока-Штурма, метода модельного квантово-электродинамического потенциала, релятивистского оператора отдачи ядра. В главе 2 описываются расчеты электронной структуры атомов сверхтяжелых элементов оганесона (Og, $Z=118$), рентгения (Rg, $Z=111$), копернициума (Cn, $Z=112$), нихония (Nh, $Z=113$) и флеровия (Fl, $Z=114$). В главе 3 описывается процедура расчета энергии возбуждения многозарядных берилеоподобных ионов. В заключении приведены основные результаты и выводы. В приложении описывается процедура построения одноэлектронного базисного набора.

Одним из важнейших этапов проведения высокоточного расчета электронной структуры является построение базиса одноэлектронных орбиталей (спиноров). Автором разработана процедура построения базиса и проделана большая работа по построению высококачественных базисов для всех рассматриваемых в диссертации элементов. Полученные результаты, где это возможно, сравниваются с другими расчетами и

экспериментальными данными. Расхождения тщательно анализируются. Например, обнаружено, что для атома оганесона КЭД поправка к потенциалу ионизации примерно в три раза меньше значения полученного в другой теоретической работе. Тщательный анализ, проведенный в диссертации, убедительно показывает, что расхождение связано с неточным описанием валентной $8s$ орбитали оганесона в последней работе. Как уже указывалось, электронная корреляция учитывается с использованием самых современных методов KB и FS-CC, поэтому результаты расчетов и сделанные выводы представляются достоверными. Особенно следует отметить тщательный анализ погрешностей всех величин полученных в диссертации, что еще раз убеждает в надежности полученных данных. Результаты работы неоднократно докладывались на международных и российских конференциях, на научных семинарах кафедры квантовой механики СПбГУ.

По диссертационной работе Кайгородова М. Ю. можно сделать следующие замечания.

- 1) Для всех атомов сверхтяжелых элементов кроме оганесона вычисляются как сродство к электрону, так и потенциалы ионизации. Для оганесона потенциал ионизации не вычисляется. Этот факт не комментируется в диссертации.
- 2) Частотно-зависимое брейтовское взаимодействие (в отличие от других сверхтяжелых элементов) не обсуждается для атома оганесона.
- 3) В диссертации обнаружено, что для ионов с большим Z наблюдается большое отличие результатов полученных для различных проекторов на положительно частотные состояния. В работе утверждается, что эта проблема может быть решена только путем рассмотрения возбуждений в отрицательноэнергетический континуум в рамках строгого КЭД подхода. На мой взгляд, было бы полезно оценить вклад возбуждений в отрицательноэнергетический континуум и в рамках квантомеханического подхода, с использованием теории возмущений, считая, что отрицательно частотные решения заняты электронами.

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

д.ф.-м.н., доцент,
профессор кафедры квантовой
механики СПбГУ

Дата

17.10.2022

Петров А.Н.