

**Отзыв научного руководителя
на работу Михаила Юрьевича Кайгородова
"Расчеты электронной структуры сверхтяжелых элементов
и многозарядных ионов",
представленную на соискание ученой степени кандидата наук СПбГУ**

Диссертационная работа М.Ю. Кайгородова посвящена прецизионным расчетам электронной структуры в сверхтяжелых атомах и многозарядных ионах. Актуальность такого исследования обусловлена как недавним прогрессом в открытии новых сверхтяжелых элементов, так и стремительным развитием прецизионных экспериментов с многозарядными ионами. Прецизионные расчеты многозарядных ионов должны быть основаны на комбинации строгих квантовоэлектродинамических расчетов вкладов низших порядков и прецизионных расчетов корреляционных поправок третьего и более высоких порядков в рамках брейтовского приближения. Расчеты уровней энергии в рамках брейтовского приближения выполнены в настоящей диссертации для бериллиеподобных многозарядных ионов. В качестве базового метода для таких расчетов используется метод конфигурационного взаимодействия в базисе Дирака-Фока-Штурма (КВ-ДФШ), который был развит ранее И.И. Тупицыным. В результате проведенных расчетов получены наиболее точные значения уровней энергии бериллиеподобных ионов в брейтовском приближении в широком диапазоне заряда ядра Z . Комбинация этих корреляционных вкладов с соответствующими квантовоэлектродинамическими (КЭД) вкладами, которые также были вычислены на кафедре квантовой механики СПбГУ, позволила получить наиболее точные на сегодняшний день полные теоретические значения для энергий переходов и прояснить согласие теории с имеющимися экспериментами. Расчеты электронной структуры сверхтяжелых элементов с зарядом ядра $Z=111-114$ и $Z=118$ проводятся двумя методами: методом связанных кластеров с использованием комплекса программ DIRAC и уже упомянутого выше метода КВ-ДФШ. Первый метод используется для прецизионного определения главных корреляционных вкладов в рамках гамильтониана Дирака-Кулона с учетом гаунтовской поправки на межэлектронное взаимодействие. С помощью второго метода вычисляются поправки на оставшееся брейтовское взаимодействие и КЭД поправки. При этом КЭД поправки вычисляются с использованием модельного КЭД оператора. Посредством проведенных расчетов определяются потенциалы ионизации и энергии сродства к электрону. В результате проведенных расчетов получено наиболее точное значение для энергии сродства к электрону для атома оганесона, а также целый ряд других важных результатов для сверхтяжелых элементов в интервале $Z=111-114$. Полученные данные сравниваются с результатами, полученными ранее другими авторами. Такое сравнение позволяет заключить, что полученные в диссертации результаты по-прежнему определяют мировой уровень теоретических расчетов в данной области. Полученные в работе результаты опубликованы в 5 статьях, 3 из которых это статьи в журнале Physical Review A. В 4-х статьях М.Ю. Кайгородов является первым автором.

По объему полученного материала и по значимости полученных результатов, выносимых на защиту, работа представляет собой полноценное и законченное научное исследование, выполненное на переднем крае науки. В процессе этой работы М.Ю. Кайгородов проявил настойчивость в решении поставленных задач и большое трудолюбие. Считаю, что данная работа выполнена на высоком научном уровне и удовлетворяет всем требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям. Я рекомендую работу Михаила Кайгородова к представлению на соискание ученой степени кандидата наук СПбГУ.

В.М. Шабаев

Доктор физ.-мат. наук, профессор



В.М. Шабаев
14.06.2018