

ВІДГУК
офіційного опонента на дисертаційну роботу
Буджди Василя Володимировича
«Релятивістська спектроскопія за рахунок зіткнень в електрон- та іон-
атомних системах: Енергетичний підхід», представлена на здобуття
наукового ступеня доктора фізико-математичних наук
за спеціальністю 01.04.05 – оптика, лазерна фізика

Актуальність теми досліджень. Спектроскопія рахунок зіткнень традиційно займає дуже важливе місце серед різноманітних напрямків досліджень у сучасній оптиці та спектроскопії атомних систем. Добре відомо, що доладна інформація щодо енергетичних та спектроскопічних характеристик зіткнень електронів та фотонів з атомними та іонними системами відіграє принципово важливе значення для багатьох практичних застосувань, у тому числі, сучасної квантової оптики та спектроскопії, досліджень надпорогового, багатофотонного, сильнопольового збудження, іонізації атомів та багатозарядних іонів, розсіювання електронів на атомах та іонах в присутності зовнішнього інтенсивного поля лазерного випромінювання тощо.

Для будь-якої прецизійної теорії релятивістських електрон-іон-атомних систем фундаментальне значення має послідовне і коректне урахування багаточастинкових обмінно-кореляційних (обмінно-поляризаційних) ефектів, а також якість згенерованих у нульовому наближенні будь-якої теорії базисів релятивістських хвильових функцій, з чим безпосередньо є пов'язаним і виконання при дослідженні процесів розсіювання та зіткнень в електрон-іон-атомних системах фундаментального принципу калібрувальної інваріантності.

Слід зазначити, що все сказане вище досі лежить в основі основних недоліків більшості із сучасних теоретичних методів атомної оптики та спектроскопії, зокрема, спектроскопії атомних систем за рахунок зіткнень. Таким чином, безумовно існує гостра необхідність розробки теоретичних основ нових підходів в прецизійній релятивістській оптиці і спектроскопії за рахунок зіткнень для електрон-іонних систем, зокрема, розвитку нового релятивістського підходу до опису та обчислення основних енергетичних та спектральних характеристик процесів зіткнень для електрон-іон-атомних систем з одночасним, максимально прецизійним урахуванням складних обмінно-кореляційних ефектів, впливу плаズмового середовища (плаズми багатозарядних іонів), взагалі додаткового зовнішнього поля, напр., лазерного випромінювання на характеристики зіткнень.

Зв'язок з науковими програмами, пріоритетними напрямками розвитку техніки. Виконане здобувачем дослідження пов'язано з такими держбюджетними науково-дослідними роботами (темами) НДР Одеського державного екологічного університету та проектам фундаментальних досліджень Міністерства освіти і науки України (плани і відповідні звіти):

- «Розвиток та застосування нових обчислювальних методів в задачах математичної фізики, теорії ядра та адронних атомів, квантової геометрії» (№ ДР0114U005145, 2014-2018р.);

ODEKU Капеллярія
вх. 345
"fc" "09" 2021 р.

- «Розвиток та застосування нових методів обчислювальної математики, математичної фізики в задачах теоретичної квантової оптики, атомної, молекулярної спектроскопії» (№ ДР0116U002097, 2016-2020рр.);
- «Розрахунок енергетичних та спектроскопічних характеристик рідбергівських атомів та багатозарядних іонів на основі релятивістської багаточастинкової теорії збурень» (2019–2023);
- «Розвиток та застосування хаос-геометричних та квантово-динамічних методів дослідження спектрів і динаміки лазерних систем та приладів надвисокочастотної електроніки» (2019–2023);
- «Прогнозування стану і безпеки навколошнього середовища з урахуванням антропогенного, радіоактивного забруднення, радіаційно-екологічних наслідків аварій на АЕС: Нові моделі і технології» (№ ДР0115U000632, 2015-2017рр.); - «Комплекс нових стохастично-гідродинамічних та атомно-діагностичних моделей моніторингу антропогенного забруднення атмосфери промислових міст та “Green City” технологія» (№ ДР0117U000622, 2017-2019рр.);
- проекту Стипендіату Кабінету Міністрів України (2018-2020 «Релятивістська спектроскопія за рахунок зіткнень в електрон- та іон-атомних системах» згідно з постановою президії Комітету з Державних премій України в галузі науки і техніки від 23 травня 2018 року, №3).

Зміст дисертації. Розглянута дисертація складається з вступу, шістьох розділів, висновків, списку використаних джерел та додатку. У 1-му розділі дисертації автор викладає огляд сучасних теоретичних та експериментальних методів вивчення характеристик електрон-іонних зіткнень, процесів за участю електронів, фотонів, атомів, багатозарядних іонів. У 2-му розділі дисертації автор викладає теоретичні основи розробленого в роботі принципово нового в спектроскопії за рахунок зіткнень методу, а саме, нового релятивістського енергетичного підходу до визначення фундаментальних характеристик зіткнень для суттєво релятивістських та багатоелектронних електрон-іонних та атомних систем, у т.ч. електрон-іонних систем у плазмі багатозарядних іонів, який базується на S-матричному формалізмі Гелл-Мана і Лоу, ab initio методі релятивістської теорії збурень багато-квазічастинкових систем з оптимізованим дірак-коншемівським та дебай-хюкkelівським нульовим наближенням з генерацією калібрувально-інваріантного базису релятивістських орбіталей та прецизійним урахуванням обмінно-кореляційних ефектів як ефектів другого і вище порядків релятивістської теорії збурень, а також урахуванням ефектів плазмового екранування у межах відомого дебаєвського наближення.

У 3-му розділі дисертації автор викладає отримані на підставі нових підходів у багатьох випадків вперше із спектроскопічною точністю дані щодо енергії рівнів, сил осциляторів радіаційних переходів в спектрах багатозарядних іонів, перерізів збудження за рахунок електронного зіткнення, сил електрон-іонних зіткнень, а також швидкісних коефіцієнтів для сил електронних зіткнень для цілого ряду Be-, F-подібних іонів, наведені дані релятивістських обчислень з урахуванням обмінно-кореляційних поправок, значення сил електронних зіткнень для збудження переходу між рівнями тонкої структури основного стану Be- та F-подібних іонів. У 4-му розділі дисертації автор викладає отримані на

підставі нових підходів дані (частина з них вперше отримана із спектроскопічною точністю) масових обчислень на основі релятивістської багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим нульовим дірак-кон-шемівським та дебай-хюкkelівським наближенням енергій і імовірностей радіаційних переходів, сил осциляторів, переходів між рівнями конфігурацій в спектрах Ne-подібних іонів (в спектрі іона Ni XIX, а також результати розрахунку на основі різних теоретичних підходів, в іонах CIVII, ArVIII, TiXII, FeXVI, MoXXXII. У 5-му розділі дисертації автор викладає отримані на підставі нових підходів нові дані по силам осциляторів gf для ряду e-переходів зі збудженого стану в основний стан іону Kr²⁶⁺, перерізи збудження електронним ударом станів Kr²⁶⁺ при E_i=6.80 кеВ, ефективні сили зіткнень Kr²⁶⁺ при T=5×10⁶- 3×10⁷ К, n_e=10¹⁴ см⁻³, швидкості збудження і дезбудження за рахунок зіткнень, іонізації за рахунок зіткнень, радіаційного розпаду для Ne-подібного Ar при плазмових параметрах n_e= 10¹⁹⁻²⁰ см⁻³, T_e=20eВ і електронній температурі T_e=40, 60 eВ. У 6-му розділі дисертації автор викладає основи нової версії релятивістського енергетичного підходу в теоретичній атомній спектроскопії за рахунок зіткнень для електрон-іонних систем у додатковому зовнішньому електромагнітному полі яка базується на S-матричному формалізмі Гелл-Мана і Лоу і призначена для визначення енергетичних та радіаційних характеристик процесів розпаду атомних станів, зіткнень істотно багатоелектронних атомів і іонів в присутності зовнішнього електромагнітного поля, зокрема, для визначення характеристик процесу електрон-іонних зіткнень (*l* - фотонні перерізи іонізації, перерізи (e,2e) реакцій). Особливу увагу привертає відкрито нове явище принципово відмінної динаміки реакцій типу (e,2e) за умов паралельності і перпендикулярності хвильового вектору електрона, що налітає, та вектору поляризації лазерного випромінювання. В завершальній частині автор викладає висновки і додає список використаних джерел й додаток.

Наукова новизна положень, результатів і висновків роботи пов'язана як з розробкою нового релятивістського енергетичного підходу до визначення характеристик електрон-іонних зіткнень для багатозарядних іонів у плазмі в квантовій теорії зіткнень з використанням формалізму калібровочно-інваріантної релятивістської багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим о з оптимізованим дірак-кон-шемівським та дебай-хюкkelівським нульовим наближенням, так і з одержанням наборів нових даних щодо енергетичних та спектроскопічних характеристик зіткнень, у тому числі, енергій рівнів, сил осциляторів радіаційних переходів в спектрах багатозарядних іонів, перерізів збудження за рахунок електронного зіткнення, сил електрон-іонних зіткнень, а також швидкісних коефіцієнтів для сил електронних зіткнень для цілого ряду атомних та електрон-іонних систем.

Автором викладені теоретичні основи нової версії релятивістського енергетичного формалізму до опису електрон-атомних зіткнень в присутності зовнішнього електромагнітного поля вперше виконано обчислення багатофotonічних диференціальних перерізів (e,2e) реакції для нейтрального атома неону при параметрах електрон-атомних зіткнень системи і поля, розроблено нову версію релятивістського енергетичного формалізму для електрон-іонних систем у додаванням.

тковому зовнішньому полі лазерного випромінювання, яка базується на S-матричному формалізмі Гелл-Мана і Лоу і релятивістській багаточастинковій теорії збурень з оптимізованим дірак-кон-шемівським та дебай-хюкkelівським нульовим наближенням, і призначена для визначення енергетичних та радіаційних характеристик процесів розпаду атомних станів та зіткнень при наявності додаткового зовнішнього поля. Вперше в теоретичній спектроскопії за рахунок зіткнень для суттєво багаточастинкових електрон-іонних систем у зовнішньому полі лазерного випромінювання на основі обчислень в наближенні низької частоти для (e,2e) реакції іонізації нейтрального атома неону електронним ударом відкрито нове явище принципово відмінної динаміки реакцій типу (e,2e) за умов паралельності і перпендикулярності хвильового вектору електрона, що налітає, та вектору поляризації лазерного випромінювання.

Ступінь обґрунтованості наукових результатів, висновків та їх достовірності. Обґрунтованість наукових результатів, висновків дисертації та їх достовірність підтвердженні безумовною коректністю використання досить складного та ефективного апарату квантової механіки квантової електродинаміки, релятивістської квантової теорії поля, атомної спектроскопії, розвиненням безумовно коректного та послідовного енергетичного підходу в релятивістській теорії електрон-іонних зіткнень у дебаєвській плазмі і авжеж добрим узгодженням чисельних даних тестових розрахунків перерізів та сил електрон-іонних зіткнень для ряду багатозарядних атомних та іонних систем та відповідних експериментальних даних по цим же системам.

Практичне значення результатів роботи. Нові методи та нові отримані результати мають принципово важливe значення для багатьох практичних застосувань, у тому числі, сучасної квантової оптики та спектроскопії атомних та іонних систем, досліджень надпорогового, багатофотонного, сильнопольового збудження, іонізації в атомних системах, та багатозарядних іонах, розсіювання електронів на таких системах в присутності зовнішнього інтенсивного поля лазерного випромінювання тощо. Слід звернути увагу на безпрецедентні можливості забезпечення контролю атомних систем при взаємодії із потоками електронів та інших частинок, дослідження генерації MeВ рентгенівських промінів в плазмі, яка створюється фемтосекундними лазерними імпульсами, вивчення індукованих понадінтенсивних зовнішніх випромінюванням елементарних електрон-атомних та електрон-іонних процесів розсіювання, зіткнень тощо. Викладені автором нові методи та результати можуть бути дуже корисно використані і в багатьох суміжних областях фізики, у тому числі, ядерній, молекулярній, лазерній фізиці, квантовій електроніці, фізиці плазми, астрофізиці, фізиці різноманітних динамічних елементів, систем приладів тощо.

До недоліків дисертаційної роботи, які, зазначу заздалегідь, мають лише частковий характер і ні в якій мірі не стосуються основних результатів цього дуже кваліфікованого, цікавого і безумовно нового оптико-спектроскопічного дослідження, можна віднести такі:

1). Загальне зауваження. Автор викладає теоретичні основи розробленого в роботі принципово нового в спектроскопії за рахунок зіткнень методу, а саме, нового релятивістського енергетичного підходу до визначення фундаментальних характеристик зіткнень для суттєво релятивістських та багатоелектронних електрон-іонних та атомних систем, у т.ч. електрон-іонних систем у плазмі багатозарядних іонів. Більш того, далі він проводить дуже докладне порівняння своїх одержаних результатів з відповідними нечисленними експериментальними (частина з яких є безумовно високо прецизійними) даними, причому на відповідні експерименти надані точні посилання, але автор, на мій погляд, недостатньо повно коментує зміст, а також труднощі таких експериментів. Впевнений, що й деякі найбільш цікаві деталі експериментальних технологій також варто було б викласти.

2). Автор розвиває свої нові теорії, фактично зорієнтовані на визначення фундаментальних характеристик зіткнень для суттєво релятивістських та багатоелектронних електрон-іонних та атомних систем і фактично у переважній частині мова йде про електричні дипольні переходи. Виникає ряд запитань, пов'язаних з більш чітким виділенням додаткових меж застосування нових теорій. Напр., які й перспективи і наскільки вони будуть корисні при дослідженні заборонених переходів, напр., M1, E2. А також взагалі дуже слабких по інтенсивності M2, M3, E3 переходів. Є впевненість, що новий підхід, викладений автором, має безумовно дуже велике значення, враховуючи його непертурбативність, причому значно більше значення, чим це стверджується в роботі. Є очевидними перспективи дуже корисного використання у молекулярній та ядерній оптиці та спектроскопії, а також фізиці різноманітних квантових елементів, систем приладів тощо.

3) Релятивістський енергетичний формалізм в теорії зіткнень для електрон-іонних систем в плазмі, який викладає автор, дозволяє одночасно розраховувати амплітуди та імовірності збудження (перерізи, сили) за рахунок зіткнень у випадку багатозарядних іонів тощо, що має значну перевагу над традиційним в квантовій механіці атомних систем амплітудним підходом з використанням методів типу Хартрі-Фока або Дірака-Фоку. При узагальненні авторської теорії на випадок дослідження таких складних атомних систем, як двох-, трьох- квазічастинкові системи, така перевага ще більш зростає. Автор вказує, що фактично різні формули калібрування фотонного пропагатору ведуть до еквівалентних формул, що відповідають стандартному амплітудному підходу. Яке з калібрувань є найбільш прийнятним з точки зору точності визначення характеристик зіткнень. Впевнений, що цей аспект заслуговує на особливу увагу і автору варто було б це більш докладно викласти..

4). У 2-му розділі декотрі технічні деталі загальної методики автором викладені у стилі Ландау-Ліфшица, тобто, «неважко побачити», «елементарно зрозуміти»; особливо це стосується деяких методичних аспектів, наприклад, зв'язок між формою гамільтоніану релятивістської теорії збурень багато-квазічастинкових систем, аналізом якості та кількості базисних функцій, збіжністю відповідного ряду теорії збурень. . Впевнений, що автору варто було б більш критично про коментувати дані альтернативних, напр., неоптимізованих дірак-фоківських теорій, вказати міру порушення принципу калібрувальної інваріантності.

5). Перелік редакційних та методичних зауважень включає декілька пунктів. По-перше, в авторефераті дисертації дуже багато абревіатур, можливо їх число можна було б суттєво зменшити. Деякі величини та константи визначаються декілька разів, напр., стала тонкої структури, матриці Дірака. Можливо, слід було б частіше використовувати графічну форму подання даних, особливо це стосується складних двох-, трьох – квазічастинкових атомних систем типу неон-та натрій-подібних іонів та інші.

Висновок. Дисертація Буяджи Василя Володимировича «Релятивістська спектроскопія за рахунок зіткнень в електрон- та іон - атомних системах: Енергетичний підхід» з точки зору актуальності, наукової новизни, теоретичного й практичного значення є завершеною роботою, в якій розвинуту основи нового релятивістського енергетичного підходу до визначення характеристик електрон-іонних зіткнень для багатозарядних іонів у плазмі в квантовій теорії зіткнень з використанням формалізму калібротовочно-інваріантної релятивістської багаточастинкової теорії збурень, та одержано набори даних (частина відповідних даних одержана вперше) щодо енергетичних та спектроскопічних характеристик зіткнень, у тому числі, перерізів збудження за рахунок електронного зіткнення, сил електрон-іонних зіткнень, швидкісних коефіцієнтів для сил електронних зіткнень для цілого ряду важливих з прикладної точки зору атомних та електрон-іонних систем.

Всі нові результати та дані в сукупності складають основу нового наукового напрямку в сучасній атомній оптиці та спектроскопії, а саме, теоретичної релятивістської спектроскопії за рахунок зіткнень електрон-атомних та іонних систем з кількісним урахуванням ефектів впливу певних електромагнітних полів (полі в плазмі, зовнішнє поле та інше).

Зміст автореферату точно відображає основні положення дисертаційної роботи.

Основні положення дисертації Буяджи В.В. досить повно відображені в основних наукових статтях, монографіях у загально відомих, як правило, міжнародних виданнях (у тому числі, видавництво Springer, науково-метричних баз Scopus, Web of Science) з досить високим імпакт-фактором та фахових наукових журналах. Слід звернути увагу на досить значну кількість престижних міжнародних конференцій, симпозіумів, шкіл, конгресів, де пройшла апробацію шукана, нова й дуже цікава робота.

Використання результатів дисертаційної роботи. Отримані в дисертації нові наукові результати можуть бути з великою користю застосовані у наукових та науково-прикладних розробках інститутів і вищих освітніх закладів системи Міністерства освіти і науки України та Національної академії наук України, які спеціалізуються у галузях атомної оптики та спектроскопії, астрофізики, фізики ядра та інших галузях (наприклад, Інститут фізики НАН України, Інститут електроніки НАН України, Київський національний університет імені Тараса Шевченка, Одеський національний університет імені І.І.Мечникова, національний університет «Одеська політехніка», Харківський національний університет імені В.Н. Карабіна та інші).

В цілому я вважаю, що дисертаційна робота Буяджи Василя Володимировича повністю відповідає всім вимогам до докторських дисертацій наук за спеціальністю 01.04.05 – «оптика, лазерна фізика» (104- фізика та астрономія) пунктів 9, 10, 12-14 «Порядку присудження наукових ступенів», затвердженого Постановою Кабінету Міністрів від 24.07.2013 р. №567), а автор дисертаційної роботи заслуговує присудження йому наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за вказаною спеціальністю.

Офіційний опонент:

Професор кафедри судової теплоенергетики
Національного університету
«Одеська морська академія»
доктор фізико-математичних наук,
професор



Малахов О.В.

Підпис професора Малахова О.В, засвідчує:

Вчений секретар національного університету
«Одеська морська академія»



Чубенко О.В.