

ВІДГУК
офіційного опонента
на дисертаційну роботу Кузнецової Ганни Олександрівни
“ТЕОРЕТИЧНА СПЕКТРОСКОПІЯ СКЛАДНИХ АТОМНИХ СИСТЕМ
В ІНТЕНСИВНОМУ ЕЛЕКТРОМАГНІТНОМУ ПОЛІ”, представлену на
здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук
за спеціальністю 01.04.05 –оптика, лазерна фізика

Основною метою дисертаційної роботи Кузнецової Г.О. є вирішення низки надто актуальних, складних фундаментальних проблем релятивістської оптики та спектроскопії атомних систем (у тому числі, суттєво багатоелектронних атомів, атомів у високо збуджених рідбергівських станах тощо) у зовнішніх інтенсивних однорідному електричному, електромагнітному полі з урахуванням низки як традиційних, так й принципово нових ефектів міжчастинкових кореляцій, фотон-кореляційних ефектів, ефектів впливу теплового випромінювання та інших.

Загальновідомо, що спектроскопічні дані щодо різноманітних енергетичних та спектральних параметрів атомних систем в електромагнітному полі, зокрема, енергій та ширин штарківських, рідбергівських, автоіонізаційних резонансів, енергій багатофотонного збудження та іонізації, ймовірностей різноманітних процесів збудження, іонізації розпаду тощо, мають величезне значення для різноманітних додатків у класичних галузях фізики, у тому числі, в сучасній атомній оптиці і спектроскопії, квантовій теорії випромінювання, лазерній фізиці та квантовій електроніці, астрофізиці й астроспектроскопії, навіть фізиці ядра та прискорювачів, фізиці плазми, фізиці зіткнень, фізиці іонізованих газів тощо.

З іншого боку, відкриття низки нових оптичних явищ та ефектів за участю суттєво багатоелектронних атомів, атомів у високо збуджених рідбергівських станах) у зовнішніх інтенсивних однорідному електричному, електромагнітному полі відкрило нові перспективи у розвитку відносно нових галузей безпосередньо сучасної фізики, або таких, що лежать на стику фізики, хімії, інформатики, технічних галузей типу приладобудування, а саме: квантової інформатики та криптографії, фізики та технологій так званих оптичних (атомних) стандартів частот, фізики принципово нових рідбергівських або автоіонізаційних лазерних систем, фізики та хімії криогенної плазми лужних атомів, фізики та хімії бозе-конденсату та фонтанів рідбергівських лужних атомів і багато інших. З огляду на величезне значення, яке відіграє інформація про енергетичні та спектральні параметри атомів у зовнішніх інтенсивних однорідному електричному, електромагнітному полі природно, що у сучасній теорії добре відома досить велика кількість різних методів розрахунку їх характеристик з урахуванням в тій чи іншій мірі принципово важливих обмінно-кореляційних, а також частково релятивістських ефектів. Проте, не дивлячись на відомий прогрес завдяки їх широкому застосуванню більшість з них не здатна в адекватній мірі забезпечити одночасний прецизійний опис важливих обмінно-кореляційних, також частково релятивістських ефектів, особливо у но-

вих класах задач спектроскопії молекул з урахуванням ефектів інтенсивних взаємодій із зовнішніми полями тощо. Тому, є очевидним, що тема дисертаційної роботи Кузнецової Г.О. є **актуальною** та своєчасною.

Актуальність обраної теми дослідження підтверджує її зв'язок з низкою НДР Одеського державного екологічного університету, установи, де виконано роботу, а також проектів фундаментальних досліджень МОН України, у тому числі: “Розвиток та застосування нових обчислювальних методів в задачах математичної фізики, теорії ядра та адронних атомів, квантової геометрії” (№ держр. 0114U005145, 2014-2018pp.), “Розвиток та застосування нових методів обчислювальної математики, математичної фізики в задачах теоретичної квантової оптики, атомної, молекулярної спектроскопії”, № держр. 0116U002097, 2016-2020pp.), “Розрахунок енергетичних та спектроскопічних характеристик рідбергівських атомів та багатозарядних іонів на основі релятивістської багаточастинкової теорії збурень” (2019-2023pp.), “Розвиток та застосування хаос-геометричних та квантово-динамічних методів дослідження спектрів і динаміки лазерних систем та приладів надвисокочастотної електроніки” (2019-2023pp.) та інші.

Зміст роботи. Основна ідея даної дисертаційної роботи, яка об'єднує всі її розділи, пов'язана з розвитком нового послідовного, прецизійного підходу до розрахунку енергетичних, радіаційних та спектроскопічних характеристик суттєво релятивістських, багатоелектронних атомних систем у зовнішньому електромагнітному полі. Перейдемо тепер до детального аналізу змісту дисертації.

Дисертаційна робота має традиційну структуру і складається зі вступу, п'яти розділів, загальних висновків та списку використаних джерел, а також додатку із списком публікацій авторки.

Перший розділ дисертації присвячений докладному огляду теоретичних методів розрахунку енергетичних, радіаційних та спектроскопічних характеристик багатоелектронних атомних систем у зовнішньому електромагнітному полі з акцентом на аналіз переваг та недоліків найбільш відомих методів сучасної квантово-механічної теорії атомів.

Другий розділ присвячено викладанню теоретичних основ нового релятивістського підходу до обчислення енергетичних характеристик атомів у зовнішньому постійному електричному полі довільної сили, який базується на релятивістській операторній теорії збурень і апараті багаточастинкової релятивістської теорії збурень з неемпіричним нульовим локальним наближенням Дірака-Фока-Слетеру. Принциповою особливістю нового теоретичного підходу є забезпечення послідовного та прецизійного урахування релятивістських, а також обмінно-поляризаційних ефектів, у тому числі, ефектів поляризаційної взаємодії, тиску континууму в розрахунках відповідних характеристик атомних систем.

В межах релятивістської операторної теорії збурень розроблений новий послідовний підхід до обчислення енергій та ширин штарківських резонансів для атомів у зовнішньому постійному слабкому електричному полі; Відповідні ширини штарківських резонансів визначаються квадратом матричного еле-

мента від повного гамільтоніану атомної системи в електричному полі незалежно від інтенсивності останнього.

Третій розділ дисертації присвячено викладенню результатів апробації нового методу, зокрема, викладені дані енергій та ширин штарківських резонансів в спектрах низки атомів в рідбергівських станах, таких як атоми лужних елементів, Li, Na, K, Rb, Cs, а також енергій та ширин автоіонізаційних, рідбергівських штарківських резонансів в спектрі рідкоземельного атому Yb, Tm, Gd, амплітуд (матричних елементів) радіаційних переходів, сил осциляторів, атомних поляризованостей для низки атомів лужних елементів та інертних газів (Na, K, Rb, Cs, Ar, Kr, Xe), рідкоземельних елементів (Yb, Tm). Проведений аналіз даних, отриманих для низки атомів продемонстрував та підтвердив ефективність нових підходів, а також дозволив вперше виявити ряд унікальних особливостей у спектроскопії, напр., автоіонізаційних резонансів в спектрах рідкоземельних атомів у досить слабкому зовнішньому електричному полі.

Четвертий розділ роботи присвячено викладанню теоретичних основ нового теоретичного підходу до обчислення енергетичних характеристик атомів у зовнішньому змінному електромагнітному полі, який базується на апараті релятивістської операторної теорії збурень та формалізмі багаточастинкової релятивістської теорії збурень, а також концепції квазістаціонарних, квазіенергетичних станів і методі комплексного обертання координат. Задача розрахунку характеристик іонізації багатоелектронних атомів у зовнішньому змінному електромагнітному полі зводиться до стаціонарної задачі на власні значення і власні вектори енергетичної матриці (з розглядом кількох флоківських зон), де власні стану є фактично резонансами розсіювання при комплексній енергії. На основі нового підходу проведені дослідження і динаміки іонізації атомів Li, Rb, Tm в рідбергівських станах в мікрохвильовому полі з параметрами і розраховані залежності ймовірності іонізації для атомів Li, Rb, Tm від амплітуди поля, значення ефективного квантового числа n , та інших параметрів систем та поля. Деякі результати отримані авторкою вперше, наприклад, результати щодо динаміки іонізації атому туллію і рідбергівських станах в мікрохвильовому електромагнітному полі представлені взагалі вперше в науковій літературі.

П'ятий розділ дисертації присвячено викладанню теоретичних основ нового релятивістського підходу до обчислення енергетичних та радіаційних характеристик атомів у зовнішньому полі теплового випромінювання, який базується на узагальненому релятивістському енергетичному формалізмі і апараті багаточастинкової релятивістської теорії збурень з неемпіричним нульовим локальним наближенням Дірака-Фока-Слетеру і акуратним урахуванням основних обмінно-поляризаційних ефектів, зокрема, обмінно-поляризаційної взаємодії квазічастинок через остов. Наведені дані розрахунку на основі сформульованої теорії швидкостей іонізації, радіаційних амплітуд, значень ефективного часу життя рідбергівських станів атомів лужних елементів під впливом поля теплового випромінювання. Показано, що для досягнення адекватної точності опису атомних систем в полі теплового випромінюван-

ня коректне урахування релятивістських та особливо поляризаційних ефектів є принципово важливим.

У заключній частині дисертації наведені загальні висновки.

Наукова новизна положень, результатів, висновків дисертації. На мій погляд, у даній дисертації отримано низку принципово важливих нових наукових результатів в межах нової кооперативної спектроскопії та нелінійної квантової динаміки молекулярних систем у вільному стані та в інтенсивному зовнішньому електромагнітному полі з урахуванням ефектів кореляції, хаосу та кооперативних переходів, моделювання хаотичної динаміки двохатомних молекул у зовнішньому електромагнітному полі.

Розвинуто низку нових підходів та методів до розрахунку електронної структури, енергетичних, радіаційних та спектроскопічних характеристик суттєво релятивістських, багатоелектронних атомних систем у зовнішньому постійному електричному а також змінному електромагнітному полі. Їх принципові елементи новизни пов'язані з послідовним та прецизійним урахування складних релятивістських та обмінно-поляризаційних ефектів, у тому числі, ефектів поляризаційної взаємодії, екранування валентних квазічастинок, ефектів радикально сильного впливу на ширини штарківських, рідбергівських, автоіонізаційних резонансів зовнішнього електромагнітного поля, причому у випадку атомів рідкоземельних елементів має місце ефект гігантського уширення резонансів в досить слабких щодо інтенсивності полях.

До числа надто важливих результаті роботи також слід віднести й прецизійні дані щодо енергетичних, радіаційних та спектроскопічних характеристик, зокрема, енергій рівнів в спектрі, радіаційних амплітуд, сил осциляторів радіаційних переходів, ймовірностей іонізації, ефективних часі життя тощо для цілої низки багатоелектронних атомних систем, зокрема, атомів лужних та рідкоземельних елементів.

В дисертації вперше на послідовному квантово-електродинамічному рівні розроблені теоретичні основи нового суттєво релятивістського підходу до обчислення енергетичних та радіаційних характеристик атомів у зовнішньому полі теплового випромінювання, який базується на узагальненому релятивістському енергетичному формалізмі і апараті багаточастинкової релятивістської теорії збурень з акуратним урахуванням основних обмінно-поляризаційних ефектів, і наведені досить важливі для різних додатків дані щодо швидкостей іонізації, радіаційних амплітуд, значень ефективного часу життя рідбергівських станів низки багатоелектронних атомів.

З викладеного вище випливає, що в дисертації вирішена нова наукова проблема: теоретична релятивістська спектроскопія багатоелектронних атомних систем в інтенсивному зовнішньому постійному електричному, змінному електромагнітному полях, а також полі теплового випромінювання з коректним урахуванням обмінно-поляризаційних, фотон-кореляційних ефектів, а також ефектів суттєво некулонівського групування рівнів в рідбергівських спектрах.

Практичне значення наукових результатів дисертації уявляється дійсно вагомим, оскільки отримані в роботі дані для енергетичних, радіаційних

та спектроскопічних характеристик суттєво релятивістських, багатоелектронних атомних систем у зовнішньому постійному електричному, змінному електромагнітному полях вкрай необхідні для розв'язання широкого класу задач, зокрема, атомної оптики та спектроскопії, лазерної фізики і квантової електроніки, розробки нових ефективних схем генерації, включаючи створення лазерів, разерів, гразерів, астрофізики, та радіоспектроскопії, фізики атом- та іон-атомних зіткнень, фізики та хімії ультрахолодної та криогенної плазми, а також суміжних галузей фізики, а саме спектроскопії молекулярних та ядерних систем. Особливу практичну значущість мають результати щодо обчислення енергетичних, радіаційних та спектроскопічних характеристик релятивістських, багатоелектронних атомних систем у зовнішньому постійному електричному, змінному електромагнітному полях, нові прогностичні дані, а також значні можливості розвитку принципово нових методів теоретичного дослідження (на рівні комп'ютерного моделювання) фундаментальних характеристик в цілому атомних систем, нових методів діагностики астрофізичної, ультрахолодної та криогенної плазми тощо.

Ступінь обґрунтованості наукових результатів й їхня достовірність підтверджені докладним порівнянням розрахованих авторкою, на підставі своїх нових підходів, енергетичних, радіаційних та спектральних характеристик низки суттєво релятивістських атомних систем у вільному стані та у зовнішньому електричному та електромагнітному полях з відповідними надійними, досить прецизійними експериментальними даними та їх добрим узгодженням. Всі основні результати дисертації є новими, строго обґрунтованими і доведеними; вони опубліковані у провідних наукових фахових виданнях і доповідалися на переважно міжнародних досить відомих конференціях, конгресах, симпозіумах та школах.

Зауваження до роботи. Слід зазначити зараз, що наведені нижче побажання і зауваження носять характер рекомендацій і ні в якому разі не стосуються основних положень цієї важливої та цікавої роботи.

По-перше, у першому оглядовому розділі авторка надає достатньо докладний та ретельний аналіз сучасних підходів в теоретичній спектроскопії атомів у зовнішніх електромагнітних полях, приводячи список найбільш потужних методів квантової механіки та квантової електродинаміки атомів, які широко використовуються. На мій погляд, авторці варто було б розглянути більш докладно переваги та недоліки деяких нових потужних підходів, очевидно, розроблених в останнє десятиріччя. Також цікава точка зору авторці на можливості використання в розглянутих класах задач методу мега-Дірака-Фока.

По-друге, у тому ж першому оглядовому розділі авторка докладно розглядає головні проблеми та методи сучасної теоретичної спектроскопії атомів у зовнішніх електромагнітних полях, лише коротко посилаючись на деякі експериментальні методи. На мій погляд, авторці варто було б розглянути більш докладно останні досягнення й в експериментальній техніці, особливо із застосуванням потужних джерел лазерного випромінювання.

По-третє, у другому розділі при викладенні ключових положень релятивістської операторної теорії збурень вводиться функція $E(t)$, яка практично збігається із постійною напруженістю поля у внутрішньо бар'єрній області руху ($t < t_2$) і зникає при $t \gg t_2$. На мій погляд авторці варто було б розглянути більш докладно її вибір і кількісний вплив на результати, напр., щодо ширин штарківських резонансів.

По-четверте, при діаграматизації ряду теорії збурень (розділ 2) авторка докладно розглядає основні діаграми другого порядку атомної теорії збурень по міжелектронній взаємодії. Добре відомо, що у цьому випадку мають з'явитися так звані діаграми із дірак-фоковськими вставками. Варто було б докладніше прояснити питання компенсації відповідних внесків в межах теорії збурень.

По-п'яте. До числа безумовно нових результатів, представлених у розділі 3, відносяться дані, що стосуються статичної поляризованості атома Yb. В таблиці 3.21 авторка наводить експериментальні та теоретичні значення, отримані на основі розрахунків в рамках: залежної від часу теорії функціоналу густини, методу кластерних зв'язків, методу штурмовських дірак-коншемівських орбіталей, а також методу «Config. Interaction- Perturbation Theory—CIPT method» і методу «configuration interaction (CI) -2-order many-body perturbation theory (MBPT)». На мій погляд, авторці варто було б більш докладно пояснити терміни CIPT, MBPT, й самі методи, які, ймовірно, отримали розвиток лише в останнє десятиріччя. Також здається, що чудові результати авторці для поляризованостей рідкоземельних елементів слід вважати дуже серйозним результатом роботи, й це треба було б особливо підкреслити.

По-шосте. В розділі 5 авторка наводить дуже корисні дані щодо спектроскопії лужних атомів в мікрохвильовому полі. З цього приводу виникає питання мотивації вибору саме цих атомів, а не інших.

Методичні зауваження. Як автореферат, так й сама дисертація, переважані аббревіатурами і скороченнями, причому в українськомовному і особливо англомовному варіантах. Хоча в дисертації докладно надані відповідні пояснення, проте це суттєво ускладнює читання безумовно нової та дуже цікавої роботи. В роботі є невдалі аббревіатури (напр., CIPT) та описки в тексті;

Висновок. З точки зору поставленої мети та вирішених задач, наукової новизни, теоретичної та практичної значущості отриманих результатів дисертаційна робота Кузнецової Г.О. є завершеною роботою, в якій фактично закладені основи нового напрямку у сучасній оптиці та спектроскопії атомних систем - теоретичної релятивістської спектроскопії багатоелектронних атомних систем в інтенсивному зовнішньому електромагнітному полі з коректним урахуванням обмінно-поляризаційних, фотон-кореляційних ефектів, а також ефектів суттєво некулонівського групування рівнів в рідбергівських спектрах, що одночасно складає **вирішену наукову проблему**.

Зміст автореферату відповідає основним положенням роботи, які досить повно опубліковані у відомих наукових журналах (особливо слід відзначити значну кількість публікацій у міжнародних фахових журналах та виданнях, у т.ч. видавництва Springer, з досить високим імпаکت-фактором, що входять до

міжнародних науково-метричних баз) і апробовані на відомих, як правило, міжнародних конференціях та конгресах.

Використання результатів дисертації. Результати дисертаційної роботи Кузнецової Г.О. можуть бути використані у наукових планах та програмах досліджень відповідних установ, зокрема, університетів та інститутів МОН України, НАН України, а також взагалі організацій, де займаються розв'язанням широкого кола задач атомної, молекулярної, лазерної фізики, квантової електроніки, фізики плазми, астрофізики, радіоастрономії, фізики зіткнень тощо.

Висновок. Вважаю, що дисертація Кузнецової Ганни Олександрівни **“Теоретична спектроскопія складних атомних систем в інтенсивному електромагнітному полі”** за своєю актуальністю, новизною, науковою цінністю та іншими показниками відповідає вимогам пунктів 9, 10, 12-14 «Порядку присудження наукових ступенів», затвердженого Постановою Кабінету Міністрів від 24.07.2013 р. №567 (із змінами і доповненнями) і наказу МОН України від 12.01.2017 р. № 40 щодо оформлення дисертацій, а авторка роботи, **Кузнецова Ганна Олександрівна**, безумовно заслуговує на присудження їй наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.05 – оптика, лазерна фізика.

Офіційний опонент:

Доктор фізико-математичних наук, професор
професор кафедри загальної та прикладної фізики
Національного авіаційного університету,
Заслужений діяч науки і техніки України
13.09.2021



Кондратенко П.О.



Кондратенко П.О.
свідоцтво
вченого секретаря
Національного авіаційного університету

