

ВІДГУК
офіційного опоненту
на дисертаційну роботу Терновського Валентина Борисовича
«Релятивістська спектроскопія важких атомів з урахуванням
обмінно-кореляційних та радіаційних ефектів», яка представлена
на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук
за спеціальністю 01.04.05 – оптика, лазерна фізика

Актуальність теми дисертації. В останні роки в оптиці та спектроскопії атомів та багатозарядних іонів спостерігається справжній суттєвий прогрес, пов'язаний як з цілою низкою відомих фундаментальних теоретичних досягнень, так й з розвитком нових експериментальних технологій. У цьому сенсі варто нагадати широке використання за теперішнього часу в експериментальних дослідженнях джерел синхротронного випромінювання, прискорювачів, колайдерів важких іонів, істотне збільшення інтенсивності та якості джерел лазерного випромінювання, і, як наслідок, нові можливості для прецизійного вивчення характеристик важких як звичайних, так й екзотичних систем, так званих релятивістських багатоелектронних та адронних атомів, а також важких багатозарядних іонів. Велике значення для різноманітних астрофізичних досліджень, у тому числі, вивчення характеристик астрофізичної плазми, досліджень з керованого термоядерного синтезу, і насамперед, побудови нових ефективних технологій діагностики термоядерної плазми, створення принципово нових схем лазерів в ВУФ, рентгенівських областях спектра має наявність прецизійної спектральної інформації щодо енергетичних і спектральних параметрів важких і надважких атомів та іонів (у т.ч. рівнів енергії, сил осциляторів, параметрів надтонкої структури (НТС) тощо). Не зважаючи на значні досягнення в області експериментальних методів дослідження спектрів атомів та іонів, зокрема, застосування нових методів лазерної спектроскопії, залишається не вивченою досить велика кількість важких та надважких атомів (а також відповідних багатозарядних іонів) періодичної таблиці Менделєєва. В повній мірі ця проблема також стосується важких адронних (зокрема, каонних) багатоелектронних атомів, для більшості з яких фактично відсутня надійна спектроскопічна інформація. Без ефективних прецизійних і послідовних теоретичних методів розрахунку зазначених характеристик атомних систем подальший розвиток як безпосередньо атомної оптики і спектроскопії, так і перелічених вкрай актуальних та важливих класів прикладних задач у фізиці плазми, дослідженнях з керованого термоядерного синтезу, астрофізичних дослідженнях та інших галузях, стає неможливим. Для отримання прецизійних даних щодо спектрів важких атомних систем також принципово важливими є послідовне врахування чисто ядерних ефектів, включаючи ефект скінченного розміру ядра, а також урахування просторового розподілу магнітного

моменту усередині атомного ядра (ефект Bohr-Weisskopf). Без сумніву, особливої актуальності в цих задачах набуває послідовне врахування геометрії атомного ядра (тобто врахування ядерних поправок, зокрема, на скінченний розмір ядра) та радіаційних ефектів: поляризація вакууму і власний енергетичний зсув рівнів. Між тим, сучасний рівень розвитку теорії, навіть з врахуванням досягнень останніх років, не дозволяє адекватно, з високою точністю описати енергетичні і спектральні параметри саме важких і надважких атомів та іонів, тому відповідність теми дисертації спеціальності - 01.04.05 – оптика, лазерна фізика та її актуальність не викликають жодних сумнівів.

Зв'язок з науковими програмами, пріоритетними напрямками розвитку техніки. Дослідження, які виконані в дисертації, увійшли до планів НДР Одеського державного екологічного університету та Міністерства освіти і науки України: “Розвиток і застосування нових методів обчислювальної математики і математичної фізики в задачах теоретичної квантової оптики і атомної та ядерної спектроскопії” (№ держр. 0111U005225, 2011-2015), “Розвиток та застосування нових обчислювальних методів в задачах математичної фізики, теорії ядра та адронних атомів, квантової геометрії” (№ держр. 0114U005145, 2014-2018), “Розвиток та застосування нових методів обчислювальної математики, математичної фізики в задачах теоретичної квантової оптики, атомної, молекулярної спектроскопії”, № держр. 0116U002097, 2016-2020), “Розрахунок енергетичних і 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), а також деяких проектів фундаментальних досліджень МОН України.

Зміст дисертації. Дисертація Терновського В.Б. містить вступ, п'ять розділів, висновки, список використаних джерел і додаток зі списком публікацій здобувача за темою дисертації.

У **вступі** дисертаційної роботи обґрунтовано вибір теми дослідження, сформульована мета досліджень, визначені наукова новизна, практичне значення результатів, наведена інформація про апробацію дисертації, описаний особистий внесок здобувача. .

У **першому розділі** роботи наданий докладний огляд сучасних підходів в теоретичній релятивістській спектроскопії важких атомних систем та аналіз існуючих методів розрахунку спектроскопічних характеристик атомів та іонів. Особливу увагу приділено актуальним проблемам сучасної теорії атомних систем, зокрема пов'язаних із необхідністю врахування релятивістських, радіаційних та ядерних ефектів, а також обмінно-кореляційних ефектів. З'ясовано, що до теперішнього часу найбільш прецизійні розрахунки проведені лише для важких воднеподібних іонів та атомів середини таблиці Менделєєва.

У **другому розділі** дисертації викладено теоретичні основи нового прецизійного підходу в релятивістській спектроскопії важких атомів та іонів, який базується на формалізмі комбінованої релятивістської багаточастинкової теорії збурень (RMBPT) з оптимізованим стандартним дірак-фоківським нульовим наближенням (Dirac-Fock-Breit (ODF)) та узагальненому релятивістському енергетичному підході (S-матричний формалізм Гелл-Мана та Лоу). В даному підході вперше реалізована процедура побудови одноквазічастинкового уявлення, яка базується на принципі побудови оптимізованих атомних базисів з дотриманням принципу калібрувальної інваріантності, зокрема, шляхом мінімізації калібрувально-неінваріантних внесків в радіаційні ширини. До числа нових елементів побудованої здобувачем прецизійної теорії слід віднести принципово важливий елемент додержання принципу калібрувальної інваріантності при обчисленні релятивістських хвильових функцій важкого атому, узагальнену релятивістську процедуру станів континууму в межах методу штурмівських розкладань, новий підхід до врахування кількісно важливих багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів і нові методи опису радіаційних квантово-електродинамічних поправок, у т.ч., поправок за рахунок врахування власно-енергетичної частини зсуву Лемба, та поляризації вакууму.

Далі у **третьому розділі** новий формалізм релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF та узагальнений релятивістський енергетичний підхід застосовуються у розв'язанні різних класів задач в спектроскопії ряду важких атомів та іонів, а саме іонізованого атомі ртуті Hg^+ , важких атомів свинцю Pb, Європію Eu I, талію Tl, ітербію Yb, тулія Tm, надважкого елемента ніхонія ${}_{113}^{278}\text{Nh}$ та ізоотопу урану ${}^{92}\text{U}$. Дуже важливими для теорії та різноманітних застосувань є результати роботи по спектроскопії рідкоземельних атомів, зокрема, зокрема, отримані нові прецизійні дані енергій, ширин автоіонізаційних станів $4f_{7/2}^{13}6s_{1/2}(3)ns_{1/2}[\text{J}]$, $4f_{5/2}^{13}6s_{1/2}(2)ns_{1/2}[\text{J}]$, $4f_{5/2}^{13}6s_{1/2}(3)ns_{1/2}[\text{J}]$, $4f_{5/2}^{13}6s_{1/2}(2)np_j[\text{J}]$, розпад яких проходить як по стандартному каналу Бейтлера-Фано, так й новому в атомній спектроскопії каналу реорієнтаційного типу або по обидва одночасно, а також отримані дані по загальним радіаційним ширинам для станів $4f_j^{-1}6s_{1/2}(J')n_R l_R j_R[\text{J}]$ (j, J', j_R, J)=1/2-5/2. Здобувачем показано, що дані нової теорії, у порівнянні з відомим методами значно краще узгоджуються з експериментальними даними.

У **четвертому розділі** Здобувачем розвинуто новий послідовний релятивістський підхід до розрахунку спектрів та спектроскопічних характеристик важких каонних атомних систем на основі рівняння Клейна-Гордона-Фока з одночасним врахуванням електромагнітної та сильної каон-ядерної взаємодій з використанням модифікованого методу оптичного потенціалу. Детально описані процедури прецизійного

урахування релятивістських, ядерних ефектів (у т.ч. ефект Breit-Rosenthal-Crawford-Schawlow), радіаційних КЕД поправок (зокрема, поправка на поляризацію вакууму, власно-енергетичної частини лембівського зсуву, поправки вищих порядків, у тому числі, Källén-Sabry порядку $\alpha^2(\alpha Z)$ та Wichmann-Kroll порядку $\alpha(Z\alpha)^n$, $n=3$), а також ефектів екранування за рахунок наявності електронних оболонок. Виконано докладні розрахунки електромагнітних внесків в енергії ряду переходів каонного азоту, а також в енергію переходу $12o \rightarrow 11n$ в спектрі каонного свинцю. Важливо відзначити висновок, що найбільший внесок в енергію переходу визначається основним кулонівським членом, а внесок радіаційних поправок, зокрема, поправки за рахунок поляризації вакууму суттєво впливає на точність визначення відповідної енергії переходу.

У **п'ятому розділі** дисертації продемонстровано результати розрахунку характеристик β -розпаду атомних систем (ядер) з використанням нового формалізму релятивістської калібрувально-інваріантної ТЗ RMBPT з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням ODF. В рамках представленої теорії проведено розрахунки характеристик цілого ряду дозволених (понад дозволених) β -розпадів. Також в даному розділі Здобувачем було розглянуто вплив урахування обмінних, а також кореляційних ефектів в електронних хвильових функціях на значення функції Фермі та інтегральної функції Фермі. Аналіз даних, проведений дисертантом, показав, що із збільшенням повноти урахування обмінних (обмінно-кореляційних) ефектів у хвильових функціях дискретного та неперервного спектру поправка на енергію зростає із зменшенням граничної енергії, зокрема для переходу $^{241}\text{Pu} \rightarrow ^{241}\text{Am}$ відносна зміна інтегральної функції Фермі становить 7,6%. Роботу завершує розділ «висновки» і розділ список джерел.

Наукова новизна положень, результатів та висновків роботи. Розвинені в даній роботі вперше в теоретичній атомній оптиці та спектроскопії принципово нові підходи і отримані на їх основі, в переважній більшості із спектроскопічною точністю вперше, оригінальні наукові результати в сукупності закладають основи нового наукового напрямку в сучасній теоретичній оптиці і спектроскопії важких атомних систем - релятивістської теоретичної спектроскопії важких звичайних багатоелектронних, а також екзотичних адронних (каонних) систем з одночасним прецизійним урахуванням ядерних, радіаційних, обмінно-кореляційних ефектів в рамках калібрувально-інваріантної релятивістської багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням та узагальненому енергетичному підході. Отримані Здобувачем у більшості випадків вперше основні результати і висновки є новими, пріоритет здобувача чітко засвідчено у 34 публікаціях у вітчизняних та зарубіжних фахових виданнях.

Ступінь обґрунтованості наукових результатів, висновків та їх достовірність. Рівень достовірності та обґрунтованості розвинутих Здобувачем нової теорії та методів обчислення характеристик важких

атомів забезпечується, насамперед, досить добрим узгодженням даних тестових прецизійних теоретичних обчислень для низки добре вивчених спектральних ліній досліджених атомів та високоточних даних експерименту, а також використанням сучасних і послідовних методів атомної спектроскопії, квантової механіки та квантової електродинаміки, релятивістської квантової теорії поля, та нових запропонованих Здобувачем коректних теорій. Крім того, матеріали, покладені в основу дисертації, апробовані на визнаних в нашій країні та світі наукових конференціях, а також опубліковані у відомих фахових виданнях

Практичне значення роботи є очевидним. Представлені в дисертаційній роботі нові оригінальні підходи та методи мають практичне значення з точки зору їх використання для подальшого вивчення багатоелектронних атомів та іонів, так як вони дозволяють отримувати більш точну та адекватну інформацію. В плані корисності спектральних результатів, які були отримані у роботі, перспективними напрямками їх використання є: численні фізичні теоретичні та прикладні застосування, зокрема, для розв'язання різноманітних астрофізичних задач, у тому числі, вивчення характеристик лазерної, термоядерної, астрофізичної плазми, досліджень з керованого термоядерного синтезу, і насамперед, побудови нових ефективних технологій діагностики термоядерної плазми, лазерної, лабораторної плазми, плазми токамака .

Зауваження до дисертації. Дисертаційна робота вражає і низкою нових теоретично послідовних методів і значною кількістю дійсно нових результатів, і у цьому сенсі нижче наведені зауваження мають частковий, редакційний характер і ні в якій мірі не чіпають основних положень безумовно нової роботи. До зауважень можна віднести таке:

1. У розділі I здобувач надає досить докладний огляд авжеж найбільш вагомих теоретичних та експериментальних досягнень авжеж в галузі спектроскопії важких атомів, а також екзотичних адронних систем, концентруючи увагу як на релятивістських, так й радіаційних ефектах. Дуже корисною представляється таблиця 1.1, де представлені фізичні ефекти, що дають внесок в загальну енергію і порядки їх величини. Ймовірно в таблиці треба було б докладніше пояснити порядок вищих КЕД поправок, у т.ч. поправки Källén-Sabry та Wichmann-Kroll.

2. У розділі II роботи при викладенні побудованої здобувачем процедури обчислення енергій та ширин рідбергівських резонансів розглянуті ефективні схеми урахування багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів шляхом доповнення уявної частини потенціалу взаємодії додатковими обмінно-поляризаційними операторами типу (2.59)- (2.61). В цьому місці розумно було б надати більш докладне пояснення їх вибору й виводу, а також більш докладний коментар щодо переваг використаних функціоналів, наприклад, над відомими в атомній теорії функціоналами типу Далгарно, а також перед функціоналом (формула (2.13), який відображає локальний потенціал. До речі, їх використання в теорії опису характеристик рідбергівських станів важких атомів є

безперечно новим елементом теорії, на що треба було б вказати. Крім того, формули (2.55)-(2.57) у підрозділі 2.2.5, варто було б пояснити більш докладно.

3. В розділі III в табл. 3.13 (стор.154) здобувач наводить свої нові дані по силам осциляторів ряду переходів в спектрі атома EuI і дає цілком коректний коментар щодо точності відповідних даних, насамперед, з точки зору використання відповідних калібрувань фотонного пропатора у матричних елементах радіаційного переходу з мінімізацією калібрувально-інваріантного внесок. Здається, що тут доречним було б більш докладне виявлення різниці кількісних даних по кожній калібровці, як це коректно здобувачем зроблено для інших атомів. Як з цієї точки зору виглядає ситуація у класичних методах атомної фізики типу релятивістського методу Хартрі-Фока або неоптимізованого багатоконфігураційного методу Дірака-Фока. Це ж стосується і переходу у свинцю (лінія 12789 Å), який розглянуто у підр. 3.2.4, і для якого наведені блискучий результат здобувачу та альтернативні дані, зокрема, звичайної багато-конфігураційної теорії Дірака-Фока. Очевидно, дуже корисним був би відповідний кількісний аналіз.

4. В розділі IV здобувач наводить дуже цікаві й напевно нові дані щодо енергетичних, радіаційних параметрів важких каонних атомів, у т.ч., вольфраму ^{184}W , свинцю ^{207}Pb , урану ^{238}U з прецизійним урахуванням радіаційних і ядерних ефектів. В цьому місці розумно було б надати більш докладне пояснення вибору саме цих, а не інших атомів.

5. Редакційні зауваження. Авжеж робота перевантажена аббревіатурами, особливо англійськими. Деякі параметри в роботі визначаються декілька разів, напр., стала тонкої структури. Використано декілька систем фізичних одиниць.

Висновок: Дисертаційна робота Терновського В.Б., подана на здобуття ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.05 – оптика, лазерна фізика, повністю відповідає паспорту спеціальності. Вона є завершеною самостійною науковою працею, в якій вперше отримані нові науково обґрунтовані результати, які в сукупності вирішують важливу і актуальну проблему сучасної оптики і спектроскопії важких атомів - розроблення теоретичних основ нової прецизійної релятивістської спектроскопії важких звичайних багатоелектронних та екзотичних каонних систем з одночасним коректним урахуванням ядерних, радіаційних, обмінно-кореляційних ефектів. Розвинені в даній роботі вперше в теоретичній атомній оптиці та спектроскопії принципово нові підходи і отримані на їх основі в переважній більшості із спектроскопічною точністю вперше оригінальні наукові результати в сукупності закладають основи нового наукового напрямку в сучасній теоретичній оптиці і спектроскопії важких атомних систем. Результати, за якими було захищено кандидатську дисертацію, не входять до поданої дисертації. Реферат повністю відображає зміст дисертації.

За обсягом проведених досліджень, актуальністю, ступенем обґрунтованості наукових положень і висновків, їх новизною та достовірністю, повнотою викладання, значимістю для науки дисертація Терновського Валентина Борисовича «Релятивістська спектроскопія важких атомів з урахуванням обмінно-кореляційних та радіаційних ефектів» повністю відповідає вимогам пунктів 9, 10, 12-14 «Порядку присудження наукових ступенів», затвердженого Постановою Кабінету Міністрів від 24.07.2013 р. №567 (плюс наказу МОН України від 12.01.2017 р. № 40 щодо оформлення дисертацій), а здобувачу без сумніву може бути присуджений науковий ступень доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.05 – оптика та лазерна фізика (104- Фізика та астрономія).

**Офіційний опонент:
Професор кафедри фінансів,
банківської справи та страхування
Одеського національного
університету ім. І.І. Мечникова
доктор фіз.-мат. наук, професор**

Тюрін О.В.

Підпис професора Тюріна Олександра Валентиновича засвідчую:

Вчений секретар ОНУ ім. І.І. Мечникова



Курандо С.В.