

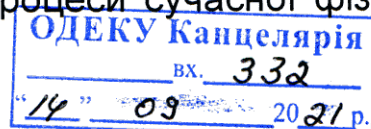
ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу
Ігнатенко Ганни Володимирівни «Теоретична спектроскопія та динаміка молекулярних систем у вільному стані та в зовнішньому електромагнітному полі з урахуванням ефектів хаосу», яка подана на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.05 – «Оптика і лазерна фізика»

Актуальність теми. В останні роки в оптиці та спектроскопії молекулярних систем спостерігається справжній суттєвий прогрес, пов'язаний як з цілою низкою відомих фундаментальних теоретичних досягнень, так й з розвитком нових експериментальних технологій. Широке використання прискорювачів, колайдерів важких іонів, джерел синхротронного випромінювання, нейтронних джерел та ін. відкриває принципово нові можливості у сучасній оптиці та спектроскопії молекул, особливо спектроскопії молекул у зовнішньому електромагнітному полі. З іншого боку, необхідність дослідження все більш енергетичних процесів в задачах оптики та спектроскопії молекул як у вільному стані, так й у зовнішньому електромагнітному полі стимулює розвиток нових теоретичних методів, які враховують нові фізичні ефекти та особливості.

В останні роки суттєво виріс інтерес до прецизійного розрахунку як стандартних енергетичних та спектроскопічних характеристик молекул (потенціалі іонізації та збудження, спектри збуджених станів, потенціальні енергетичні криві, спектроскопічні молекулярні сталі, дипольні моменти, параметри коливальної та ротаційної структури спектрів тощо), так і принципово нових характеристик, які описують нові явища і ефекти за участю суттєво багатоелектронних атомних та/або молекулярних систем у зовнішньому електромагнітному полі, у тому числі, характеристики оптичного хаосу, ймовірності так званих кооперативних е-гамма-коливально-ротаційно-ядерних переходів при гамма випромінюванні й поглинанні ядра в молекулах, взагалі, як повільних, так і швидких, як низько-, так і високо-енергетичних процесів за участю електронів, фотонів, молекул.

Відкриття і інтенсивне експериментальне дослідження цілої низки нових нелінійно-оптичних явищ, обумовлених високоенергетичною взаємодією молекулярних систем із зовнішнім електромагнітним полем, а також традиційні потреби прецизійних спектральних даних для молекул різноманітних фізичних додатків зокрема з оптики і спектроскопії, фізики плазми та астрофізики, лазерної фізики та квантової електроніки стимулює розвиток нових, прецизійних методів опису характеристик різноманітних молекул. Між тим, сучасний рівень розвитку теорії, навіть з урахуванням досягнень останніх років, не дозволяє адекватно, з високою точністю описувати вище вказані нові ефекти та процеси сучасної фізики,



тому не має сумніву, що актуальність теми дисертації Ігнатенко Г.В. є очевидно безпрецедентно високою.

Зв'язок з науковими програмами, пріоритетними напрямками розвитку техніки. Дослідження, виконані в роботі, увійшли до планів НДР ОДЕКУ “Розвиток та застосування кібернетичних методів до дослідження динаміки ієрархічних хаотичних процесів у квантових, інформаційних системах” (№ держр.0111U000332), “Розвиток і застосування нових квантово-механічних і КЕД методів в задачах обчислювальної математики та математичної фізики, теорії ядра і частинок, квантовій геометрії” (№ держр. 0109U000348), “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. 0116U0020 97, 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), а також деяких проектів фундаментальних досліджень МОН України.

Зміст дисертації. Дисертація Ігнатенко Г.В. містить вступ, шість розділів, основні результати та висновки і список використаних літературних джерел.

В першому розділі наданий огляд методів сучасної теоретичної оптики та спектроскопії молекул, наведено аналіз основних найбільш потужних методів розрахунку енергетичних та спектроскопічних характеристик молекул, у тому числі, потенційних кривих енергії, молекулярних сталей, параметрів коливальної структури фотоелектронних спектрів, а також характеристик кооперативних переходів в спектрах молекул, проаналізовані їх переваги, а також вказані основні недоліки.

У другому розділі розроблено принципово новий комбінований теоретичний підхід до розрахунку електронної структури молекул, енергетичних та спектроскопічних характеристик, коливальної структури в фотоелектронних спектрах молекул, який об'єднує стандартному формалізмі методу функцій Гріну (з використанням техніки фейнманівських діаграм) та квазічастинкову теорію функціоналу густини в фермірідинній версії. Також розроблений новий метод опису коливальної структури фотоелектронних спектрів молекул.

У третьому розділі розроблено принципово новий формально точний метод багаточастинкової теорії збурень типу Релея-Шредінгера з оптимізованим квазічастинковим наближенням функціоналу густини. 3

використанням техніки фейнманівських діаграм проведено докладний аналіз поправок першого, другого та вищих порядків теорії збурень та запропоновані ефективні процедури їх урахування з використанням багаточастинкових функціоналів.

В четвертому розділі наведені результати розрахунків низки енергетичних та спектроскопічних характеристик з метою тестування базисів деяких атомних систем (напр., Na-подібних атомних іонів, атомів лужних елементів та благородних газів) та набору основних енергетичних та спектроскопічних характеристик (у тому числі, енергій зв'язку, вертикальних потенціалів іонізації, спектроскопічних факторів, констант зв'язку та коливальної структури фотоелектронних спектрів, молекулярних сталих тощо) для низки молекулярних систем (напр., C_2 , N_2 , F_2 , HF , димерів інертних газів та благородних газів тощо).

В п'ятому розділі розроблено новий квантово-механічний підхід до опису так званих кооперативних електрон-гамма-коливально-ротаційно-ядерних переходів у спектрах молекул, яка узагальнює якісні моделі гармонічного осцилятора та наближення модельного потенціалу. Підхід базується на квазічастинковій теорії функціоналу густини для опису електронної структури молекул та міжатомного потенціалу. Також в розділі наведені результати розрахунків ймовірностей електрон-гамма-коливально-ротаційно-ядерних переходів у спектрах низки молекул, зокрема, $H^{127}I$, $H^{79}Br$, димерів лужних атомів, OsO_4 , IrO_4 .

У шостому розділі розроблено вперше новий неемпіричний підхід до обчислення енергетичних та поляризаційних характеристик двоатомних молекул в інтенсивному електромагнітному полі, а також новий метод моделювання, прогнозування часових рядів поляризаційних та інших характеристик молекул з використанням відомих методів теорії хаосу та теорії динамічних класичних систем, та нової квантово-динамічної моделі молекул у полі. Наведені результати розрахунків низки енергетичних, поляризаційних характеристик для молекул ZrO , PbO , GeO , в лінійно поляризованому електромагнітному полі досить високої інтенсивності і вперше виявлено феномен оптичного хаосу в часових рядах поляризації. Роботу завершує розділ «висновки» і розділ списку використаних джерел.

Наукова новизна положень, результатів та висновків роботи пов'язана з розвитком нового напрямку у сучасній теоретичній оптиці та спектроскопії молекул, зокрема, прецизійної теоретичної нелінійної спектроскопії молекулярних систем з урахуванням ефектів кооперативних електрон-гама-ядерних переходів, оптичного хаосу при наявності додаткового інтенсивного зовнішнього електромагнітного поля.

Здобувачем вперше розроблено принципово новий комбінований теоретичний підхід до розрахунку електронної структури молекул, енергетичних та спектроскопічних характеристик, коливальної структури в фотоелектронних спектрах, який об'єднує формалізм функцій Гріну (з

використанням техніки фейнманівських діаграм) та квазічастинкову теорію функціоналу густини в фермі-рідинній версії, а також новий формально точний метод багаточастинкової теорії збурень типу Релея-Шредінгеру з оптимізованим квазічастинковим наближенням функціоналу густини та на їх основі отримані нові дані щодо енергетичних та спектроскопічних характеристик двоатомних молекул, зокрема, димерів лужних атомів та благородних газів тощо.

Розроблено новий квантово-механічний підхід до опису так званих кооперативних електрон-гамма-коливально-ротаційно-ядерних переходів у спектрах молекул та вперше із спектроскопічною точністю отримані дані щодо ймовірностей кооперативних переходів у спектрах низки молекул, зокрема, H^{127}I , H^{79}Br , димерів лужних атомів, OsO_4 , IrO_4 .

Розроблено вперше новий неемпіричний підхід до обчислення енергетичних та поляризаційних характеристик двоатомних молекул в інтенсивному електромагнітному полі, вперше наведені з високою точністю дані для поляризаційних та динамічних характеристик низки молекул ZrO , PbO , GeO в лінійно поляризованому електромагнітному полі з виявленням феномену оптичного хаосу в часових рядах поляризації, що є принципово новим й важливим результатом.

Ступінь обґрунтованості наукових результатів, висновків та їх достовірність. Рівень достовірності та обґрунтованості розвинутих здобувачем нових теорії та методів обчислення енергетичних, поляризаційних, спектроскопічних характеристик двоатомних та багатоатомних молекул у вільному стані, а також зовнішньому лінійно поляризованому електромагнітному полі забезпечений, насамперед, досить добрим узгодженням даних тестових прецизійних розрахунків для низки добре вивчених молекул типу молекул азоту, кисню, фтору та високоточних даних експерименту, а також використанням найсучасніших і послідовних методів квантової теорії поля, квантової механіки та квантової електродинаміки, атомно-молекулярної оптики та спектроскопії, та авжеж нових послідовних та досить коректних методів, розроблених безпосередньо здобувачем.

Практичне значення. Практичне значення роботи є очевидно вкрай великим особливо в плані використання нових методів енергетичних, поляризаційних, спектроскопічних характеристик двоатомних та багатоатомних молекул у вільному стані, а також зовнішньому лінійно поляризованому електромагнітному полі у багаточисленних фізичних теоретичних та прикладних застосуваннях, зокрема, для розв'язання задач у сучасній атомній і молекулярній оптиці і спектроскопії, лазерній, разерній та гразерній фізиці й квантовій електроніці, астрофізиці й астроспектроскопії, фізиці зіткнень, плазмохімії тощо. Нові прецизійні дані щодо характеристик кооперативних гамма-коливально-ротаційно-ядерних переходів можуть бути корисні при розробці нових оптико-спектроскопічних технологій. На кінець, уявляється доречним вказати на нові можливості у створенні та передбаченні властивостей нових гібридних молекулярних

систем, нових оптичних та спектральних явищ та ефектів в молекулярній оптиці та спектроскопії, індукованих зовнішнім лазерним (разерним, гразерним) випромінюванням тощо.

Зауваження до дисертації. Слід зазначити, що дисертаційна робота Ігнатенко Г.В. вражає і низкою нових теоретично послідовних підходів і значною кількістю дійсно нових спектроскопічних результатів, і у цьому сенсі нижче наведені зауваження мають частковий, редакційний характер і ні в якій мірі не чіпають основних положень безумовно цікавої і нової роботи.

До зауважень можна віднести таке:

1. У першому розділі роботи здобувачем наданий досить докладний огляд авжеж найбільш потужних теоретичних методів в сучасній молекулярній оптиці та спектроскопії, зокрема, квантовій теорії молекулярних систем. Тому, на мій погляд, здобувачу слід було б надати хоча б короткі коментарі стосовно сучасних експериментальних технологій дослідження з енергетичних, поляризаційних, спектроскопічних характеристик двоатомних та багатоатомних молекул у вільному стані, а також зовнішньому лінійно поляризованому електромагнітному полі. Зрозуміло, робота є виключно теоретичною, але сказане щодо експерименту є також важливим аспектом.
2. У другому розділі роботи при викладенні нового формалізму в спектроскопії молекул на основі методу функцій Гріну та теорії функціоналу густини здобувач докладно розробляє ефективні процедури прецизійного урахування складних обмінно-кореляційних ефектів, у тому числі, ефектів поляризаційної взаємодії, екранування валентних квазічастинок, енергетичної залежності масового оператора квазічастинок тощо. У подальшому для кожної молекулярної системи та в принципі задачі проводиться аналіз значення відповідних ефектів. На мій погляд, цілком доречним тут було б більш докладне пояснення співвідношення вказаних обмінно-кореляційних ефектів між собою особливо при розрахунках енергетичних характеристик.
3. У другому розділі здобувач вводить у розгляд обмінно-кореляційний потенціал, який складається з кореляційного потенціалу типу Гуннарссона-Лундквіста та відомого обмінного потенціалу Кона-Шема. Цілком доречним тут було б більш докладне пояснення вибору саме такої форми обмінно-кореляційного функціоналу, тим паче, що у сучасній теорії функціоналу густини є можливість вибору досить значної кількості обмінно-кореляційних функціоналів густини з певними перевагами та недоліками. Це ж стосується й так званого двочастинкового поляризаційного функціоналу.
4. В третьому розділі здобувач узагальнює розвинуту теорію збурень на релятивістський випадок за рахунок урахування релятивістських поправок в наближенні Брейта-Паулі. Тут цілком доречними є питання щодо мотивації вибору саме цього наближення для релятивістського узагаль-

нення теорії збурень для двоатомних молекул, і додатково щодо переваг версії здобувача по відношенню до існуючих методів.

5. Здобувач у четвертому розділі наводить свої тестові (очевидно, мова йде про тест на якість базисів хвильових функцій) результати по силам осциляторів для переходів $3s-3p$, $3p-3d$ в Na-подібних атомних іонах SVI , $CIVII$, дипольних матричних елементам для атомів лужних елементів. Цікаво було б узнати точку зору здобувача щодо величин так званих калібрувально-неінваріантних внесків. Також цікаво точка зору здобувача щодо значення цієї групи питань в сучасній спектроскопії молекул.

6. В п'ятому розділі здобувач приводить дуже важливі й цікаві результати щодо ймовірностей так званих кооперативних електрон-гамма-коливально-ротаційно-ядерних переходів у спектрах низки молекул, зокрема, $H^{127}I$, $H^{79}Br$, димерів лужних атомів, OsO_4 , IrO_4 . Слід констатувати, що представлені результати мають величезне теоретичне та практичне значення. Але, цілком доречним є питання мотивації вибору наведених вище молекул, а не інших. Автоматично виникає питання до здобувача щодо пошуку так званих оптимальних кандидатів, для яких кооперативні ефекти можуть проявлятися найбільш яскраво й до того ж допускають надійну експериментальну перевірку.

Використання результатів дисертації. Результати дисертації Ігнатенко Г.В. слід рекомендувати для використання у наукових дослідженнях університетів, науково-дослідних інститутів Міністерства освіти та науки України, Національної академії наук України, а організацій і підприємств, де вивчають проблеми фізики е-іон-атомних зіткнень, фізики плазми, молекулярної оптики і спектроскопії, лазерної, разерної, гразерної фізики, квантової електроніки тощо.

Висновок: Дисертаційна робота Ігнатенко Ганни Володимирівни є безумовно новою, докладно та ретельно обґрунтованою завершеною науковою роботою, в якій розвинуто низку принципово нових теоретичних підходів до визначення та у багатьох випадків передбачення фундаментальних енергетичних, поляризаційних та спектроскопічних характеристик молекул, розроблені теоретичні основи нового наукового напрямку, а саме прецизійної теоретичної нелінійної спектроскопії молекулярних систем з урахуванням ефектів кооперативних електрон-гама-ядерних переходів, оптичного хаосу при наявності додаткового інтенсивного зовнішнього електромагнітного поля.

Основні положення дисертації Ігнатенко Ганни Володимирівни досить докладно та повно відображені в значній кількості публікацій у всесвітньо відомих міжнародних наукових журналах, а також тезах та матеріалах доповідей на провідних міжнародних конференціях, конгресах, школах по атомній та молекулярній оптиці та спектроскопії, квантичній механіці молекул, лазерній фізиці тощо. Реферат дисертації цілком відповідає її змісту.

Я вважаю, що дисертація Ігнатенко Ганни Володимирівни «Теоретична спектроскопія та динаміка молекулярних систем у вільному стані та в зовнішньому електромагнітному полі з урахуванням ефектів хаосу» задовольняє всім вимогам до дисертацій на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук, зокрема, пунктам пп. 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.