

ВІДГУК

**офіційного опонента на дисертаційну роботу
Ігнатенко Ганни Володимирівни «Теоретична спектроскопія та
динаміка молекулярних систем у вільному стані та в зовнішньо-
му електромагнітному полі з урахуванням ефектів хаосу», яка
представлена на здобуття наукового ступеня доктора фізико-
математичних наук за спец.01.04.05 – оптика, лазерна фізика.**

Дисертаційна робота Ігнатенко Ганни Володимирівни присвята на розв'язанню комплексу дуже актуальних, досить престижних та складних задач сучасної теоретичної оптики та спектроскопії, а саме розробці теоретичних основ нової спектроскопії та нелінійної динаміки молекулярних систем з урахуванням ефектів детерміністичного хаосу для молекул в інтенсивному лінійно поляризованому зовнішньому полі, кооперативних електрон-гамма-коливально-ротаційно-ядерних переходів в спектрах молекул та накінець ефектів міжелектронних кореляцій.

Актуальність такої тематики дослідження зумовлена багатьма факторами, пов'язаними як з розвитком нових напрямків у сучасній оптиці та спектроскопії молекул внаслідок можливостей вивчення все більш енергетичних процесів за участю багатьох частинок одночасно, скажемо електронів, фотонів, іонів та молекул. Тут же слід зазначити незадовільний по багатьох критеріях рівень розвитку сучасної теорії опису енергетичних, радіаційних та поляризаційних властивостей для широкого кола молекулярних систем, особливо таких що відносяться до важких систем, внаслідок проблем, пов'язаних із якістю базисів електронних орбіталей, коректним урахуванням багаточастинкових обмінно-кореляційних ефектів. Авжеж величезний інтерес до вивчення властивостей молекул стимулюється потребами широкого кола прикладних додатків, у т.ч., в атомній, молекулярній спектроскопії, квантовій оптиці, електроніці, фізиці плазми, фізиці зіткнень, в діагностиці різноманітних плазмових та атмосферних середовищ тощо. По-третє, слід нагадати й про нові перспективні можливості подальшого розвитку нових підходів у передбаченні властивостей гібридних молекулярних систем, відкритті нових особливостей елементарних атомно-молекулярних процесів, нових оптичних та спектральних явищ та ефектів на стику молекулярної оптики та спектроскопії і фізики ядра, лазерної фізики тощо. В світлі сказаного, уявляється очевидним, що обрана дисертантом Ігнатенко Г.В. тема дисертації є, без сумніву, актуальною й затребуваною.

Зв'язок з науковими програмами, планами, темами. У дисертації наведено результати досліджень, виконаних дисертантом самостійно. Базовими для підготовки та подання дисертаційної роботи були НДР ОДЕКУ та МОН України: НДР "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

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), "Розвиток та застосування нових обчислювальних методів в задачах математичної фізики, теорії ядра та адронних атомів, квантової геометрії" (№ держр. 0114U005145), "Розвиток та застосування нових методів обчислювальної математики, математичної фізики в задачах теоретичної квантової оптики, атомної, молекулярної спектроскопії", № держр. 0116U002097), а також ряду проектів фундаментальних досліджень МОН України: "Прогнозування стану і безпеки навколишнього середовища з урахуванням антропогенного, радіоактивного забруднення, радіаційно-екологічних наслідків аварій на АЕС: Нові моделі і технології" (№ держр. 0115U000632) та інші.

Основний зміст дисертації. Представлена дисертація складається зі вступу, шести розділів, висновків і переліку використаних джерел, а також анотацій українською та англійською мовами. У **вступі** обґрунтовано актуальність, чітко сформульовано мету, завдання досліджень, які було виконано. Акцентую увагу на науковій новизні роботи, яка складається з одинадцяти пунктів. **Перший розділ** є цілком оглядовим, в ньому дано детальний і ґрунтовний аналіз теоретичних методів розрахунку енергетичних, радіаційних поляризаційних та спектроскопічних властивостей багатоелектронних двоатомних молекул. Показано, що існуючі найбільш послідовні методи урахування обмінно-кореляційних ефектів в деяких задачах теорії молекул не дозволяють отримати спектральну інформацію із необхідною точністю. **Другий розділ** є найбільш важливим розділом дисертації, який містить низку принципово нових методів, зокрема, розвиваються квазічастинкові версії відомого в теорії багатьох тіл методу функцій Гріну та узагальнена квазічастинкова фермі-рідинна версія теорії функціоналу густини. Комбінація перелічених двох методів у сукупності лежить в основі принципово нового кооперативного підходу до визначення енергетичних, радіаційних, поляризаційних властивостей багатоелектронних двоатомних молекул, коливальної структури фотоелектронних спектрів молекул, спектроскопічних факторів і т.і. **Третій розділ** містить основи нового теоретичного методу визначення властивостей двоатомних молекул який базується на новій версії апарату багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим квазічастинковим фермі-рідинним наближенням функціоналу густини. Базовими квантовими рівняннями теорії виступають узагальнені рівняння Кона-Шема із врахованою неявно енергетичною залежністю масового оператора квазічастинок. **Четвертий розділ** містить як тестові, так й вперше отримані із спектроскопічною точністю нові дані по спектроскопії двоатомних молекул. Дисертант застосовує новий комбінований метод функцій Гріна та квазічастинкової теорії функціоналу густини, а також формалізм теорії збурень з оптимізованим квазічастинковим фермі-

рідинним наближенням функціоналу густини для визначення міжатомних потенціалів, потенціальних кривих енергії, потенціалів іонізації та спектроскопічних факторів, енергій зв'язку, та накінець набору стандартних молекулярних сталих та інших характеристик для досить широкого кола молекул, зокрема, C_2 , N_2 , O_2 , F_2 , а також димерів інертних газів Ar , Kr , Xe , лужних елементів Na , Rb , Cs та інших систем. **П'ятий розділ** дисертації присвячений розробці нового підходу до визначення енергетичних та спектроскопічних характеристик кооперативних електрон-гамма-коливально-ядерних переходів у спектрах двоатомних та п'ятиатомних молекул. Розвинутий підхід узагальнює спрощену модель гармонічного осцилятора Letokhov-Ivanov-Minogin й модель на основі модельного потенціалу Glushkov та інш. В основі методу лежить стандартний квантовий амплітудний підхід до визначення енергій та радіаційних характеристик спектрів γ -випромінювання і поглинання важкими ядрами в серії молекул, зокрема, $H^{127}I$, $H^{79}Br$ димерах лужних атомів, а також п'ятиатомних системах OsO_4 та IrO_4 . **Шостий розділ** дисертації містить, по-перше, новий ефективний метод визначення енергетичних та поляризаційних властивостей двоатомних молекул в зовнішньому спеціальному лінійно поляризованому інтенсивному електромагнітному полі, який базується на чисельному розв'язанні залежного від часу рівняння Шредінгера з потенціалом двоатомної молекули, розрахованим у наближенні функціоналу густини. По-друге, розділ містить версію здобувача щодо моделювання і прогнозування часових рядів поляризаційних властивостей молекул на основі методів теорії динамічних систем та хаосу, зокрема, тесту Gottwald-Melbourne, методу кореляційного інтегралу, алгоритмів середньої взаємної інформації, хибних найближчих сусідів, методів аналізу на основі показників Ляпунова, ентропії Колмогорова, плюс нових моделей нелінійного прогнозу з використанням на основі B-сплайнових апроксимацій. Наведені також результати визначення деяких параметрів серій молекул і вперше відкрито явище квантового хаосу в часових серіях поляризації для молекул ZrO , PbO .

Наукова новизна одержаних результатів. Всі результати, які виносяться на захист, є новими і базуються на своєчасно опублікованих дисертантом наукових працях в провідних світових і вітчизняних фахових виданнях. Треба відзначити, що дисертантом дисертації отримано цілий ряд принципово нових результатів і наукових положень, чітко сформульованих у висновках. Головними, найбільш пріоритетними результатами є такі: 1). Вперше розроблено новий ефективний метод визначення енергетичних, радіаційних, поляризаційних, спектроскопічних властивостей молекул, параметрів коливальної структури фотоелектронних спектрів молекул на основі квазічастинкової версії відомого в теорії багатьох тіл методу функцій Гріну та узагальненої квазічастинкової фермі-рідинної версії теорії функціоналу густини.

2). Вперше розроблено новий ефективний метод визначення енергетичних, радіаційних, поляризаційних, спектроскопічних влас-

тивостей молекул на основі ефективної нової версії апарату багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим квазічастинковим фермі-рідинним наближенням функціоналу густини і на його основі вперше із спектроскопічною точністю дані для міжатомних потенціалів, потенціалів іонізації та спектроскопічних факторів, енергій зв'язку, та накінець набору стандартних молекулярних сталих та інших характеристик для досить широкого кола молекул, зокрема, C_2 , N_2 , O_2 , F_2 , а також димерів інертних газів Ar , Kr , Xe , лужних елементів Na , Rb , Cs та

3). Розвинуто новий підхід до визначення енергетичних та спектроскопічних характеристик кооперативних електрон-гамма-коливально-ядерних переходів у спектрах двоатомних та п'ятиатомних молекул, який базується на теорії функціоналу густини, і вперше виконані обчислення спектрів гамма-випромінювання і поглинання важкими ядрами для серії молекул, зокрема, $H^{127}I$, $H^{79}Br$, димерів лужних атомів, п'ятиатомних систем OsO_4 та IrO_4 .

4). Розвинуто новий підхід до визначення енергетичних властивостей двоатомних молекул в зовнішньому лінійно поляризованому інтенсивному електромагнітному полі, який базується на чисельному розв'язанні залежного від часу рівняння Шредингера з потенціалом двоатомної молекули, розрахованим у наближенні функціоналу густини, та нову версію методу визначення поляризаційних властивостей молекул на основі методів теорії динамічних систем та хаосу; вперше наведені також результати визначення поляризації для молекул ZrO , PbO , GeO , в лінійно поляризованому електромагнітному полі досить високої інтенсивності і вперше відкрито явище квантового хаосу в часових серіях поляризації для таких молекул як ZrO , PbO .

Ступень обґрунтованості наукових результатів, висновків та їх достовірності. Всі наукові результати та положення, які містяться в дисертаційній роботі, достатньо науково обґрунтовані, а отримані висновки є достовірними. Обґрунтованість досліджень та висновків, сформульованих у дисертаційній роботі, підтверджується виконанням досліджень із застосуванням відомих теоретичних та числових методів, коректним припущенням та постановкою завдань, збігом теоретичних і експериментальних даних по декотрим енергетичним та спектроскопічним властивостям досліджених двоатомних молекул, зокрема, молекул кисню, азоту та інших елементів, опублікуванням результатів роботи та їх обговоренням на наукових конференціях.

Практичне значення отриманих результатів полягає, насамперед, у тому, що одержані в роботі нові дані по енергетичним, поляризаційним, радіаційним параметрам низки двоатомних-та багатоатомних молекул можуть бути корисними при застосуванні у різноманітних додатках в атомній, лазерній, молекулярній спектроскопії, квантовій оптиці та електроніці, фізиці та хімії плазми, фізиці іон-атом-атомних зіткнень, в діагностиці різноманітних плазмових та атмосферних середовищ, де саме спектроскопічні методи залишаються найбільш надійними методами діагностики таких середовищ. Також, по-третє, слід нагадати й про нові перспективні можливості подальшого розвит-

ку нових підходів у створенні та передбаченні енергетичних, поляризаційних властивостей нових гібридних молекулярних систем, відкритті нових особливостей елементарних атомно-молекулярних процесів, нових оптичних та спектральних явищ та ефектів на стику молекулярної оптики та спектроскопії і фізики ядра, лазерної фізики тощо.

Зауваження до дисертації. До зауважень, які мають виключно частковий, редакційний характер, і ні в якій мірі не стосуються основних результатів, положень та висновків безумовно нової роботи можна віднести таке:

1. В підрозділі 2.3 дисертантом викладені основи квазічастинкової фермі-рідинної версії теорії функціоналу густини, причому одним із важливих положень теорії є використання густини v_2 , яка не має аналога в теорії типу Хартрі-Фока і з'являється внаслідок врахування енергетичної залежності масового оператора квазічастинки. У подальшій теорії виникає досить просте співвідношення між уявною частиною функції Гріну та спектроскопічним фактором. На мій погляд, дисертанту доречно було б більш докладно зупинитися на цих аспектах теорії, які безумовно до того ж є ще додатковими елементами новизни.

2. В розділі 3 дисертант розвиває нову версію формалізму теорії збурень з оптимізованим квазічастинковим наближенням функціоналу густини і оперує з базовим квантовим рівнянням руху фактично у вигляді узагальнених рівнянь Кона-Шема. Здається, було б доречно тут докладніше пояснити різницю між стандартними рівняннями Кона-Шема і рівняннями дисертанта.

3. Дуже важливими і цікавими результатами дисертанта його результати для спектроскопічних факторів для молекул димерів інертних газів Ar, Kr, Xe і відповідно дані аналізу щодо сильних кореляційних ефектів, можливої колективізації оболонок nd^2_g , наявності «тіньових» станів в молекулах, з якими відбувається сильне змішування. Подібні питання, наскільки мені відомо, вперше піднімаються в спектроскопії молекул. На мій погляд, дисертанту доречно було б більш докладно зупинитися на цих аспектах теорії

4. В розділі 4 дисертант приводить дані тестового розрахунку енергій зв'язку для молекул кисню, азоту, фтору й порівнює свої результати з даними, отриманими на основ розрахунку методами ДВ- X_α , ДВ- X_α (ПС). Дисертанту доречно було б більш докладно пояснити дані саме альтернативних підходів ДВ- X_α .

5. В розділі 4 наведені дані для енергій зв'язку в ряді молекул: результати даної роботи, а також для порівняння аналогічні експериментальні значення і дані обчислень на основі інших теорій на основі теореми Koopmans' плюс реорганізаційна поправка, а також методу multi-configuration electron propagator та інші. Здається, тут дисертанту доречно було б більш докладно зупинитися на альтернативних результатах, зокрема, прояснити фізичний зміст так званої реорганізаційної поправки та прояснити особливості «методу пропатора» з урахуванням взаємодії конфігурацій.

6. В розділі 6 при застосування методів теорії хаосу до дослідження часових серій для поляризації ряду молекул дисертантом приведені унікальні дані для деяких динамічних та топологічних інваріантів (у т.ч., кореляційної розмірності, розмірності вкладення, Каплана-Йорка, показників Ляпунова і т.і.). Представляє значний інтерес порівняння значень деяких інваріантів, розрахованим різними методами, напр., визначення розмірності вкладення на основі методу кореляційної розмірності та помилкових найближчих сусідніх точок. Дисертанту доречно було б більш докладно зупинитися на цих аспектах теорії

7. Редакційні або стилістичні недоліки. Дисертанту, можливо, варто було б більш стисло викладати деякі технічні аспекти методу функцій Гріна; деякі дані варто було б надати скоріше у графічній формі, ніж табличній.

Загальний висновок: Дисертаційна робота Ігнатенко Г.В. є завершеною науковою працею, яка містить нові науково обґрунтовані результати. В дисертації розв'язано важливу проблему сучасної оптики та спектроскопії молекул: розробку теоретичних основ нової спектроскопії та нелінійної динаміки молекулярних систем з урахуванням ефектів детерміністичного хаосу для молекул в інтенсивному лінійно поляризованому зовнішньому полі, кооперативних електрон- γ -коливально-ротаційно-ядерних переходів в спектрах молекул та накінець ефектів міжелектронних кореляцій, на основі формалізму комбінованої калібрувально-інваріантної релятивістської багаточастинкової теорії збурень з оптимізованим дірак-фоківським нульовим наближенням та узагальненого енергетичного підходу, нового ефективного релятивістського підходу до розрахунку параметрів β -розпаду (дозволенних переходів) важких систем в межах прецизійної кооперативної електронно- β -ядерної спектроскопії атомних систем. 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. Автореферат дисертації відповідає змісту роботи й повністю відображає всі результати, положення й висновки, що виносяться на захист.

Можна констатувати, що з точки зору актуальності, наукової новизни, теоретичної та практичної значущості, дисертаційна робота Ігнатенко Г.В. «Теоретична спектроскопія та динаміка молекулярних систем у вільному стані та в зовнішньому електромагнітному полі з урахуванням ефектів хаосу» безумовно відповідає вимогам пунктів 9,10,12-14 «Порядку присудження наукових ступенів», затвердженого Постановою Кабінету Міністрів від 24.07.2013 р. №567 і наказу МОН України від 12.01.2017 р. № 40 щодо оформлення дисертацій, а самому дисертанту, Ігнатенко Ганні Володимирівні безумовно може бути присуджений науковий ступінь доктора фізико-математичних наук за спец.01.04.05 – оптика, лазерна фізика.

Використання результатів роботи. Одержані в роботі нові наукові результати по енергетичним, радіаційним та спектроскопічним властивостям досліджених квантових систем можуть бути рекомендовані до використання у навчальній, науковій та науково-технічній діяльності провідних вітчизняних університетів та НДІ Міністерства освіти і науки України, Національної Академії наук України, а також науково-технічних установ, які спеціалізуються в оптиці і спектроскопії атомних та молекулярних систем і т.і.

Офіційний опонент:

професор кафедри технологічної та професійної освіти Південноукраїнського національного педагогічного університету ім. К.Д. Ушинського
доктор фіз.-мат. наук, професор

Усов В.В.

Підпис проф. Усова Валентина Валентиновича засвідчую:

