Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0521U101943

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-10-2021

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ігнатенко Ганна Володимирівна
2. Ignatenko Ganna Volodymyrivna

Кваліфікація: к. ф.-м. н., 01.04.05

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: доктор наук

Аспірантура/Докторантура: ні

Шифр наукової спеціальності: 01.04.05

Назва наукової спеціальності: Оптика, лазерна фізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 25-09-2021

Спеціальність за освітою: Прикладна математика

Місце роботи здобувача: Одеський державний екологічний університет

Код за ЄДРПОУ: 26134086

Місцезнаходження: вул. Львівська, буд. 15, м. Одеса, Одеська обл., 65016, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 41.090.03

Повне найменування юридичної особи: Одеський державний екологічний університет

Код за ЄДРПОУ: 26134086

Місцезнаходження: вул. Львівська, буд. 15, м. Одеса, Одеська обл., 65016, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної особи: Одеський державний екологічний університет

Код за ЄДРПОУ: 26134086

Місцезнаходження: вул. Львівська, буд. 15, м. Одеса, Одеська обл., 65016, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.29

Тема дисертації:

1. Теоретична спектроскопія та динаміка молекулярних систем у вільному стані та в зовнішньому електромагнітному полі з урахуванням ефектів хаосу

2. Theoretical spectroscopy and dynamics of molecular systems in the free state and in an external electromagnetic field with accounting for effects of chaos

Реферат/анотація:

1. Дисертація присвячена розробці основ теоретичної кооперативної спектроскопії та нелінійної квантової динаміки молекул у вільному стані та в інтенсивному зовнішньому електромагнітному полі з урахуванням ефектів кореляції, хаосу і кооперативних переходів. Розроблено новий підхід до розрахунку електронної структури, енергетичних та спектральних параметрів, коливальної структури у фотоелектронних спектрах молекул, який базується на стандартному формалізмі методу функцій Гріна та квазічастинковій теорії функціоналу густини (ФГ) з послідовним урахуванням обмінно-кореляційних ефектів, у т.ч., ефектів поляризаційної взаємодії, екранування, енергетичної залежності масового оператора квазічастинок тощо. Розроблено нову версію теорії збурень з оптимізованим нульовим наближенням ФГ із дотриманням принципу калібрувальної інваріантності та мінімізацією калібрувально-неінваріантного внеску обмінно-поляризаційних діаграм в радіаційні ширини. Представлені дані обчислень енергій зв'язку, спектроскопічних

факторів, потенціалів іонізації, констант зв'язку, коливальної структури фото-е спектрів для ряду двоатомних молекул C2, N2, O2, F2, CO, CH, HF, димерів інертних газів Ar , Kr, Xe. Аналіз даних вказує на наявність сильних кореляційних ефектів, можливу колективізацію оболонок, наявність "тіньових" станів у молекулах, з якими відбувається сильне перемішування і які передають силу початкового рівня «частина спектрофактора". Новий підхід у спектроскопії кооперативних e-□-коливально-обертально-ядерних переходів у спектрах молекул розроблено та базується на оптимізованій теорії ФГ. Представлені нові дані про ймовірності кооперативних переходів для молекул HI, HBr, RbCs, OsO4, IrO4. Розроблено новий неемпіричний підхід до розрахунку параметрів поляризації двоатомних молекул в інтенсивному електромагнітному полі. Квантово-динамічний формалізм адаптований до моделювання хаотичної динаміки молекул в електромагнітному полі за допомогою таких методів, як тест Готвальда-Мельбурна, метод кореляційного інтегралу, алгоритми середньої взаємної інформації, хибних найближчих сусідів, аналіз на основі показників Ляпунова , ентропії Колмогорова, алгоритми оптимізованих траєкторій, B-сплайнів тощо. Наведені нові дані про спектральні параметри, динамічні, топологічні інваріанти (кореляційна розмірність, розмірність Каплана-Йорка, показники Ляпунова, ентропія Колмогорова тощо) для молекул GeO, ZrO, PbO лінійно поляризоване поле інтенсивністю до 28 ГВт /см2 і вперше виявлено явище оптичного хаосу.

2. The dissertation is devoted to the development of the basics of theoretical cooperative spectroscopy and nonlinear quantum dynamics of molecular systems in the free state and in an intense external electromagnetic field, taking into account the effects of correlation, chaos and cooperative transitions. A new cooperative theoretical approach to the calculation of the electronic structure, energy and spectral parameters, vibrational structure in the photoelectron spectra of molecules is developed, which is based on the standard formalism of the Green's function method and the quasiparticle Fermi-liquid density functional theory with sequential calculation, exchange-correlation effects, including the effects of polarization interaction, shielding of valence quasiparticles, energy dependence of the mass operator of quasiparticles, etc. A new version of many-body perturbation theory has been developed with an optimized quasiparticle density functional zeroth approximation under the condition of maximum observance of fundamental gauge invariance principle and minimization of the contribution of gauge-noninvariant exchange-polarization diagrams. The results of calculations of bond energies, spectroscopic factors, vertical ionization potentials, coupling constants and vibrational structure of photoelectron spectra for series of diatomic molecules C2, N2, O2,F2, CO, CH, HF, as well as dimers of inert gases Ar, Kr, Xe are listed. Analysis of the obtained data indicates the presence of strong correlation effects, in particular, the possible collectivization of shells, the presence of "shadow" states in molecules with which there is strong mixing and which transmits the initial level force, "part of the spectrofactor". A new approach in the spectroscopy of cooperative e-□-vibrational-rotational-nuclear transitions in spectra of molecules is developed and based on an optimized density functional theory. New data for cooperative transitions probabilities for HI, HBr, RbCs, OsO4, IrO4 are presented. A new non-empirical approach to calculation of polarization parameters of diatomic molecules in an intense electromagnetic field is developed. It is adapted a quantum-dynamic formalism to model chaotic dynamics of molecules in the field using such methods as Gottwald-Melbourne test, method of correlation integral, algorithms for average mutual information, false nearest neighbors, the Lyapunov's exponents & Kolmogorov entropy analysis, algorithms of optimized trajectories, B-spline, etc. There are listed new data on spectral parameters, dynamic, topological invariants (correlation dimension, Kaplan-York dimension, Lyapunov's exponents, Kolmogorov entropy, etc.) for GeO, ZrO, PbO molecules in a linearly polarized field of intensity up to 28 GW /cm2 and phenomenon of optical chaos is discovered for the first time.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Свинаренко Андрій Андрійович
2. Svinarenko Andrey Andreevich

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.05

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Свинаренко Андрій Андрійович
2. Svinarenko Andriy Andriyovich

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.05

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Кондратенко Петро Олексійович
2. Kondratenko Petro Oleksiyovich

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.05

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Усов Валентин Валентинович
2. Usov Valentin Valentinovich

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.01

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Тюрін Олександр Валентинович
2. Tjurin Alexander Valentinovich

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.17

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради Свинаренко Андрій Андрійович

Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні Глушков Олександр Васильович

Відповідальний за підготовку облікових документів

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності Юрченко Т.А.