

ВІДГУК

офіційного опонента

про дисертаційну роботу **Демеша Шандора Шандоровича**

“Багатоатомні структури та потенціальне розсіювання електрона на молекулах”, представлену на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.04 – фізична електроніка

Дослідження процесів низькоенергетичного розсіювання електронів на багатоатомних молекулярних системах є дуже важливими для багатьох галузей сучасної науки і техніки. Теоретичний опис таких взаємодій суттєво розширює наші знання про перебіг багатьох процесів з перерозподілом частинок і, зокрема, процесів іонізації та дисоціації молекулярних систем електронним ударом. Специфіка розсіювання на молекулах, у порівнянні з атомами, полягає в багатоцентровості розподілу електронної густини та в необхідності врахування руху ядерної підсистеми. Дослідження таких квантовомеханічних систем є вкрай важливими і актуальними як для подальшого розвитку фізики електрон-молекулярних зіткнень, так і для різноманітних практичних застосувань у фізиці плазми, біофізиці, радіаційній медицині та астрофізиці.

Для теоретичного аналізу процесів розсіювання електронів на складних молекулярних системах необхідно використовувати методи, які враховують багатоцентровий характер розподілу електронної густини. Тому для визначення характеристик розсіювання (перерізів, швидкостей реакцій, парціальних фазових зсувів та амплітуд розсіювання) у дисертаційній роботі застосований метод оптичного потенціалу у наближенні незалежних атомів. При цьому складові оптичного потенціалу знайдені у рамках теорії вільного неоднорідного електронного газу з використанням різних версій теорії функціоналу густини. Для розрахунків енергетичного спектру молекул застосовуються першопринципні методи такі, як теорія функціоналу густини, теорія збурень та теорія зв'язаного кластера з використанням відповідних пакетів прикладних програм.

На актуальність обраної автором тематики дослідження вказує і її зв'язок з основними науковими напрямками діяльності інституту електронної фізики НАН України у рамках держбюджетних тем: “Вплив ефектів, зумовлених кореляційною взаємодією, на параметри збудження атомних, молекулярних систем та процесів розсіювання лептонів на них” (2009-2013 рр., № Держреєстрації 0109U001501); “Фізичні процеси і явища при взаємодії електронів і фотонів з речовиною в конденсованому і газовому станах” (2012-2016 рр., № Держреєстрації 0112U002079); “Ефекти багаточастинкової взаємодії у квантових системах та у процесах їх зіткнень з електронами і позитронами” (2014-2018 рр., № Держреєстрації 0113U004475); “Динаміка процесів взаємодії електронів низьких енергій з атомними, іонними та молекулярними системами” (2014-2018 рр., № Держреєстрації 0113U004473).

Дисертаційна робота Демеша Ш.Ш. являє собою рукопис, який складається зі вступу, п'яти розділів, висновків та списку використаних джерел із 276 найменувань. Загальний обсяг роботи становить 202 сторінки. Робота містить 27 рисунків та 15 таблиць.

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи, сформульовано мету, визначено завдання, об'єкт, предмет і методи дослідження, відображено наукову новизну, практичне значення одержаних результатів, визначено особистий внесок здобувача. Наведено зв'язок дисертаційної роботи з науковими темами ІЕФ НАН України.

У **першому розділі** представлено загальний огляд наявних в літературі сучасних методів дослідження енергетичної структури складних молекулярних об'єктів. Основну увагу приділено сучасним методам дослідження процесів пружного розсіяння та дисоціативної іонізації молекул електронним ударом, а саме методу сильного зв'язку каналів, R -матриці та багатоканальному методу Швінгера.

У **другому розділі** подано результати проведених автором теоретичних досліджень енергій появи позитивних іонних фрагментів з молекул сірки, фторидів сірки, метану та етану у процесі дисоціативної іонізації електронним ударом. Вказані енергії розраховані як різниця повної енергії (ентальпії) вихідної молекули та енергій кінцевих станів нейтральних та іонізованих продуктів реакції. Виконано порівняльний аналіз отриманих результатів з наявними в літературі експериментальними даними та вказано на причини виявлених розбіжностей. Виявлено і ретельно проаналізовано найбільш ефективні канали фрагментації молекул у згаданих вище процесах. Встановлено, що найкраще узгодження розрахованих енергій появи іонних фрагментів з експериментальними даними спостерігається для каналів із найменшою кількістю супутніх нейтральних фрагментів. Зі зростанням числа кінцевих продуктів реакції розбіжність між теоретичними та експериментальними даними, як правило, зростає.

У **третьому розділі** у рамках наближення незалежних атомів розроблено оригінальну нерелятивістську версію потенціальної моделі розсіяння електронів на молекулах ($e+M$ - розсіяння), яка ґрунтується на використанні методу оптичного потенціалу (ОП) взаємодії електрона з окремими атомами молекули-мішені. Отримано загальні вирази для характеристик $e+M$ -розсіяння: парціальних амплітуд і фазових зсувів, інтегральних та диференціальних перерізів. З'ясовано межі застосовності запропонованої потенціальної моделі, встановлено її зв'язок з оптичною теоремою задачі розсіяння.

У **четвертому розділі** дисертації представлено результати досліджень процесів пружного розсіяння електронів на гомоядерних молекулах фосфору, сурми та сірки. Розрахунки характеристик $e+M$ -розсіяння проведені у двох наближеннях моделі незалежних атомів (МНА) з використанням методу ОП. При обчисленні диференціальних перерізів (ДП) розсіяння використовується наближення МНА, а для розрахунку інтегральних перерізів – адитивне правило, що узгоджується з оптичною теоремою.

Необхідні у розрахунках характеристик розсіяння рівноважні міжатомні відстані для всіх досліджених у дисертації молекул обчислені методом зв'язаного кластера. Результати обчислень добре узгоджуються з наявними літературними даними.

Розраховані автором кутові залежності ДП пружного розсіяння електрона однотипними гомоядерними молекулами P_n , Sb_n та S_n ($n=2-4$) подібні за структурою. При заданій енергії зіткнення із збільшенням кількості атомів n

абсолютні значення ДП зростають. Найбільш помітне відхилення розрахованих ДП від експериментальних даних спостерігається лише в інтервалі малих ($<30^\circ$) та великих ($>120^\circ$) кутів розсіяння. В свою чергу, зі зростанням енергії зіткнення точність розрахованих ДП пружного $e+M$ -розсіяння зростає. Порівняльний аналіз розрахованих у МНА-наближенні диференціальних перерізів пружного розсіяння електронів на молекулах P_n , Sb_n та S_n ($n = 2-4$) вказує на сильну залежність кутової поведінки ДП від індивідуальних характеристик окремих атомів молекули-мішені.

Як і слід було очікувати, розраховані в МНА-наближенні з використанням методу безпараметричного дійсного оптичного потенціалу енергетичні залежності інтегральних перерізів пружного розсіяння електрона на молекулах фосфору P_n , сурми Sb_n та сірки S_n ($n = 2-4$) демонструють однотипну поведінку. Це видно уже із отриманих у другому розділі загальних формул для перерізів, які у наближенні адитивного правила представляються у вигляді суми перерізів розсіяння на окремих атомах молекули-мішені.

Останній, **п'ятий розділ** дисертації присвячено дослідженню процесу розсіяння електрона на фтормістких гетероатомних молекулах CF_n ($n = 1-4$) та SF_m ($m = 1-6$) у двох наближеннях підходу незалежних атомів: МНА та МНА-ПД. З використанням наближення ОП досліджено вплив ефектів поглинання (тобто непружних процесів) на перебіг процесів розсіяння електронів на згаданих вище фтормістких гетероатомних молекулах. Проведено порівняння перерізів $e+M$ -розсіяння, обчислених з урахуванням та без врахування потенціалу поглинання, з наявними експериментальними даними. З'ясовано, що використання адитивного правила призводить у діапазоні малих кутів розсіяння до сильного зменшення величини ДП у порівнянні з результатами розрахунків у наближенні МНА. Показано, що складна кутова структура ДП зумовлена наявністю інтерференційних членів у загальних формулах для диференціальних перерізів $e+M$ -розсіяння, одержаних автором у другому розділі дисертації.

Розраховані у цьому ж розділі дисертаційної роботи інтегральні перерізи розсіяння повільних електронів на молекулах фторидів вуглецю CF_n ($n = 1-4$) та сірки SF_m ($m = 1-6$) мають однотипну енергетичну залежність і характеризуються монотонною поведінкою з одним чітко вираженим максимумом, з'ясування природи якого потребує виходу за рамки наближення МНА. Порівняння з експериментальними даними вказує на хорошу точність виконаних у дисертації розрахунків ДП та ІП в області енергій зіткнення, вище 40–50 еВ.

У **висновках** автор підсумовані основні результати дисертаційної роботи.

Основні результати дисертації достатньо повно і своєчасно опубліковані автором у 9 статтях у наукових фахових журналах, та у 21 публікаціях у вигляді матеріалів та тез доповідей міжнародних форумів. Вони пройшли наукову апробацію в наукових центрах та доповідалися на міжнародних конференціях. У авторефераті досить повно викладено зміст дисертаційної роботи та адекватно і повною мірою відображені основні наукові положення дисертації.

Поряд з цим є **ряд зауважень** щодо змісту дисертаційної роботи та її оформлення:

- Обсяг роботи досить великий. У зв'язку з цим можна було більш стисло викласти огляд наявних у літературі експериментальних та теоретичних методів дослідження.
- Для деяких молекулярних об'єктів (наприклад, CF_n ($n = 1-4$) та SF_m ($m = 1-6$)) не в повній мірі з'ясовано причини розбіжностей між експериментальними та розрахованими ІП і ДП розсіяння у низькоенергетичній області зіткнень.
- У четвертому розділі доцільно було би провести більш ретельний порівняльний аналіз результатів розрахунку характеристик розсіяння електронів на гомоядерних молекулах фосфору та сурми, як це було зроблено, наприклад, для гомоядерних молекул сірки.

Поряд з цими зауваженнями було б цікаво отримати відповіді на такі запитання:

- Які перспективи вдосконалення чи модифікації запропонованого в дисертаційній роботі підходу до опису $e+M$ -розсіяння у низькоенергетичній (до 10 eV) області зіткнень?
- У другому розділі дисертації при вивченні процесів дисоціативної іонізації молекул метану та етану враховуються і канали з утворенням додатних та від'ємних іонних фрагментів. Чому аналогічні канали реакції не враховані при дослідженні процесів дисоціативної іонізації молекул фторидів сірки та кластерів сірки?

Висловлені вище зауваження носять, в основному, методичний характер і не знижують загальної позитивної оцінки проведеного в дисертації дослідження. Загалом, дисертаційна робота Демеша Ш.Ш. є завершеним науковим дослідженням, результати якого мають наукову новизну та практичну цінність. Матеріал дисертації як за результатами, так і за кількістю опублікованих робіт значно перевищує обсяги, необхідні для кандидатської дисертації.

Серед найвагоміших результатів відзначаю наступні:

1. Запропоновано оригінальну методику обчислення енергетичних характеристик складних молекулярних систем і, зокрема, енергій появи іонних фрагментів у процесах дисоціативної іонізації молекул електронним ударом. Вперше розраховано енергії появи позитивних іонних фрагментів молекулярних мішеней гексафторида сірки, метану, етану та кластерів сірки у різних каналах реакції дисоціативної іонізації.

2. З використанням методу оптичного потенціалу та моделі незалежних атомів молекули-мішені запропоновано ефективну методику теоретичного дослідження потенціального розсіяння електрона на складних молекулярних мішенях у широкому інтервалі енергій зіткнень. З'ясовано межі застосовності запропонованої автором методики дослідження. Встановлено, що для розрахунку ДП розсіяння найбільш ефективним є загальне наближення моделі незалежних атомів, а для обчислення ІП – використання адитивного правила, яке узгоджується з оптичною теоремою.

3. Вперше розраховано інтегральні та диференціальні (пружні, передачі імпульсу та в'язкості) перерізи потенціального розсіяння повільних електронів на молекулах фосфору, сурми, сірки, фторидів вуглецю і фторидів сірки, які добре узгоджуються наявними експериментальними даними.

Достовірність результатів дисертаційної роботи обумовлена використанням добре розроблених і всебічно апробованих методів, ретельним тестуванням програм чисельного розрахунку перерізів реакцій, а також детальним порівнянням результатів з наявними експериментальними даними та теоретичними результатами інших авторів. Зокрема, для опису пружного розсіяння електрона атомними складовими молекул використовується теорія неоднорідного електронного газу, локальне і локальне спінове наближення теорії функціоналу густини та метод оптичного потенціалу. Для найбільш повного та адекватного врахування кореляційної взаємодії використовуються різні варіанти теорії функціоналу густини, теорій збурень та зв'язаного кластера, а також відповідні їм пакети прикладних програм GAMESS-US та GAUSSIAN.

На підставі викладеного вважаю, що дисертаційна робота **Демеша Шандора Шандоровича** на тему **“Багатоатомні структури та потенціальне розсіювання електрона на молекулах”** за обсягом виконаних досліджень, науковою новизною і практичною цінністю отриманих результатів відповідає вимогам **“Порядку присудження наукових ступенів і присвоєння вченого звання старшого наукового співробітника”**, затвердженого Постановою Кабінету Міністрів України від 24 липня 2013 року № 567, а її автор **Демеш Шандор Шандорович** заслуговує присудження йому наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.04 – фізична електроніка.

Офіційний опонент,
доктор фізико-математичних наук, професор,
декан фізичного факультету ДВНЗ
“Ужгородський національний університет”

Лазур В.Ю.

Підпис доктора фіз.-мат. наук, проф. Лазура В.Ю. засвідчую:

Вчений секретар ДВНЗ
“Ужгородський національний університет”,
кандидат технічних наук



Мельник О.О.

“ 4 ” січня 2019 р.