

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.

