

ВІДГУК

офіційного опонента

старшого наукового співробітника відділу теоретичної фізики

Інституту фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України

канд. фіз.-мат. наук Ізмайлова Ігоря Олександровича

на дисертацію **Демеша Шандора Шандоровича**

**“БАГАТОАТОМНІ СТРУКТУРИ ТА ПОТЕНЦІАЛЬНЕ РОЗСПОВАННЯ
ЕЛЕКТРОНА НА МОЛЕКУЛАХ”,**

подану на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук
за спеціальністю 01.04.04 – фізична електроніка

Дисертаційна робота Ш.Ш. Демеша, виконана у відділі електронних процесів і елементарних взаємодій Інституту електронної фізики НАН України під науковим керівництвом старшого наукового співробітника, доктора фіз.-мат. наук Є.Ю. Ремета, присвячена актуальним питанням сучасної фізичної електроніки, пов'язаним з вивченням взаємодії багатоатомних молекулярних структур з зарядженими частинками (електронами та іонами) різних енергій. Одним із найбільш інтенсивно досліджуваних елементарних процесів є взаємодія вільних електронів з молекулярними системами. Дослідження цих процесів є дуже цікавим для розуміння фізичних явищ, які спостерігаються в молекулярній плазмі, фотохімії та лазерохімії. В той же час опис цих процесів залишається недостатньо повним внаслідок їх високої складності. Детальний аналіз процесів збудження та дисоціації багатоатомних молекул, в т.ч. дисоціативної іонізації (ДІ) є надзвичайно складним, особливо при взаємодії з низькоенергетичними електронами (0.1-5 eV), які обумовлюють вторинні ефекти. Тому розробка нових методів теоретичного аналізу таких систем та проведення відповідних теоретичних досліджень є дуже **актуальною і важливою** задачею як з **наукової**, так і з **практичної** точок зору.

Дисертаційна робота Ш.Ш. Демеша має тісний зв'язок з основними науковими напрямками діяльності Інституту електронної фізики НАН України, де вона виконувалась в рамках затверджених науково-дослідницьких тем та програм фундаментальних досліджень Відділення фізики і астрономії НАН України, таких як «Фізичні процеси і явища при взаємодії електронів та фотонів з речовиною в конденсованому і газовому станах» (2012-2016 рр.) та «Динаміка процесів взаємодії електронів низьких енергій з атомними, іонними та молекулярними системами» (2014-2018 рр.), в яких автор був виконавцем.

Дисертація складається із вступу, п'яти розділів, висновків та списку використаних джерел. Загальний обсяг дисертації складає 202 сторінки, основний текст з результатами досліджень складає 162 сторінки, список використаних джерел містить 276 найменувань.

У **вступі** обгрунтовано актуальність теми дисертації, сформульовано мету та наукові завдання роботи, визначено методологію досліджень та зроблено огляд сучасних теоретичних підходів, що використовуються у фізиці молекул для вивчення процесів їх зіткнень з електронами різних енергій.

У **першому** розділі дисертації описано основні методи теоретичного дослідження молекулярних структур різної складності. Розглянуто ефективні *ab initio* квантово-хімічні методи теорії Хартрі-Фока, теорії функціонала густини, теорії збурень і зв'язаного кластера. Розглянуто коди обчислювальних програм типу GAUSSIAN, GAMESS, MOLPRO та їх алгоритми. Окремо розглянуто методики опису потенціального розсіювання електрона на молекулах з використанням диференціальних (ДП) та інтегральних (ІП) перерізів, включаючи метод сильного зв'язку каналів (1.53), метод R-матриці (1.55), а також методи оптичних потенціалів (ОП) – модель незалежних атомів (МНА), сферичне і одноцентрове наближення для розрахунків характеристик процесу розсіювання.

У **другому** розділі дисертації наведено результати дослідження енергетичних характеристик молекулярних систем у процесах їхнього збудження та дисоціативної іонізації (ДІ) електронним ударом. Розраховано енергії появи одно- та двократно заряджених позитивних іонних фрагментів молекул-мішеней гексафториду сірки SF_6 , метану CH_4 та етану C_2H_6 за різними каналами фрагментації, включаючи процеси з кінцевими нейтральними та негативно зарядженими фрагментами. Показано, що теоретичні енергії появи близькі до експериментальних, коли утворюються іонні фрагменти із малою кількістю супутніх нейтральних фрагментів.

Третій розділ дисертації містить результати теоретичного аналізу характеристик процесу потенціального розсіювання електрона на молекулах в рамках моделі МНА за допомогою дійсних та комплексних потенціалів ОП взаємодії електрона з атомом в різних наближеннях. Запропоновано підхід, в основі якого лежить єдиний опис розсіювання на базі теорії ТФГ атомів молекулярної мішені і потенціалів взаємодії електрона з ними. Показано, що запропонована модель може бути застосована для електронів з енергією зіткнень >10 еВ.

Четвертий розділ дисертації присвячений результатам дослідження потенціального розсіювання електрона у зіткненнях з гомоядерними молекулами фосфору P_k , сурми Sb_k та сірки S_k ($k = 2-4$) при різних енергіях у двох наближеннях підходу МНА в рамках методу ОП для розрахунку перерізів ДП та ІП розсіювання. Показано, що абсолютна величина перерізів пружного розсіювання суттєво залежить від кількості атомів у молекулі-мішені, але відносна енергетична поведінка перерізів якісно подібна і положення характерних максимумів і мінімумів на кутових залежностях не змінюється із ростом числа атомів у молекулі-мішені. Відмічено, що з ростом енергії зіткнень >50 еВ розраховані величини перерізів якісно і кількісно краще узгоджуються з наявними експериментальними даними.

П'ятий розділ дисертації присвячений результатам дослідження потенціального розсіювання електрона у зіткненнях з гетероядерними молекулами фторидів вуглецю CF_n та сірки SF_n ($n = 1-6$) при різних енергіях у двох наближеннях підходу МНА та МНА-ПД в рамках RSEP-наближення (див. підрозділ 1.3.5 формули (1.62) – (1.67). Показано, що з ростом енергії зіткнень розраховані перерізи ДП та ІП пружного розсіювання стають якісно більш подібними щодо кутових залежностей і положення характерних мінімумів, та краще узгоджуються з наявними експериментальними даними. Важливо відмітити, що перерізи розсіювання на фрагментах гексафториду сірки SF_n ($n = 1-5$) було розраховано вперше. Врахування ефектів поглинання вище пружного порогу у RSEP-наближенні призводить до певних змін ДП та ІП, однак більш впливає на величину перерізів, а менш на їх поведінку.

Висновки дисертації стисло висвітлюють основні наукові результати роботи.

Наукова новизна, основні результати та практичне значення

1. Запропоновано методи та опис потенціального розсіювання електрона на багатоатомних молекулярних мішенях в рамках моделі незалежних атомів з використанням дійсних та комплексних оптичних потенціалів взаємодії, включаючи статичний, обмінний, спін-орбітальний, поляризаційний, та поглинання.
2. Реалізовано методику обчислення енергетичних характеристик молекулярних фрагментів – енергій появи, дисоціації, іонізації, збудження – у процесах дисоціації і дисоціативної іонізації молекул електронним ударом.
3. Вперше розраховано енергії появи одно- та двократно заряджених позитивних іонних фрагментів молекул гексафториду сірки SF_6 , метану CH_4 та етану C_2H_6 за різними каналами фрагментації, включаючи процеси з кінцевими нейтральними та негативно зарядженими фрагментами.
4. Вперше розраховано диференціальні та інтегральні перерізи пружного розсіювання електрона на гомоядерних молекулах фосфору P_k , сурми Sb_k , сірки S_k ($k = 2-4$) та гетероядерних молекулах фторидів вуглецю CF_n та сірки SF_n ($n = 1-6$) в широкому діапазоні енергій зіткнень від 0.1 до 100 еВ.
5. Одержані результати можуть знайти практичне застосування в наукових дослідженнях процесів розсіяння електронів на молекулах при моделюванні кінетики молекулярної плазми, фотохімії та лазерохімії.

Достовірність одержаних результатів і обґрунтованість висновків, сформульованих дисертантом, підтверджуються несуперечливістю та коректністю застосованих методів та методик досліджень, а також узгодженістю з даними інших авторів. Матеріал дисертації апробовано в публікаціях у фахових виданнях і доповідях на міжнародних конференціях.

Список наукових праць містить 30 найменувань. Особистий внесок дисертанта не викликає сумнівів. Автореферат повністю відповідає змісту дисертації і дозволяє скласти реальне уявлення про суть та обсяг виконаних досліджень та якість дисертаційної роботи.

Побажання та зауваження до дисертаційної роботи

1. Недостатньо, на наш погляд, обґрунтовано введення у розрахунки єдиного потенціалу поляризації, а не дво- або три-інтервальної апроксимації (3.44), (3.46) (стор. 107, 108).
2. Відомо, що статичні дипольна та квадрупольна поляризованості (стор. 107) значною мірою залежать від коливального збудження молекули-мішені, це потрібно враховувати в потенціалі взаємодії на великих відстанях (3.42).
3. Бажано продовжити дослідження процесу розсіювання електрона на коливно-збуджених молекулах CF_n і SF_n , бо як справедливо відмічено у дисертації (стор. 158, 159), найбільші розбіжності між теорією та експериментом спостерігаються при низьких (5-10 eV) енергіях збудження, але саме ця область енергій важлива в кінетиці молекулярної плазми.

Зазначені зауваження ніяк не зніжують наукову значущість отриманих результатів та високу оцінку дисертаційної роботи в цілому.

Загальна оцінка дисертаційної роботи

У підсумку можна зробити висновок, що дисертаційна робота Ш.Ш. Демеша є завершеним науковим дослідженням, яке виконане на належному науковому рівні, містить нові наукові результати, що мають важливе наукове та практичне значення, і тому повністю задовольняє кваліфікаційним вимогам МОН України до кандидатських дисертацій, а її автор, безумовно, заслуговує на присудження йому наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.04 – фізична електроніка.

Офіційний опонент:

старший науковий співробітник відділу теоретичної фізики

Інституту фізики напівпровідників ім. В.Є. Лашкарьова НАН України

кандидат фіз.-мат. наук



I.O. Ізмайлов

Підпис I.O. Ізмайлова засвідчую:

Учений секретар Інституту фізики напівпровідників

ім. В.Є. Лашкарьова НАН України,

доктор хім. наук, професор



В.М. Томашик