

## В І Д Г У К

офіційного опонента на дисертаційну роботу  
Гедеона Сергія Вікторовича

**„Метод  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами в теорії низькоенергетичного  
розсіяння електронів на складних атомах”**,

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

Дисертаційна робота Гедеона С. В. присвячена дослідженню елементарних процесів зіткнення електронів низьких енергій зі складними атомами та фотонів з від’ємними іонами. Відомості про такі процеси мають вирішальне значення для розуміння та моделювання лабораторної плазми, астрофізичних процесів, лазерів та ін. Необхідні у цих галузях відомості про атомні процеси не обмежуються даними про швидкості реакцій, але й включають більш детальні характеристики, такі як, наприклад, енергетичні та кутові розподіли продуктів реакцій. З іншого боку, при моделюванні плазми часто виникає потреба у інтегрованих за кутом перерізах зіткнення в широкому діапазоні енергій. Більше того, необхідними виявляються дані про такі процеси, які неможливо чи надзвичайно важко здійснити в лабораторних експериментах. Тому при моделюванні астрофізичної та лабораторної плазми все частіше доводиться покладатися на теоретичні прогнози щодо відповідних перерізів та констант швидкостей реакцій. Актуальність дисертаційної роботи визначається також тим фактом, що додаткового вивчення потребують резонансні ефекти, які проявляються в припороговій області енергій зіткнення. Вони можуть робити домінуючий внесок у повні та диференціальні перерізи розсіяння і значно змінювати деякі властивості розрідженої плазми.

Сучасні теоретичні методи дослідження електрон-атомних зіткнень, такі як метод сильного зв’язку каналів (СЗК) та метод  $R$ -матриці є достатньо надійними та ефективними, але в той же час мають ряд недоліків (слабка збіжність, поява псевдорезонансної структури в перерізах розсіяння) і потребують подальшого удосконалення.

Запропонована у дисертаційній роботі Гедеона С. В. БСР-версія методу  $R$ -матриці, яка ґрунтується на використанні залежних від терму неортогональних орбіталей та  $B$ -сплайнів як базисних функцій, дозволяє природним чином враховувати резонансні ефекти, мінімізувавши при цьому псевдорезонансну структуру. Вона також дозволяє ефективно враховувати вплив багатоелектронних кореляцій, поляризаційних явищ та ефектів зв’язку каналів на характеристики електрон-атомних зіткнень.

Застосування цієї БСР-версії дозволило автору дисертаційного дослідження отримати ряд нових наукових результатів щодо пружних та непружних процесів низькоенергетичного розсіяння електронів на атомах Ca та Al і фоторозщеплення від’ємних іонів  $Ca^-$  та  $Al^-$ . Отримані результати безумовно є актуальними як з фундаментальної, так і з прикладної точок зору, а розроблена в дисертації БСР-версія методу  $R$ -матриці може бути використана для дослідження елементарних процесів взаємодії повільних електронів з будь-яким складним атомом.

Дослідження, результати яких включені в дисертаційну роботу, здійснювалися згідно з рядом науково-дослідних тем, виконуваних на кафедрі теоретичної фізики ДВНЗ „Ужгородський національний університет” протягом 2005-2020 рр. Дисертаційна робота Гедеона С. В. виконана в тісній багаторічній співпраці з відомою групою дослідників К. Бартшата та О. Зацарінного з Університету Дрейка (м. Де-Мойн, Айова, США). Як слідує з тексту оригінальних публікацій автора, дослідження атомів Са та Al у рамках цієї співпраці були підтримані також низкою грантів Національного наукового фонду США, виданих, зокрема, для здійснення суперкомп’ютерних розрахунків [гранти No. РНУ-0244470, РНУ-0311161, РНУ-0555226 (дослідження атома Са); гранти РНУ-1212450, РНУ-1403245, РНУ-1520970, РНУ-090031 (дослідження атома Al)].

Дисертаційна робота Гедеона С. В. являє собою рукопис, який складається зі вступу, шести розділів, висновків, переліку використаних джерел та двох додатків. Загальний обсяг роботи – 256 с., з яких 171 с. становить основний текст дисертації. Вона містить 44 рисунки, 11 таблиць, а перелік першоджерел налічує 185 найменувань.

У **вступі** обґрунтовано актуальність вибраної теми досліджень, сформульовано їх мету та основні завдання, визначено об’єкт і предмет дослідження. Зазначено наукову новизну отриманих результатів, їх наукову та практичну цінність. Наведено відомості про особистий внесок автора, апробацію роботи та її структуру.

У **першому розділі** представлено короткий огляд сучасних теоретичних методів дослідження процесів зіткнення повільних електронів з атомами та іонами. Основну увагу приділено методам, які базуються на ідеї дискретизації континууму системи “атом (іон) + налітаючий електрон”. Окремо розглянуто питання про важливість урахування резонансних ефектів у процесах розсіяння електронів на атомах та іонах.

**Другий розділ** присвячено найбільш поширеним методам дослідження пружного і непружного розсіяння повільних електронів на атомах: методу сильного зв’язку каналів (СЗК) та методу *R*-матриці. Запропоновано нову БСР-версію методу *R*-матриці, що базується на використанні залежних від терму неортогональних орбіталей та базисних сплайнів.

У підрозділі 2.1 у рамках методу СЗК розглянуто багатоканальну квантову задачу розсіяння повільних електронів на складних атомах. Вказуються основні недоліки цього методу, а саме: складність урахування поляризації атома налітаючим електронем та необхідність включення у розклад сильного зв’язку додаткових квадратично-інтегровних кореляційних функцій. Такі функції служать для покращення збіжності розкладу сильного зв’язку, дають можливість врахувати вплив деяких автовідбивних станів (АВС), а також дозволяють усунути обмеження, зумовлені накладанням на хвильову функцію зіткнення умови “вимушеної” ортогональності радіальних хвильових функцій континууму до радіальних орбіталей мішені. Однак залучення кореляційних

функцій часто призводить до появи псевдорезонансної структури у перерізах розсіяння.

В підрозділі 2.2 розглянуто основи стандартного методу  $R$ -матриці, відмітною особливістю якого є розбиття конфігураційного простору системи “атом + налітаючий електрон” на дві області: внутрішню та зовнішню. Підставою для такого розбиття є той факт, що через накладання граничних умов (обертання в нуль хвильової функції поза обмеженим об’ємом) розв’язок рівняння Шредінгера існує лише для дискретного набору власних значень. Заміна неперервного спектра дискретним дає певні переваги оскільки дозволяє використовувати дещо модифіковані стандартні програми розрахунку атомної структури та ефективно зводити задачу про розсіяння у внутрішній  $R$ -матричній області до системи алгебраїчних рівнянь. У зовнішній області потенціали взаємодії виходять на свої асимптотичні значення і система інтегро-диференціальних рівнянь зводиться до системи диференціальних рівнянь, яку можна розв’язати добре відомими чисельними методами.

В підрозділі 2.3 детально роз’яснено особливості пропонованої Гедеоном С. В. нової БСР-версії  $R$ -матричного підходу, яка дозволяє усунути недоліки стандартного методу  $R$ -матриці. В рамках цієї версії радіальні хвильові функції континууму не ортогоналізуються з орбіталями та псевдорбіталями мішені, резонансні ефекти враховуються без залучення додаткових кореляційних функцій, а в якості  $R$ -матричного базису використовуються  $B$ -сплайни. Відмова від згаданої вище умови “вимушеної” ортогональності функцій континууму до радіальних орбіталей мішені дозволяє позбутися нефізичної псевдорезонансної структури в перерізах розсіяння. Використання неортогональних орбіталей, які оптимізуються для кожного терму незалежно, забезпечує більш точний опис станів мішені і дозволяє ефективно врахувати такі ефекти, як валентні та корвалентні кореляції і релаксацію орбіти збудженого електрона. В пункті 2.3.2 наведені основні відомості про базисні сплайни та переваги їх застосування при розв’язуванні задачі розсіяння у внутрішній області. Зокрема, кожен  $B$ -сплайн має асоційований з  $R$ -матричним відрізком однозначно визначений мінімальний компактний носій, що важливо для коректної постановки задачі розсіяння у внутрішній  $R$ -матричній області. Скінченний набір базисних сплайнів утворює на  $R$ -матричному відрізку повний базис, внаслідок чого квантовомеханічні оператори після їх дискретизації у  $B$ -сплайновому базисі зображаються сильно розрідженими стрічковими матрицями, що суттєво спрощує чисельні розрахунки.

У **третьому розділі** дисертації за допомогою розробленої БСР-версії методу  $R$ -матриці проведено систематичне дослідження низькоенергетичного розсіяння електронів на атомі  $\text{Ca}$  та фоторозщеплення від’ємного іона  $\text{Ca}^-$ . Діапазон розглядуваних енергій налітаючого електрона складає від 0 до 4 еВ. У підрозділі 3.1 наведено ґрунтовний огляд літератури стосовно стану досліджень низькоенергетичних зіткнень  $e+\text{Ca}$  та фоторозщеплення  $\text{Ca}^-$ . У підрозділі 3.2 описано методику розрахунку властивостей електронної структури атома кальцію та процесів зіткнень  $e+\text{Ca}$ . Про точність опису станів мішені свідчить добре узгодження розрахованих енергій зв’язку та сил осциляторів різних переходів з наявними експериментальними даними. У підрозділі 3.3 наведені

результати розрахунку інтегрованих за кутом повного та пружного перерізів розсіяння електронів на атомі Ca. Дано парціально-хвильове обґрунтування експериментально виявленій резонансній структурі з двома піками в енергетичній залежності повних перерізів розсіяння: встановлено, що широкий пік в околі 1 еВ є резонансом форми  $4s^2 4d^2 D$ , а менший пік при  $\sim 2$  еВ слід ідентифікувати як  $4s 4p^2 {}^2 D$ -резонанс, що руйнується при відкритті нових каналів розпаду.

В підрозділі 3.4 наведено результати розрахунку повного та парціальних перерізів фоторозщеплення від'ємного іона  $\text{Ca}^-$ , проаналізовано їх резонансну структуру. Енергетична залежність повного перерізу фоторозщеплення добре узгоджується з усіма наявними експериментальними даними, точно відтворюючи положення мінімуму Купера і порогові резонансні особливості. Встановлено, що за різкі піки в парціальних перерізах в околі  $\sim 2.9$  еВ відповідають резонанси форми  $(4s 4p {}^1 P^0) k p$ .

**Четвертий розділ** дисертації Гедеона С. В. присвячено систематичному дослідженню збудження електронним ударом чотирьох нижніх збуджених станів атома Ca. Розрахунок процесів розсіяння був здійснений у двох наближеннях — БСРЗ9 та БКФХ-БСРЗ4, які відрізняються способом врахування багатоелектронних кореляцій, явища релаксації квантової орбіти збудженого електрона та інших ефектів. Основними результатами, отриманими в даному розділі, є інтегральні та диференціальні перерізи збудження оптично дозволеного  $4s^2 {}^1 S - 4s 4p {}^1 P^0$  та оптично забороненого  $4s^2 {}^1 S - 4s 4p {}^3 P^0$  переходів, (псевдо-) Стоксові параметри збудження стану  $4s^2 {}^1 S - 4s 4p {}^1 P^0$  для різних енергій налітаючого електрона та диференціальні перерізи збудження рівнів  $3d 4s {}^3,1 D$  при 20 і 40 еВ. Обчислено і проаналізовано внесок каскадних переходів з вищих збуджених станів в інтегральні перерізи збудження рівнів  $4s 4p {}^3,1 P^0$ . Показано, що в області енергій від порога збудження і аж до порогів іонізації наближення БСРЗ9 найкраще з усіх наявних підходів описує процес збудження оптично дозволеного переходу  $4s^2 {}^1 S - 4s 4p {}^1 P^0$ .

У **п'ятому розділі** БСР-версія методу  $R$ -матриці застосовується до комплексного дослідження низькоенергетичного  $(e+\text{Ca})$ -розсіяння, яке передбачає порівняння розрахованих інтегральних та диференціальних характеристик зіткнення з наявними експериментальними даними. Наведено результати розрахунків енергетичних, кутових та енергетично-кутових залежностей диференціальних перерізів (ДП) пружного розсіяння  $e+\text{Ca}$  та збудження п'яти нижніх рівнів атома Ca електронним ударом. Отримано добре узгодження з наявними експериментальними даними для ДП пружного розсіяння в діапазоні енергій від 20 до 100 еВ. Підтверджено наявність виявленої в експерименті “складки” (в області 1.8-2.6 еВ) в енергетичній залежності ДП пружного розсіяння на кут  $90^\circ$ . Запропоновано новий спосіб аналізу ДП розсіяння — їх енергетично-кутові розгортки, які представлені у вигляді 3D-графіків, на котрих чітко прослідковуються локальні екстремуми в околі порогів збудження резонансних рівнів. В цьому ж розділі наведено результати дослідження резонансної структури інтегральних перерізів

розсіяння  $e+Ca$  для різних оптично дозволених і заборонених переходів та дані щодо ефективних сил зіткнень для переходів з основного стану.

**Шостий розділ** дисертації присвячено дослідженню процесів пружного і непружного розсіяння електронів на атомі Al та фоторозщеплення від'ємного іона  $Al^-$ . Розрахунок структури атома-мішені Al здійснювався за допомогою комбінованого БКХФ-БСР-методу з  $V$ -сплайнами як базисними функціями, який дозволив найбільш повно врахувати кореляційні та резонансні ефекти. Розраховані для 13 нижніх збуджених рівнів атома Al енергії зв'язку та сили осциляторів для основних переходів добре узгоджуються з експериментом. Наведено результати розрахунків інтегральних перерізів пружного розсіяння, збудження та іонізації атома Al електронним ударом. Розрахунки проводилися у декількох БСР-наближеннях (БСР10, БСР32, БСР81, БСР587), які відрізняються кількістю врахованих в  $R$ -матричному розкладі зв'язаних станів та псевдостанів континууму атома Al. Це дозволило з'ясувати вплив електронних кореляцій, поляризаційних явищ та ефектів зв'язку каналів на перерізи ( $e+Al$ )-розсіяння. Показано, що глибокий мінімум в енергетичній залежності перерізу пружного розсіяння зумовлений  $(3s^23p^2)^1S$ -резонансом, тоді як  $(3s3p^3)^3D^o$ -резонанс проявляється у вигляді різкого піку при 3.7 еВ.

На основі БСР587-моделі розсіяння проведено дослідження іонізації атома Al в основному стані  $(3s^23p)^2P$  електронним ударом в діапазоні енергій зіткнення від порога до 110 еВ. Показано, що розпад автоіонізаційних станів  $(3s3p^2)^2P$  та  $^2S$  дає істотний внесок у повний переріз іонізації.

У підрозділі 6.2 вперше розраховано перерізи фоторозщеплення від'ємного іона  $Al^-$  в основному  $(3s^23p^2)^3P$  і збудженому  $(3s^23p^2)^1D$  станах. Докладно проаналізовано складну резонансну структуру в енергетичних залежностях цих перерізів, визначено положення і ширини виявлених резонансів та проведено їх класифікацію.

У **висновках** стисло підсумовано основні результати дисертаційного дослідження. Вони є оригінальними, відповідають поставленій меті, а їх достовірність підтверджується добрим узгодженням з наявними експериментальними даними та результатами розрахунків інших авторів.

Результати дисертаційної роботи містять новизну і представляють наукову цінність. Найважливішим практичним результатом слід вважати отримання великої кількості даних щодо характеристик розсіяння електронів на атомах Ca та Al і фоторозщеплення  $Ca^-$  та  $Al^-$ , які можуть бути використані у різних галузях сучасної фізики та нової техніки (фізика плазми, астрофізика, керований термоядерний синтез та ін.). Крім того, розроблена БСР-версія методу  $R$ -матриці зарекомендувала себе як ефективний і універсальний метод дослідження електрон-атомних зіткнень при низьких енергіях та фоторозщеплення від'ємних іонів.

Незважаючи на високий науковий рівень дисертації, повноту вирішення поставлених в ній задач і завершеність роботи, слід зробити, на мій погляд, деякі зауваження:

1. Обсяг роботи досить великий. Можливо доцільно було б скоротити деякі розділи, обмежившись лише посиланням на відповідні роботи. Наприклад, у пункті 6.2.2.2 рівняння (6.3) фактично дублює рівняння (2.15), а наведені матричні рівняння в достатній мірі висвітлені у оригінальних працях дисертанта.

2. Не зовсім зрозуміло за якими критеріями вибирались параметри БСР-моделі розсіяння, такі як радіус внутрішньої області  $a$ , кількість та порядок  $B$ -сплайнів у  $R$ -матричних розкладах.

3. У тексті зустрічаються деякі позасистемні одиниці вимірювання: у підрозділі 3.4 — барн, а у підрозділі 6.2 — рідберг.

Вказані недоліки, однак, не мають принципового характеру і не впливають на високу оцінку результатів дисертаційної роботи Гедеона С. В.

Загалом вважаю, що дисертаційна робота Гедеона С. В. є завершеним дослідженням в галузі теоретичної атомної фізики, виконаним на високому науковому рівні. Результати досліджень опубліковані у відомих вітчизняних та міжнародних журналах (в тому числі 6, включених до наукометричної бази Scopus) та апробовані на багатьох міжнародних конференціях. Автореферат дисертації повністю відображає її зміст.

**Висновок:** представлена дисертаційна робота „Метод  $R$ -матриці з  $B$ -сплайнами в теорії низькоенергетичного розсіяння електронів на складних атомах” цілком відповідає затвердженим Постановою Кабінету Міністрів України № 567 від 24 липня 2013 року вимогам “Порядку присудження наукових ступенів”, а її автор, Гедеон Сергій Вікторович, безумовно заслуговує присудження йому наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.04 – фізична електроніка.

Офіційний опонент,  
завідувач проблемної  
науково-дослідної лабораторії іонних процесів,  
доцент кафедри матеріалів реакторобудування,  
кандидат фізико-математичних наук,  
старший науковий співробітник

*В.В. Бобков*

Бобков В.В.

Підпис канд. фіз.-мат. наук, с.н.с.

Бобкова Валентина Васильовича засвідчую:

Начальник служби управління персоналом  
ХНУ ім. В.Н. Каразіна  
доктор педагогічних наук, професор



Куліш С.М.

« 26 » квітня 2021 р.