

ВІДГУК

офіційного опонента про дисертацію

Карбованця Олександра Мирославовича
“Адіабатична асимптотична теорія
одно- і двоелектронної перезарядки за участю полярних
та гомоядерних молекул”, представлену на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю
01.04.04 – фізична електроніка

Тема дисертаційної роботи Карбованця Олександра Мирославовича з розвитком адіабатичної асимптотичної теорії для опису процесів за участю полярних та гомоядерних молекул з одно- та двоелектронною перезарядкою. Незважаючи на **очевидну актуальність** цієї тематики та значні досягнення квантової механіки у дослідженні непружних реакцій в рамках асимптотичної теорії, процеси зіткнення молекул з атомними та молекулярними іонами з одно- та двоелектронною перезарядкою з урахуванням з високою точністю обмінних та кореляційних ефектів вивчені недостатньо, що пов'язано з певними теоретичними труднощами. До останніх відноситься той факт, що асимптотичні методи теорії атомних зіткнень справедливі, коли міжатомні відстані великі у порівнянні з розміром атомів. Таке наближення несправедливе при розрахунках перетинів одно- та двоелектронної перезарядки полярних та гомоядерних молекул на багатозарядних іонах, оскільки у цьому разі міжцентрові відстані не є достатньо великими. Висвітлення ролі орієнтаційних та обмінно-кореляційних ефектів у динаміці процесів переходу одного чи двох електронів від однієї атомної або молекулярної частинки до іншої також є актуальною проблемою сучасної теоретичної фізики. Важливу роль відіграють процеси як одно- так і двоелектронної перезарядки, причому останні вивчені набагато менше. Зокрема, при теплових енергіях зіткнення двоелектронні процеси є настільки ж або і більш ймовірними, ніж одноелектронні, як це доведено як теоретично, так і експериментально. Саме ці аспекти і зумовлюють **актуальність** теми дисертації для **фундаментальної теоретичної та експериментальної фізики**. Зважаючи на очевидні перспективи застосування таких ефектів та процесів у сучасних технологіях та їх роль в природних процесах та плазмі, стає зрозумілою і **актуальність** вказаної тематики для **практичних застосувань**, у тому числі у фізичній електроніці.

На **актуальність** обраної автором тематики вказує і зв'язок роботи з дослідженнями, виконаними в межах державних бюджетних тем Міністерства освіти і науки України, зокрема, тем “Асимптотичні моделі багаточетрових систем у фізиці елементарних взаємодій” (2006 – 2008 рр., № ДР – 0105U007695); “Релятивістська версія асимптотичної теорії процесів з перерозподілом при повільних іон-іонних та іон-атомних зіткненнях” (2009 – 2011 рр., № ДР – 0109U000872); “Релятивістські та квантово-електродинамічні ефекти при взаємодії багатозарядних іонів з важкими

атомами та з постійними електричним і магнітним полями” (2012 – 2014 рр., № ДР – 0112U001552); “Інтегральні рівняння Додда-Грейдера в теорії одно- та двоелектронних процесів з перерозподілом у високоенергетичних іон-атомних зіткненнях” (2015 – 2017 рр., № ДР – 0115U001099).

Метою роботи було розвинення адіабатичної асимптотичної теорії процесів з перерозподілом одноелектронної перезарядки багатозарядних іонів на гомоядерних і полярних молекулах та дипольно-зв’язаних аніонах, двоелектронної перезарядки полярних молекул на багатозарядних іонах або власних катіонах, а також вивчення орієнтаційних ефектів, зумовлених кутовою анізотропією дипольних потенціалів молекулярних залишків.

Одержані автором результати мають важливе **практичне значення** та можуть знайти застосування при моделюванні елементарних процесів у астрофізичній та лабораторній плазмі. Так, вивчення процесів з перерозподілом частинок при зіткненнях багатозарядних іонів з молекулами водню H_2 важливе для дослідження високотемпературної водневої плазми у пристроях керованого термоядерного синтезу, що інтенсивно проводяться останніми роками. Отримані асимптотичні вирази для потенціалів обмінної взаємодії можуть бути використані для систематичних розрахунків одно- та двоелектронних процесів з перерозподілом та пояснення відповідних експериментальних даних. Проведені в дисертаційній роботі розрахунки конкретних реакцій за участю полярних молекул дозволили правильно спланувати експеримент (див. роботи автора у співаторстві з експериментаторами [30,31] в дисертації або [2,3] в авторефераті) та пояснити його результати.

Варто відзначити **новизну отриманих автором результатів** не лише на час написання робіт, а і їх актуальність на теперішній час, особливо враховуючи зростаючі можливості експериментального вивчення непружних реакцій з високим ступенем точності та їх практичного застосування.

За структурою дисертація складається зі Вступу, чотирьох розділів, Висновків, Списку використаних джерел та Додатку. Загальний обсяг становить 168 сторінок. Дисертація містить 20 рисунків і 8 таблиць. Список використаних джерел включає 171 посилання.

У Вступі обґрунтовано актуальність теми досліджень, наведено зв’язок дисертаційної роботи з науковими темами, сформульовано мету і завдання роботи, визначено об’єкт, предмет та методи дослідження, відзначено наукову новизну і практичне значення отриманих результатів та обґрунтовано їх достовірність, а також наведено інформацію про апробацію результатів, особистий внесок здобувача та перелік публікацій автора за темою дисертації.

У першому розділі дисертаційної роботи міститься огляд літератури, присвяченої теоретичним і експериментальним дослідженням процесів одно- та двоелектронної перезарядки при повільних атомно-молекулярних зіткненнях.

Другий розділ дисертації присвячений побудові електронних хвильових функцій квазімолекул, що утворюються у процесах з перерозподілом електронів при повільних зіткненнях багатозарядних іонів з полярними та гомоядерними молекулами. У таких реакціях взаємодія електрона з чужим іоном у між’ядерній області та в околі чужого силового центру не є малою і не може розглядатися як збурення. Крім того, в цих областях суттєвим є перекриття хвильових функцій на різних центрах. Таким чином, для вивчення таких процесів асимптотичний метод Ландау-Херрінга непридатний, що й зумовлює необхідність розширення адіабатичної теорії. Автор розвиває в дисертації аналітичну теорію процесів з перебудовою на основі квазікласичного підходу метода Вентцеля-Крамерса-Бріллюена, який, як

відомо, не пов'язаний з малістю взаємодії. Автору вдалося отримати квазікласичні вирази для збурених полем віддаленого багатозарядного іона електронних хвильових функцій двоатомної гомоядерної молекули, полярної молекули та дипольно-зв'язаного аніона, що асимптотично точно описують поведінку електрона в підбар'єрній області.

У третьому розділі розвинуто асимптотичну теорію одноелектронної перезарядки у повільних зіткненнях багатозарядних іонів з молекулами. Для теоретичного дослідження процесів повільних іон-молекулярних зіткнень важливими є відомості про потенціали обмінної взаємодії між електронними станами квазімолекулярної системи, утвореної взаємодіючими атомними частинками. Автором обчислено головний член розкладу експоненціально малої обмінної взаємодії багатозарядних іонів з полярними і двоатомними гомоядерними молекулами, а також дипольно-зв'язаними аніонами. Обмінна взаємодія розрахована у припущенні про адиабатичний характер процесу перезарядки, тобто для малих відносних швидкостей зіткнення. Внаслідок цього вона не враховує ефектів переносу імпульсу електрона у реакції перезарядки. Такі ефекти враховані в роботі шляхом модифікації потенціалу взаємодії, внаслідок чого обмінна взаємодія $J(R)$ перенормується динамічним фактором $W(R, v)$, тобто має місце співвідношення $J_{\text{eff}}(R, V) = W(R, V)J(R)$, де $J(R)$ – обмінна енергія в нехтуванні перенесенням імпульсу у процесі реакції, а динамічний фактор $W(R, V)$ задається гіпергеометричною функцією, яка залежить як від міжцентрової відстані R , так і від відносної швидкості V .

У четвертому розділі автором розвинуто асимптотичну теорію процесів двоелектронного захоплення при повільних зіткненнях полярних молекул з атомними та молекулярними іонами у квазікласичному наближенні. Варто відзначити, що у деяких реакціях двоелектронне захоплення домінує над двократним одноелектронним захопленням, як наприклад, в реакції $\text{He} + \text{C}^{4+} \rightarrow \text{He}^{2+} + \text{C}^{2+}$. Такі двоелектронні процеси відбуваються завдяки міжелектронним кореляціям, тоді як для одноелектронних процесів міжелектронні взаємодії слабкі. Автором досліджено загальну структуру матричних елементів двоелектронної обмінної взаємодії полярної молекули з багатозарядним іоном та з'ясовано основні механізми двоелектронних переходів, що відповідають за пряме та поетапне двоелектронне захоплення. Одержано аналітичні вирази для матричних елементів двоелектронної обмінної взаємодії, що визначають такі процеси перезарядки, та чисельно розраховано цю величину для процесів подвійної перезарядки $\text{N}^{3+} + \text{HF} \rightarrow \text{N}^{+} + \text{HF}^{+}$ та $\text{CO}^{+} + \text{CO} \rightarrow \text{CO} + \text{CO}^{2+}$.

Основні результати дисертації достатньо **повно і своєчасно опубліковані** автором у 10 статтях у наукових фахових журналах, та у 10 публікаціях у вигляді матеріалів та тез доповідей. 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 дисертації та її оформлення.

В жодному місці в роботі не визначені одиниці використовуваних змінних та їх безрозмірювання, що з самого початку викликає низку запитань у читача. Як зрозуміти нерівність $R \gg 1$ на ст. 15 без додаткового пояснення, що таке R та в яких одиницях ця величина визначена?

В роботі далеко не завжди дається фізичний, хоча б якісний, аналіз отриманих аналітичних та чисельних результатів. Так, хотілося б мати фізичне пояснення

немонотонної поведінки повного перерізу одноелектронного захоплення у повільних зіткненнях атомів гелію з іонами гідрогену $\text{He} + \text{H}^+ \rightarrow \text{He}^+(1s) + \text{H}(n=1,2,3)$ в залежності від енергії зіткнення (див. Рис. 3.2). Чи можна порівняти таку немонотонність з ефектом Рамзауера, який іноді називають також ефектом Рамзауера-Таунсенда, в розсіюванні електронів атомами інертних газів? Чи не є така немонотонність свідченням квантово-хвильової природи процесів розсіювання при малих енергіях (відносних швидкостях)? Для порівняння наведу висновок в роботі F.Frémont, G.Laurent, et al., Electron Capture in Collisions of Slow Highly Charged Ions with an Atom and a Molecule: Processes and Fragmentation Dynamics. Int. J. Mol. Sci. 2002, 3, 115-131 про зростання ролі електрон-електронної взаємодії зі зменшенням швидкості зіткнення повільних атомів (мокул) з сильно зарядженими іонами.

Варто було б навести чисельне значення енергії та швидкості, що відповідають екстремумам повних перерізів реакцій та порівняти їх, наприклад, з класичною швидкістю зв'язаного електрона V_0 у відповідній молекулі (іоні) чи іншими фундаментальними характеристиками системи. Було б доцільно навести чисельне значення величин V_0 та $V_0 Z^{1/2}$ при порівнянні теоретичних та експериментальних даних для різних реакцій зіткнень, досліджених автором. Наприклад, автор пише, що розрахунки проводилися для швидкостей, більших або рівних 1 а.о. Варто порівняти це значення з V_0 чи іншою фізичною величиною.

Не проаналізовано фізичну природу якісної відмінності поведінки перерізу розсіювання в залежності від енергії розсіювання в реакціях $\text{B}^{2+} + \text{CO}$ та $\text{Be}^{2+} + \text{C}_3\text{H}^8$. У першому випадку переріз зростає зі збільшенням енергії з двома режимами зростання при $E < (1-2) \text{ keV/a.m.u.}$ та $(1-2) \text{ keV/a.m.u.} < E < 8 \text{ keV/a.m.u.}$, а для другої реакції переріз зменшується зі зростанням енергії теж з двома різними нахилами у відповідних інтервалах енергій (див. Рис. 3.17).

Аналогічно, вимагає пояснення (коментаря) заниження теоретичних даних для повного перерізу реакції одноелектронної перезарядки молекул гідрогену $\text{H}_2[{}^1\Sigma_g^+]$ на іонах H^+ порівняно з експериментальними даними при малих значеннях відносних швидкостей зіткнення та зростання цієї розбіжності зі зменшенням швидкості (див. Рис. 3.3).

Питання про точність теоретичної моделі для одноелектронної перезарядки у процесах зіткнення молекул гідрогену з високо-іонізованими іонами, наприклад, Ar^{q+} , $q=6,8,14,16$, ускладнюється малою кількістю експериментальних даних, іноді це лише 1-2 значення, тому ці результати автора можуть бути перевірені лише з часом.

Розроблений у дисертаційній роботі метод досліджень процесів перезарядки застосовано для розрахунків перетинів реакцій електронного захоплення у повільних зіткненнях атомних іонів з полярними молекулами в наближенні, що міжатомна відстань r_0 в цих молекулах протягом зіткнення не змінюється. Автор сам наводить значення $r_0=2,132$ а.о. для нейтральної молекули окису вуглецю CO , згідно з теоретичним розрахунком та експериментальними даними, в той час як для іону $\text{CO}^+({}^2\Sigma^+)$ (тобто внаслідок досліджуваної реакції) це значення дорівнює 2.101 а.о, згідно з експериментальними даними, а отже, воно змінюється майже на півтора відсотки, що в молекулярній фізиці є значною зміною, яка може вплинути на квантово-механічні розрахунки кінцевого результату.

Насамкінець зауважу, що автор не обговорює спінові стани електронів (іонів). Чи може проявитися роль спінів, особливо у двоелектронних процесах перезарядки?

Робота написана чітко і грамотно, хоча є кілька описок. Так, написано 'двоелектронної' замість 'двоелектронною' на ст. 21, 'було запропоноване' замість 'було запропоновано' на ст.29, 'у раніше у цьому підрозділі' замість 'раніше у цьому

підрозділі' на ст.50 роботи, 'диви формулу' замість 'дивись формулу' на ст. 94 та 'домінує ' замість 'домінує' на ст. 13 автореферату. Автор використовує термін 'водень' замість рекомендованого терміну 'гідроген', 'вуглець' замість 'карбон', які вживаються у сучасних підручниках з фізики для загальноосвітніх шкіл та університетів. З моєї точки зору невдалим є використання жаргонного терміну 'дезбудження іона' замість 'перехід іона зі збудженого в основний стан'. Є певні незручності викладення матеріалу для читача. Так, величина n_a , в рівнянні (2.5) дисертації визначена значно пізніше, після рівняння (2.6), а у авторефераті не визначена зовсім. На мій погляд, невдале позначення обмінної енергії $\Delta E(R)$, оскільки в гамільтоніані використано позначення Δ для лапласіана (див. Розділи 2 та 3). Є певна непослідовність у позначеннях в тексті та на рисунках. Зокрема, на Рис. 2.1 відсутнє позначення вісі Oy' , що зустрічається в тексті з посиланням на цей рисунок. У тексті йде мова про введення нової координатної системи $\{x'',y'',z''\}$ з посиланням на Рис. 3.1, на якому ці позначення відсутні.

Висловлені вище зауваження не знижують **загальної позитивної оцінки** проведеного дослідження, у якому розвинуто теорію та детально вивчено процеси одно- та двоелектронної перезарядки в зіткненнях полярних та гомоядерних молекул. Матеріал дисертації як за результатами, так і за кількістю опублікованих робіт значно перевищує матеріал, необхідний для кандидатської дисертації. Серед найвагоміших результатів відзначаю наступні.

У квазікласичному наближенні отримано **аналітичні** вирази для матричних елементів одноелектронної обмінної взаємодії багатозарядних іонів з двоатомними гомоядерними молекулами, полярними молекулами та дипольно-зв'язаними атомами.

Вперше проведені теоретичні розрахунки перерізів одноелектронного захоплення у процесах $V^{2+} + CO$, $Ve^{2+} + CO$ та $Ve^{2+} + C_3H_8$. Виявлено сильну залежність перерізів реакцій $V^{2+} + CO \rightarrow V^+ + CO^+$ і $Ve^{2+} + C_3H_8 \rightarrow Ve^+ + C_3H_8^+$ від орієнтації дипольних моментів молекулярних іонів CO^+ і $C_3H_8^+$ відносно напрямку швидкості налітаючих іонів.

Одержано явні асимптотичні вирази для матричних елементів обмінної взаємодії, що відповідають за процеси двоелектронної перезарядки полярної молекули на двозарядному катіоні та обчислено переріз резонансної двоелектронної перезарядки молекули CO на власному катіоні CO^{2+} .

Проведено послідовний теоретичний аналіз впливу величини та орієнтації дипольного моменту остова на потенціал двоелектронної обмінної взаємодії іона N^{3+} з полярною молекулою HF.

Олександр Мирославович продемонстрував майстерне володіння апаратами квантової механіки, спеціальних функцій, асимптотичних аналітичних методів та апаратів функцій Гріна та чисельного моделювання. Ним проведені кропіткі аналітичні та чисельні розрахунки багатьох реакцій та наведено їх порівняння з експериментальними даними, для чого проведено обширний літературний пошук. Особливо варто відзначити акуратно проведені надзвичайно громіздкі розрахунки обмінної взаємодії в процесах двоелектронної перезарядки та її оцінки при різних значеннях кутів орієнтації полярних молекул та міжцентрових відстаней. Автор фізично обґрунтовує використані ним наближення та побудову відповідних моделей чи механізмів.

Достовірність результатів роботи забезпечена використанням добре розроблених і всебічно апробованих методів (Вентцеля-Крамерса-Бріллюена, стаціонарної фази, функції Гріна, поверхневих інтегралів) асимптотичної теорії атомних зіткнень, ретельним тестуванням програм чисельного розрахунку перерізів реакцій, а також детальним порівнянням результатів з наявними експериментальними даними та теоретичними результатами інших авторів.

На підставі викладеного вважаю, що дисертація **Карбованця Олександра Мирославовича «Адіабатична асимптотична теорія одно- і двоелектронної перезарядки за участю полярних та гомоядерних молекул»** відповідає вимогам, які висуваються п. 11, п. 12 та п. 13 «Порядку присудження наукових ступенів і присвоєння вченого звання старшого наукового співробітника», затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 24.07.2013 р. № 567, до кандидатських дисертацій, що дає підстави для присудження **Карбованцю Олександрю Мирославовичу** наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.04 – фізична електроніка.

Доктор фізико-математичних наук,
провідний науковий співробітник відділу нелінійної
фізики конденсованого стану Інституту теоретичної
фізики ім. М.М.Боголюбова НАН України


Брижик Л.С.

“Підпис доктора фіз.-мат. наук. Л.С. Брижик засвідчую”
Вчений секретар Інституту теоретичної
фізики ім. М.М. Боголюбова НАН України
кандидат фізико-математичних наук




Перепелиця С.М.

“ 11 ” січня 2016 р.