

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу Нодь Єлизавети Андріївни “ВРАХУВАННЯ МІЖЕЛЕКТРОННОЇ КОРЕЛЯЦІЇ В РОЗСІЯННІ ЕЛЕКТРОНІВ НА СКЛАДНИХ АТОМАХ У РАМКАХ МЕТОДУ *R*-МАТРИЦІ З *B*-СПЛАЙНАМИ”, представлену на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.04 – фізична електроніка

Теоретичні дослідження елементарних процесів взаємодії атомних частинок, зокрема електронів, зі складними атомами посідають чільне місце серед найбільш актуальних задач атомної фізики та фізики зіткнень. Фундаментальне значення таких досліджень полягає в одержанні даних з енергетичної структури атомів та механізмів їх взаємодії з електронами в широкому діапазоні енергій. Саме теоретичні розрахунки дають відповідь на питання про вплив міжелектронної кореляційної взаємодії на абсолютне значення та енергетичну залежність ефективних перерізів збудження та іонізації атомів, а також на структуру їх енергетичних рівнів. Прикладне значення таких теоретичних досліджень зумовлено надзвичайною складністю проведення прямих експериментальних вимірювань абсолютних перерізів збудження або іонізації. Зокрема, наявність в атомі незаповненої електронної оболонки вимагає використання апаратури з високою енергетичною роздільною здатністю та чутливістю, а також створення спеціальних експериментальних умов (моноенергетичні електронні пучки, атомні пучки з визначеною геометрією тощо). В цьому разі теоретичні розрахунки стають основним джерелом відомостей про елементарні процеси взаємодії електронів з атомами та іонами, які, в свою чергу, є вкрай необхідними в прикладних дослідженнях астрофізичної плазми, плазми верхніх шарів атмосфери Землі, в галузі керованого термоядерного синтезу, а також при створенні та вдосконаленні різноманітних плазмових пристроїв, зокрема для плазмової обробки напівпровідників, екологічно чистих люмінесцентних ламп, ефективних методів діагностики високотемпературної плазми, короткохвильових лазерів та нових еталонів частоти тощо.

Вищевказане пояснює актуальність теми дисертаційної роботи Нодь Є.А., яка присвячена вдосконаленню одного з найбільш перспективних теоретичних методів дослідження низькоенергетичної взаємодії електронів з атомами – методу *R*-матриці. Зокрема, для належного врахування обмінних та

кореляційних ефектів у розрахунках як властивостей електронної структури складних атомів, так і процесів їх взаємодії з повільними електронами, автором запропонована *B*-сплайн-*R*-матрична (БСР) версія цього методу, де радіальні частини одноелектронних хвильових функцій як зв'язаних станів атома-мішені, так і станів розсіяного електрона представлені залежними від терму неортогональними орбіталями та *B*-сплайнами як базисними функціями.

Аналіз змісту дисертації.

Дисертація Нодь Є.А. являє собою рукопис, який складається зі вступу, шести розділів, висновків, списку використаних джерел з 267 найменувань та додатка. Загальний обсяг роботи становить 203 сторінки, з яких 154 є основним текстом дисертації. Робота містить 27 рисунків та 11 таблиць.

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми дослідження, показано її зв'язок з науковими програмами і темами, сформульовано мету, визначено завдання, об'єкти, предмет і методи дослідження, показано наукову новизну та практичне значення одержаних результатів, наведено відомості про особистий внесок автора, апробацію та структуру роботи.

У **першому розділі** подано загальну характеристику елементарних процесів зіткнення електронів з атомами (іонами), зроблено огляд літератури з основних методів теоретичного розрахунку атомної структури та параметрів електронного розсіяння. Значну увагу приділено одно- та багато-конфігураційній версіям методу Хартрі–Фока (БКХФ). Розглянуто також найбільш ефективні методи розрахунку низькоенергетичного розсіяння електронів на атомах – сильного зв'язку каналів, *R*-матриці та збіжного сильного зв'язку. Обґрунтовано також вибір атомів Mg, Sr (II група), Si (IV група) та F (VII група) як об'єктів для дослідження їх енергетичної структури і процесів збудження та іонізації при взаємодії з повільними електронами.

У **другому розділі** дисертації розглянуто основні засади розрахунків методами сильного зв'язку та *R*-матриці, їх застосування для дослідження енергетичної структури атомів та задачі розсіювання електронів низьких енергій. Також детально, крок за кроком, описано суть проведеної в роботі модифікації загального методу *R*-матриці (наближення БСР), а саме: 1) використання неортогональних орбіталей для представлення як зв'язаних атомних станів, так і станів розсіяного електрона; 2) визначення базису *R*-матричних функцій системою *B*-сплайнів. Зокрема, оператор $H_{N+1} + L_{N+1}$, де L_{N+1} – оператор Блоха, а H_{N+1} – точний гамільтоніан $(N+1)$ -електронної системи, робиться ермітовим на обмеженому наборі функцій $u_j(r)$ дискретних

станів, заданих в області $r < a$. В якості R -матричного базису в дисертаційній роботі Нодь Є.А. обрано B -сплайни з компактними носіями у внутрішній області $r < a$. Такий вибір базису забезпечує швидку збіжність R -матричного розкладу без уведення в діагональні R -матричні елементи т. зв. поправок Баттла (Buttle corrections). Система сплайнів формує повний базис на скінченному R -матричному інтервалі $[0, a]$, зручна при знаходженні як зв'язаних орбіталей атома-мішені, так і орбіталей розсіяного електрона. Зручність забезпечується насамперед тим, що B -сплайни – фінітні функції, які відмінні від нуля лише на своїх інтервалах-носіях.

В цьому ж розділі детально розглядаються: процедура зшивання розв'язків рівнянь сильного зв'язку у зовнішній області ($r > a$) з розв'язками у внутрішній області ($r < a$) при $r = a$; визначення K -, S -матриць й фазових зсувів, необхідних для подальшого розрахунку перерізів та всіх інших характеристик розсіяння; методика застосування псевдостанів; особливості розрахунків електронної іонізації методом БСР; найбільш важливі щодо обчислення властивості B -сплайнів зі скінченними носіями; сплайн-алгоритми розв'язування диференціальних та інтегро-диференціальних рівнянь. Окремо розглядається багатоконфігураційний метод Хартрі–Фока з B -сплайнами як загальний підхід до проблеми врахування кореляційної взаємодії електронів – основної задачі дисертаційного дослідження.

Третій розділ присвячено особливостям розрахунків диференціальних (ДП) та інтегральних (ІП) перерізів розсіяння електронів на атомі магнію з використанням наближення БСР з включенням у розгляд 37 станів атома-мішені (БСР37), а також аналізу одержаних результатів, що охоплюють пружне розсіяння і збудження п'яти нижніх станів $3s3p\ ^1\ ^3P^o$, $3s3d\ ^1D$, $3s4s\ ^1S$ та $3s4p\ ^1P^o$. Шляхом порівняння з експериментальними даними та іншими теоретичними розрахунками показано, що в межах енергій налітаючих електронів від 10 до 100 еВ має місце добре узгодження даних. Встановлено чутливість перерізів до врахування валентних і кор-валентних електронних кореляцій, а також до ефекту зв'язку каналів, включаючи зв'язок з іонізаційним континуумом.

У **четвертому розділі** розглянуто основні етапи та результати розрахунків енергетичної структури і розсіяння електронів на атомі стронцію. Дані одержано комбінованим методом БКХФ-БСР31 у діапазоні енергій зіткнення до 10 еВ. Одержано добре узгодження даних з енергетичної структури рівнів, повного і пружного перерізів розсіяння з експериментом. В перерізах розсіяння

виявлено два максимуми при 1,04 та 1,86 еВ, які відповідають утворенню резонансу форми $5s^2 4d^2 D$ і резонансу $5s^2 5p[{}^1D] {}^2D$, відповідно.

У п'ятому розділі розглянуто основні етапи розрахунку процесу електронного розсіяння на атомі кремнію та представлено одержані енергетичні залежності ІІ пружного розсіяння та збудження одно- та двоелектронних переходів із основного $3s^2 3p^2 {}^3P$ і метастабільних $3s^2 3p^2 {}^1D$ та $3s^2 3p^2 {}^1S$ станів атома кремнію. Через відсутність експериментальних даних збіжність R -матричного розкладу перевірялася шляхом порівняння результатів розрахунку у двох наближеннях БСР41 та БСР34 з однаковим числом фізичних станів та різним числом поляризаційних псевдостанів. Показано, що включення в розклад сильного зв'язку (СЗ) 7 додаткових псевдостанів практично не впливає на абсолютне значення та форму ІІ пружного розсіювання і переходів між основним і метастабільним станами. Що стосується збудження деяких високо-розташованих станів атома кремнію, то тут виявлено суттєву (аж до фактора 2) зміну величини ІІ. Ці дані виявляють слабку збіжність розкладу СЗ та сильну чутливість ІІ збудження високоенергетичних станів до ефектів зв'язку дискретних станів атома-мішені з неперервним спектром.

Шостий розділ дисертаційної роботи присвячено методичним аспектам проведених розрахунків та результатам комплексного дослідження процесу розсіяння повільних електронів на атомі фтору в діапазоні енергій від порогу до 100 еВ. У розрахунках енергетичної структури автор використала метод БКХФ з B -сплайнами та залежними від терму неортогональними орбіталями. Також у рамках наближень БСР39 та БСР690 розраховано енергетичні залежності інтегральних перерізів процесів пружного розсіяння, передачі імпульсу, збудження та іонізації атома фтору з основного стану $2s^2 2p^5 {}^2P^0$. Виявлено сильний вплив кореляційних ефектів і, зокрема, ефектів зв'язку дискретних станів з континуумом мішені на перерізи збудження та іонізації.

В енергетичних залежностях ІІ пружного розсіяння та збудження виявлено багату резонансну структуру, зумовлену утворенням станів від'ємного іона фтору $F^- (2p^4 3lnl')$, де $n = 3, 4$ та $l, l' = 0, 1, 2$. Визначено енергетичне положення і ширини 24 резонансів Фешбаха та проведено їх спектроскопічну класифікацію.

Важливим результатом дослідження атома фтору є розрахунок перерізу іонізації в діапазоні енергій зіткнень від порогу до 120 еВ, який добре узгоджується з експериментальними даними в межах невизначеності вимірів. Цей розділ закінчується ґрунтовним аналізом важливості врахування

електронних кореляцій при розрахунках енергетичної структури атома фтору. Шляхом порівняння результатів, одержаних з різними базисними розкладами, зроблено ряд узагальнюючих висновків про важливість урахування електронних кореляцій у процесах збудження та іонізації атома фтору електронним ударом.

У додатку А автором систематизовано результати проведених розрахунків та зроблено їх порівняння з наявними в літературі експериментальними і теоретичними даними.

У висновках автор підсумовує основні результати дисертаційної роботи. Вони одержані згідно з науково-дослідними темами ДВНЗ “Ужгородський національний університет”: “Релятивістська версія асимптотичної теорії процесів з перерозподілом при повільних іон-іонних та іон-атомних зіткненнях” (2009-2011 рр., шифр ДБ-714, № ДР – 0109U000872), “Релятивістські та квантово-електродинамічні ефекти при взаємодії багатозарядних іонів з важкими атомами та з постійними електричним і магнітним полями” (2012-2014 рр., шифр ДБ-806, № ДР – 0112U001552), “Інтегральні рівняння Додда–Грейдера в теорії одно- та двоелектронних процесів з перерозподілом у високоенергетичних іон-атомних зіткненнях” (2015-2017 рр., шифр ДБ-847, № ДР – 0115U001099) у тісній науковій співпраці з професорами К. Бартшатом та О. Зацарінним з Університету Дрейка (США), які є провідними спеціалістами в даній галузі. Все це дає змогу вважати результати дисертаційних досліджень достовірними і достатньо аргументованими. Надійність та ефективність розробленого методу БСР підтверджені добрим узгодженням розрахованих перерізів пружного розсіяння, збудження та іонізації атомів Mg, Sr і F електронним ударом з великою кількістю експериментальних даних.

Хочу також зробити деякі зауваження до змісту і структури роботи.

1. Автору слід було приділити більше уваги обґрунтуванню кінцевого вибору розмірів B -сплайнових розкладів для кожного з досліджених атомів.

2. У роботі одержано дані для двох лужноземельних атомів з валентними ns^2 -підоболонками: Mg ($n = 3$) та Sr ($n = 5$). Проте практично відсутня підсумовуюча порівняльна характеристика отриманих результатів як для цих, так і для інших досліджених атомів, особливо щодо різної складності їх зовнішніх електронних оболонок.

З цими зауваженнями пов'язані також такі запитання:

1. На основі яких критеріїв вибирався розмір розкладу сильного зв'язку?

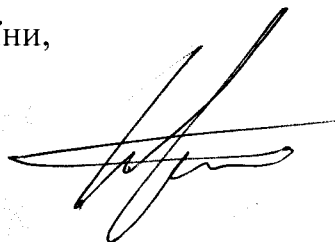
2. Чому в розрахунках БСР690 для атома фтору у R -матричний розклад включалося саме 650 псевдостанів?

Однак вказані зауваження не ставлять під сумнів правильність, цінність та новизну основних положень та висновків дисертаційної роботи Нодь Є.А.. Одержані результати висвітлені повною мірою в наукових статтях у провідних фахових виданнях та в тезах доповідей міжнародних конференцій. Зміст автореферату дисертації є ідентичним її основним положенням. Слід особливо зауважити, що робота, незважаючи на її виключно теоретичний характер, легко читається і це робить викладений матеріал цілком зрозумілим для широкого загалу фізиків-експериментаторів.

Висновок

Вважаю, що представлена дисертаційна робота “Врахування міжелектронної кореляції в розсіянні електронів на складних атомах у рамках методу R -матриці з B -сплайнами” цілком відповідає затвердженим Постановою Кабінету Міністрів України № 567 від 24 липня 2013 року вимогам “Порядку присудження наукових ступенів і присвоєння вченого звання старшого наукового співробітника”, а її автор, Нодь Єлизавета Андріївна, безумовно заслуговує присудження їй наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.04 – фізична електроніка.

Офіційний опонент,
старший науковий співробітник відділу
електронних процесів
Інституту електронної фізики НАН України,
доктор фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник



Боровик О. О.

Підпис Боровика О. О. *засвідчую:*

Вчений секретар
Інституту електронної фізики НАН України,
кандидат фізико-математичних наук



Торич З. З.

«05» Травня 2016 р.