

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

Дослідження енергетичної структури атомних систем та елементарних процесів їх взаємодії з електронами завжди було однією з ключових проблем сучасної фізики. В останні десятиріччя інтерес до проведення досліджень у цій області підтримується потребами в атомних даних для розв’язання проблеми керованого термоядерного синтезу з магнітним утриманням плазми. Правильна інтерпретація результатів новітніх астрофізичних спостережень, проведених за допомогою радіотелескопів, супутників і міжпланетних станцій, об’єктивно вимагає від спеціалістів у області атомної фізики перейти на новий рівень роботи як у якісному, так і в кількісному відношенні. Від теорії електронних і атомних зіткнень вимагається збільшення точності розрахунку атомних констант і характеристик розсіяння, розробка нових та вдосконалення існуючих методів опису зіткнення електронів з атомами та іонами, урахування все більш тонких деталей міжканальної взаємодії, електронних кореляцій і ефектів зв’язку дискретних станів з континуумом мішені. Існуючі на даний час методи, такі як метод сильного зв’язку (СЗ) каналів та R -матриці, забезпечують у значній мірі адекватний опис процесів розсіяння повільних електронів на простих атомах. Вони дозволяють найбільш повно врахувати сильно зв’язані відкриті канали, а також частину закритих. Основною перевагою цих методів є те, що фізичному процесу відповідає наочна картина, яка дозволяє прослідкувати за деталями механізмів реакцій. При цьому величина міжелектронної взаємодії, яка є причиною непружних процесів зіткнення, не обмежує застосування цих методів. Ця фундаментальна обставина дозволяє з єдиних позицій розглянути широке коло питань, пов’язаних з процесами пружного та непружного розсіяння повільних електронів на атомах та іонах. Однак, незважаючи на відмічені вище привабливі сторони методу СЗ та R -матриці, значні труднощі викликає коректне урахування електронних кореляцій та ефектів зв’язку дискретних станів з континуумом мішені. Крім цього, для зручності обчислень радіальні хвильові функції $F_{i\alpha}^{\Gamma}$ розсіяного електрона вибираються ортогональними атомним орбіталям. Такий вибір функцій $F_{i\alpha}^{\Gamma}$ фактично усуває потенційну можливість захоплення налітаючого електрона у незаповнені підоболонки мішені. Це в значній мірі обмежує застосовність згаданих вище методів до систем із незаповненими валентними підоболонками. Вільною від цих утруднень є запропонована в дисертаційній роботі Нодь Є.А. БСР-версія R -матричного методу, яка спирається на використання неортогональних орбіталей $F_{i\alpha}^{\Gamma}$. Це дозволило автору дисертаційного дослідження найбільш природним і послідовним чином розглянути пружні та

непружні процеси зіткнення повільних електронів зі складними атомами (Mg, Sr, Si та F), у тому числі з незаповненими підоболонками $2p$ та $3p$. Такі дослідження безумовно є актуальними як з фундаментальної, так і з прикладної точок зору.

Дослідження, результати яких включені в дисертаційну роботу, здійснювалися згідно з рядом науково-дослідних тем, які були виконувани на кафедрі теоретичної фізики ДВНЗ „Ужгородський національний університет”. Дисертаційна робота Нодь Є.А. 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 Mg, Si та F у рамках цієї співпраці були підтримані також низкою грантів Національного наукового фонду США, виданих, зокрема, для здійснення суперкомп’ютерних розрахунків [grants No. PHY-0555226 and No. PHY-0757755 (дослідження атома Mg); grants PHY-0903818, PHY-1068140, and the TeraGrid/XSEDE allocation TG-PHY090031 (дослідження атома Si); grants No. PHY-0903818 and No. PHY-1212450, and by the XSEDE supercomputer allocation No. PHY-090031 (дослідження атома F)].

Результати дисертаційної роботи Нодь Є.А. викладено у вигляді рукопису, який складається зі вступу, шести розділів, висновків, переліку використаних літературних джерел та додатку. Загальний обсяг роботи – 203 с. Вона містить 27 рисунків, 11 таблиць, а перелік першоджерел налічує 267 найменувань.

У **вступі** обґрунтовано актуальність і доцільність теми досліджень, сформульовано мету, предмет і методи досліджень, наукову новизну і наукову та практичну цінність отриманих результатів. Наведено відомості про особистий внесок автора та апробацію роботи.

У **першому розділі** подано короткий огляд сучасних теоретичних методів дослідження властивостей електронної структури атомних систем та процесів їх взаємодії з повільними електронами. Основну увагу зосереджено на методі Хартрі-Фока для розрахунку енергетичної структури, а також методах сильного зв’язку каналів, R -матриці та збіжного сильного зв’язку для опису процесів розсіяння.

У **другому розділі** викладено основні теоретичні засади пропонованих та реалізованих у дисертації наближень методу сильного зв’язку (СЗ) та методу R -матриці, які базуються на використанні неортогональних орбіталей як для побудови хвильових функцій зв’язаних станів, так і для представлення у внутрішній області радіальних орбіталей розсіяного електрона.

У підрозділах 2.1 та 2.3 для розв’язання рівнянь сильного зв’язку застосовується розвинений у дисертації варіант методу R -матриці, в основі якого лежить представлення радіальних частин орбіталей мішені та орбіталей розсіяного електрона у вигляді скінченного набору B -сплайнів з компактними носіями у внутрішній R -матричній області. Такий вибір базисних функцій

забезпечує швидку збіжність R -матричного розкладу, і немає потреби штучно уводити в діагональні R -матричні елементи т.з. поправки Баттла. Крім того, включення в R -матричний розклад хвильової функції зіткнення одно- та двократно збуджених конфігураційних станів мішені забезпечує доволі повне врахування ефектів багатоелектронних кореляцій. У розклад функції зіткнення можна також включити певну кількість псевдостанів, які дозволяють врахувати поляризованості основного і кількох нижніх збуджених станів, а також взаємодію дискретних станів з континуумом мішені. Поряд з використанням псевдостанів, точність розрахунку можна підвищувати шляхом включення у R -матричний розклад скінченного числа квадратично інтегрованих кореляційних функцій, які наближено враховують вклад закритих каналів. Така процедура дозволяє ефективно врахувати внесок багатьох закритих каналів у задачах з великою розмірністю.

У пункті 2.2.2 для побудови K -матриці та визначення фазових зсувів використовується процедура зшивання розв'язків рівнянь сильного зв'язку у внутрішній R -матричній області з асимптотичними розв'язками в зовнішній області. Матриця розсіяння S_{ia} і матриця переходу T_{ia} , які використовуються в дисертації для розрахунку перерізів розсіяння, визначаються за допомогою матричних співвідношень $\mathbf{S} = \mathbf{1} + \mathbf{T} = (\mathbf{1} + i\mathbf{K}) / (\mathbf{1} - i\mathbf{K})$.

У підрозділі 2.3 описано найбільш важливі властивості базисних сплайнів та детально розглянуто сплайн-алгоритми розв'язування систем диференціальних та інтегро-диференціальних рівнянь. Завдяки повноті та фінітності системи базисних сплайнів інтегро-диференціальні рівняння задачі розсіяння після їх дискретизації у внутрішній R -матричній області зводяться до системи алгебраїчних рівнянь з розрідженою, а саме стрічковою матрицею, що суттєво спрощує числовий аналіз такої системи.

У підрозділі 2.4 для опису багатоелектронних станів мішені використовується багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока (БКХФ), який у поєднанні із сплайн-розкладами залежних від терму одноелектронних орбіталей виявився ефективним засобом врахування електронних кореляцій. При цьому багатоелектронний ФКС-базис включав функції конфігураційних станів, що відповідають однократно та двократно збудженим конфігураціям атома-мішені.

У **третьому розділі** дисертації за допомогою методів БСР та БКХФ із залежними від терму неортогональними орбіталями проведено систематичні розрахунки енергій рівнів та сил осциляторів великої сукупності одно- та двоелектронних переходів у спектрі атома Mg. Порівняння результатів розрахунку з експериментальними даними та даними NIST показує, що реалізована в дисертації БСР-версія методу R -матриці дозволяє отримувати правильну кількісну картину розподілу сил осциляторів та енергетичних спектрів для складних багатоелектронних атомів.

У підрозділі 3.3 дисертації на основі розширеної БСР-версії методу R -матриці здійснено розрахунки диференціальних (ДП) та інтегральних (ІП) перерізів розсіяння повільних електронів на атомі Mg. Врахування електронних кореляцій здійснювалося шляхом змішування основної конфігурації атома Mg з електронними конфігураціями зі збудженим кором. Добре узгодження результатів БСР-розрахунків з недавніми вимірюваннями (група Предоевича та

ін.) кутових залежностей диференціальних перерізів пружного розсіяння і збудження п'яти нижніх станів $3s3p\ ^{1,3}P^o$, $3s3d\ ^1D$, $3s4s\ ^1S$ та $3s4p\ ^1P^o$ вказує на важливу роль ефектів електронної кореляції в низькоенергетичному розсіянні електронів на атомі Mg.

Четвертий розділ дисертації Нодь Є.А. присвячено дослідженню процесів розсіяння повільних електронів на атомах стронцію. В результаті розрахунку пружного і повного ІІ розсіяння e -Sr у комбінованому наближенні БСР-БКХФ31 виявлена наявність у їх енергетичних залежностях двох максимумів при енергіях 1.04 еВ та 1.86 еВ. Встановлено, що перший з них відповідає потужному резонансу форми $5s^24d[{}^2D]$ у 2D -хвилі, а другий – неповністю проявленому (через відкриття нових каналів розсіяння) резонансу $5s5p^2[{}^1D]\ ^2D$. Тим самим прояснена фізична природа складного поєднання резонансних і кореляційних явищ з проявами міжканальної взаємодії у низькоенергетичному зіткненні e -Sr.

У **п'ятому розділі** методом БСР досліджено процеси зіткнення e -Si в діапазоні енергій від порогу до 100 еВ. Для точного представлення хвильових функцій мішені був застосований метод БКХФ з неортогональними орбіталями. Розклад сильного зв'язку включав 34 зв'язані стани атома кремнію, утворених з конфігурацій [Ne] $3s^23p^2$, $3s3p^3$, $3s^23p4s$, $3s^23p5s$, $3s^23p4p$, $3s^23p5p$, $3s^23p3d$ та $3s^23p4d$ плюс сім псевдостанів для повного відтворення поляризованості основного стану і трьох нижчих збуджених станів атома кремнію. Включення в конфігураційні розклади атома-мішені Si конфігурацій з одно- та двоелектронними збудженнями дозволило значно поліпшити власні стани мішені шляхом включення додаткових електрон-електронних кореляційних ефектів. Важливою виявилася також збалансованість кореляційних ефектів, включених у стани мішені, з тими, які враховуються у хвильовій функції зіткнення, необхідній для отримання точних БСР-результатів з електрон-атомного розсіяння.

В результаті в дисертаційній роботі Нодь Є.А. вперше отримані енергетичні залежності ІІ розсіяння для найважливіших переходів із основного $3s^23p^2\ ^3P$ і метастабільних $3s^23p^2\ ^1D$ та $3s^23p^2\ ^1S$ -станів у 34 нижчі стани атома Si, включені у розклад сильного зв'язку. Перерізи пораховані в області енергій зіткнення від порогу реакції до 100 еВ. У роботі також показано, що врахування зв'язку з континуумом мішені Si (шляхом уведення семи поляризаційних станів) призводить до зменшення ІІ розсіяння e -Si на 10-50% для слабких спин-дозволених переходів з основного стану, та для більшості переходів з нижніх метастабільних станів, що свідчить про повільну збіжність розкладу сильного зв'язку.

Шостий розділ дисертації присвячено дослідженню процесів пружного і непружного розсіяння електронів на атомі фтору. Для точного представлення хвильових функцій мішені використовувався багатоконфігураційний метод Хартрі-Фока, який у поєднанні із сплайн-розкладами атомних орбіталей значно

прискорює збіжність чисельних розрахунків енергетичної структури та функцій конфігураційних станів (ФКС).

В широкому діапазоні енергій зіткнення (від порогу реакції до 100 еВ) здійснено систематичні розрахунки розсіяння електронів на атомах фтору. Розрахунки ґрунтуються на використанні двох різних наближень БСР39 та БСР690 методу R -матриці з B -сплайнами, що відрізняються числом і вибором фізичних станів та псевдостанів мішені. Встановлено, що: 1) електронні кореляції впливають як на абсолютну величину перерізів, так і на вигляд їх залежності від енергії зіткнення; 2) переріз пружного розсіяння e -F суттєво відрізняється від перерізу переносу імпульсу і не може слугувати в якості повноцінної заміни останнього в задачах моделювання плазми; 3) багата резонансна структура інтегрального перерізу розсіяння e -F зумовлена активним утворенням у процесі зіткнення проміжної компаунд-системи від'ємного іона $F^-(2p^4nl'n'l')$ із «розмороженою» $2p^6$ -підоболонкою.

Крім того, виявлено сильний вплив ефектів зв'язку дискретних станів з континуумом мішені на перерізи збудження при проміжних енергіях зіткнення. Наявність такого зв'язку вказує на те, що незаповнена $2p$ -підоболонка атома F суттєво впливає на всі величини, що характеризують процеси непружного розсіяння електронів атомами фтору. Виявлено велику чутливість характеристик (енергій та ширин), а також форми резонансів у перерізах e -F розсіяння до деталей міжканальної взаємодії.

Висновки узагальнено представляють матеріали дослідження і стисло резюмують основні результати.

В цілому слід вважати, що отримані автором результати є важливими для розуміння різноманітних проявів міжелектронної кореляції в ізольованих атомних системах та процесах їх взаємодії з повільними електронами.

Результати дисертаційної роботи містять новизну і представляють наукову цінність. Найважливішим практичним результатом слід вважати широке застосування запропонованої в дисертації БСР-версії методу R -матриці до розрахунку характеристик розсіяння повільних електронів на атомах Mg, Sr, Si та F з отриманням великої сукупності інтегральних та диференціальних перерізів розсіяння електронів на вказаних атомах. У фундаментальному плані значно більшу цінність обіцяють представлені теоретичні узагальнення результатів розрахунку, особливо що стосується врахування електронної кореляції в електрон-атомних зіткненнях.

До **недоліків та опущень** дисертаційної роботи слід віднести:

1. У методі R -матриці дуже важливим є вибір радіусу внутрішньої області $r=a$. На жаль, не для всіх розглянутих атомних систем цей вибір з'ясовано достатньо детально.

2. Як перевірявся факт достатньої точності хвильових функцій мішені? Погодьтеся, що для такої перевірки узгодження з експериментом одних лише енергій зв'язку і навіть сил осциляторів зазвичай недостатньо.

3. При розрахунках розсіяння електронів на атомних системах магнію, кремнію і фтору робиться припущення про несуттєву роль релятивістських ефектів. Однак, в дисертаційній роботі це припущення не підкріплене конкретними числовими оцінками.

Вказані недоліки, однак, не мають принципового характеру і не впливають на високу оцінку результатів дисертаційної роботи Нодь Є.А.

Загалом, дисертаційна робота Нодь Є.А. може бути оцінена як високоякісне дослідження в галузі теоретичної атомної фізики з виходом до широкого практичного застосування. Результати досліджень опубліковані у відомих вітчизняних та міжнародних журналах, добре відомі спеціалістам у даній галузі. Вони взаємно узгоджуються між собою та доповнюють одне одного, що слугує додатковим аргументом на користь надійності і достовірності отриманих даних.

Висновок: 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 від № 567 24 липня 2013 року вимогам Департаменту атестації кадрів МОН України щодо кандидатських дисертацій, 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,
завідувач проблемної
науково-дослідної лабораторії іонних процесів,
доцент кафедри матеріалів реакторобудування,
кандидат фізико-математичних наук

Бобков В.В.

Підпис канд. фіз.-мат. наук, с.н.с.
Бобкова Валентина Васильовича засвідчую:

Вчений секретар
Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна

« 10 » травня 2016 р.

