

ВІДГУК ОФІЦІЙНОГО ОПОНЕНТА

на дисертацію **Романа Володимировича Тимчика**

«Розрахунки нижніх автоіонізаційних станів атомів берилію, магнію, кальцію»,
подану на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук
за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика

Автоіонізація – це процес спонтанного випускання (емітування) зовнішньооболонкового електрона збудженим атомом; при цьому нейтральний атом перетворюється у однократно іонізований іон; процес безвипромінний. Автоіонізаційні стани можна виявити у перерізі іонізації атома через взаємодію з налітними фотонами чи електронами; останній випадок розглядається у дисертації. Автоіонізаційний (дискретний) стан є зв'язаний стан атома, з енергією вищою за енергію порогу іонізації, тобто, лежить у континуумі неперервних станів. Через те що автоіонізаційний рівень має скінчений час життя, він характеризується не лише енергією рівня, але й скінченою шириною рівня. Теоретичний розрахунок цих величин, а також ймовірностей переходу, які дають спостережувані (наприклад, перерізи іонізації), становить важливий розділ у сучасній теорії атомів.

Для дослідження автоіонізаційних станів атомів теоретиками запропоновано низку методів, які обговорено у першому розділі дисертації. У своєму ж дослідженні Роман Володимирович Тимчик використовує один з них – метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел. Цей формалізм вже застосовувався для аналізу проявів автоіонізаційних станів двоелектронного атома гелію (S.M.Burkov, N.A.Letyaev, S.I.Strakhova, T.M.Zajac, Photon and electron ionisation of helium to the $n=2$ state of He^+ . – *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, **21** (7), 1195–1208 (1988)). Розвинути далі метод у контексті складніших атомів, розробити комп'ютерну реалізацію обчислень, застосувати методику до знаходження енергій і ширин автоіонізаційних станів атомів берилію, магнію, кальцію – ось задачі, результати яких підсумовані у дисертаційній роботі Романа Володимировича Тимчика. Вважаю ці студії потрібними і своєчасними.

У другому розділі дисертації «Вибір хвильової функції основного стану для гелієподібних іонів та атомів берилію, магнію, кальцію» обговорюється вибір хвильової функції основного стану атома. Мова йде про 41-параметричну варіаційну хвильову функцію Твіда для гелієподібних систем та 4-, 12-, і 20- електронні функції Гартрі-Фока для атомів берилію, магнію і кальцію. Про якість вибраних хвильових функцій основного стану свідчать таблиці 1-4 і 5, у яких зібрані результати розрахунку параметрів автоіонізаційних станів атома гелію

(енергії, ширини, парціальні ширини). Недоліком є те, що тут не пояснено, що таке парціальні ширини автоіонізаційних станів, значення яких приведені у таблицях 1-5. Далі, нема подібного обговорення функцій основного стану Гартрі-Фока, які використовуються потім для розрахунку автоіонізаційних станів атомів берилію, магнію і кальцію.

Третій розділ дисертації «Метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел у задачі іонізації гелієподібних іонів та атомів Be, Mg, Ca електронним ударом» містить виклад формалізму для знаходження амплітуди іонізації в результаті розсіювання налетілих швидких електронів. Приймається Борнове наближення (перший порядок теорії збурень за потенціалом взаємодії електрона з розсіювачем), хвильова функція основного стану розсіювача вже відома (розділ 2), залишається знайти хвильову функцію кінцевого стану розсіювача, тобто, атома в околі автоіонізаційних станів; тоді були б відомими амплітуди ймовірностей переходу в кінцеві стани, а отже спостережувані величини (узагальнені сили осциляторів чи перерізи іонізації). Для знаходження хвильової функції атома в околі автоіонізаційних станів використовується підхід, який започаткував Фано ще у 1961 році (U.Fano, Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts. – *Physical Review*, **124** (6), 1866–1878 (1961)). Розгляд рівнянь для визначення (3.12) ведеться у представленні комплексної енергії. У третьому розділі описано числову реалізацію методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел, а також обговорено зв'язок з іншими наближеннями для знаходження хвильової функції (3.12).

У четвертому розділі дисертації «Енергетичні положення і ширини автоіонізаційних станів іонів H, Li⁺, Be⁺⁺ та атомів Be, Mg, Ca у методі взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел» зібрані результати обчислень автоіонізаційних станів трьох двоелектронних іонів і трьох багатоелектронних атомів. Вони представлені у восьми таблицях (енергії і ширини автоіонізаційних станів) і на трьох рисунках (узагальнені сили осциляторів як функції енергії, яку втратив налетілий електрон через розсіяння). У таблицях є також результати теоретичних розрахунків інших авторів і експериментальні дані. Добра згода всіх значень для енергії і ширини автоіонізаційних станів підтверджує правильність опрацьованої схеми на основі методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел. А стосовно трьох рисунків для $\partial f/\partial E$ у мене є питання: чому автор привів тільки свої результати? Хіба не можна було привести там також, скажімо, експериментальні дані?

При читанні дисертації у мене виникло ще декілька питань, на які я просив би автора відповісти підчас захисту дисертації. Перше питання стосується потенціалу взаємодії електрона з атомом. Який це потенціал? Друге питання стосується хвильової функції (3.12).

У лівій стороні є радіус вектори r_1 і r_2 . Який їх зміст? Що залежить від r_1 і r_2 у правій стороні? Далі, чому б не дослідити хвильову функцію автоіонізаційного стану, показавши, скажімо, просторовий розподіл квадрату її модуля? Третє питання стосується ширини автоіонізаційного рівня. Оскільки профіль лінії не є симетричним (це видно і на рисунках 1-3), то що розуміти під «шириною» рівня? Ще одне запитання номенклатурне. На стор. 27,28 (а потім і стор. 48) приведено схематичні зображення процесів розсіяння електрона атомом і іонізації атома через зіткнення з електроном. Чому у правій стороні I_1 , а не L_1 ? Звичайно, L характеризує значення сумарного орбітального моменту електронів у символі терму багатоелектронного атома, а l – орбітальне квантове число електрона, яке визначає електронну конфігурацію атома.

Мушу відзначити недоліки у оформленні дисертації і автореферату. Дисертацію і автореферат треба було б краще вчитати і усунути описки та мовні огріхи. Приведу кілька прикладів.

Стор. 43 (а потім і стор. 121), «ліній розпаду Аугера» чи Оже?

Стор. 46, написано «для вимірювань перерізів атомів металів»; не дуже зрозуміло.

Стор. 46, «метод перетинаючихся пучків» (crossed beam technique) чи перехресних?

Стор. 55, «узгоджений з виглядом оператора»; не зрозуміло якого саме оператора.

Стор. 58, формула (1.15), символ Кронекера має 3 індекси.

Як на мене, замість «машинного часу» краще писати «комп'ютерного часу».

Стор. 63, написано «Для атомів першого ряду»; що тут мається на увазі?

Дисертант часто вживає «легко знайти»; у багатьох випадках цього варто було б уникнути.

Стор. 73, у першому доданку рівняння (1.49) мають бути круглі дужки, а не модуль.

Стор. 113, 114, є поклики на систему рівнянь (2.81), але формул з таким номером у дисертації нема.

Стор. 122, «тріальні хвильові функції» чи пробні?

Характеризуючи роботу в цілому, наголошу, що у дисертації розв'язано теоретичну задачу, яка тісно пов'язана з експериментами. Результати для енергій і спектральних ширин автоіонізаційних станів, представлені у дисертації, порівнюються з теоретичними результатами, отриманими іншими авторами з використанням інших методів, а також з результатами експериментів (таблиці 6-13); добра згода може слугувати свідченням достовірності вислідів дисертації. Новизна ж полягає у поширенні формалізму, використаного раніше для аналізу процесу фотоіонізації чи іонізації швидкими електронами гелію, на випадок складніших багатоелектронних систем. Практичне значення, на мою думку, є у тому, що запропонована схема дослідження автоіонізаційних станів застосовна і до інших

атомних систем; написані комп'ютерні програми, що реалізують формалізм взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел для знаходження характеристик автоіонізаційних станів атомів; оглядова частина дисертації може бути корисна для тих читачів, які починають знайомитися фізикою іонізації атомів у результаті зіткнень з фотонами чи електронами. Результати дисертації опубліковані в кількох міжнародних і всеукраїнських журналах; вони були представлені на кількох міжнародних і всеукраїнських конференціях. Автореферат дисертації правильно і повно відображає зміст самої дисертації. Роман Володимирович Тимчик успішно доповів свою дисертаційну роботу на семінарі Інституту фізики конденсованих систем НАН України 6 вересня 2018 року.

У підсумку, вважаю, що дисертація Р.В. Тимчика «Розрахунки нижніх автоіонізаційних станів атомів берилію, магнію, кальцію» цілком відповідає всім вимогам «Порядку присудження наукових ступенів», затвердженим постановою КМ України від 24 липня 2013 р. №567, щодо кандидатських дисертацій, а її автор Роман Володимирович Тимчик заслуговує присудження йому наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика.

Львів, 8 березня 2019 року

Офіційний опонент

завідувач відділу квантової статистики

Інституту фізики конденсованих систем НАН України,

доктор фізико-математичних наук,

старший науковий співробітник

О.В. Держко

ПІДПИС О.В. ДЕРЖКА СВІДЧУ

Вчений секретар

Інституту фізики конденсованих систем НАН України

кандидат фізико-математичних наук



Р.С. Мельник