

ВІДГУК

офіційного опонента Ремети Євгена Юрійовича
на дисертаційну роботу 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

Одно- та двоелектронні процеси з перерозподілом у повільних зіткненнях багатозарядних іонів з атомами та молекулами впродовж останніх років стали об'єктами багаточисленних експериментальних та теоретичних досліджень. Такі процеси відіграють важливу роль при розв'язанні низки проблем керованого термоядерного синтезу, лабораторної та астрофізичної плазми, квантової електроніки, в тому числі для створення когерентних джерел випромінювання в ультрафіолетовому та рентгенівському діапазонах, фізики верхніх шарів атмосфери, тощо. Важливість детального вивчення таких реакцій, як одно- та двоелектронна перезарядка, обумовлена двома основними причинами – значними, в атомних масштабах, їх повними перерізами та ефективним селективним заселенням високозбуджених станів при захопленні атомного або молекулярного електрона.

Незважаючи на високу ефективність сучасної обчислювальної техніки та розрахункових методів, детальний аналіз конкретних процесів з передачею електронів при зіткненнях іонів з молекулами все ще залишається вельми складною задачею. Тому, для описання одно- і двоелектронних процесів з перерозподілом важливо розвивати аналітичні методи, які дозволяють отримати розв'язок задачі у загальному вигляді, встановити залежності фундаментальних характеристик (потенціалів одно- і двоелектронної обмінної взаємодії, парціальних та повних перерізів) від основних параметрів задачі та розкрити фізичну картину досліджуваних явищ. Основою аналітичних методів дослідження процесів з перерозподілом частинок є асимптотичний підхід, який виявився доволі успішним при вивченні одно- та двоелектронної перезарядки у повільних іон-атомних зіткненнях. Проте, асимптотична теорія одно- та двоелектронних процесів з перерозподілом в іон-молекулярних зіткненнях (особливо в реакціях за участю полярних молекул) розроблена в значно меншій мірі, що пов'язано із складністю теоретичного описання обмінно-кореляційних, орієнтаційних та бар'єрних ефектів, які визначають динаміку вказаних процесів.

Дисертаційна робота Карбованця Олександра Мирославовича присвячена розробці адіабатичної асимптотичної теорії двох груп процесів з перерозподілом частинок – одноелектронної перезарядки повільних багатозарядних іонів на гомоядерних і полярних молекулах та дипольно-зв'язаних аніонах, а також подвійної перезарядки полярних молекул на багатозарядних іонах та двозарядних катіонах. Велика увага при цьому приділялася з'ясуванню основних меха-

нізмів досліджуваних процесів та впливу на їх характеристики різних фізичних факторів, зокрема, обмінних, кореляційних, орієнтаційних, тощо.

Свідченням актуальності проблематики досліджень дисертаційної роботи є те, що основні її результати були одержані автором у процесі виконання чотирьох науково-дослідних тем ДВНЗ “УжНУ”, перелік яких приведено у дисертаційній роботі.

У своїх теоретичних дослідженнях автор використовував добре розроблені і апробовані методи асимптотичної теорії атомних зіткнень, такі, як методи поверхневих інтегралів та функцій Гріна, квазікласичний метод, багатовимірний метод стаціонарної фази; програми чисельного розрахунку перерізів реакцій тестувалися на всебічно експериментально та теоретично вивчених процесах перезарядки. Це дає підстави вважати результати, одержані у дисертаційній роботі, достовірними.

Все це, безумовно, свідчить про актуальність та перспективність тематики дисертаційних досліджень О.М. Карбованця.

Дисертаційна робота Карбованця О. М. складається із вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел (171 найменування) та додатку. Загальний обсяг роботи 168 сторінок, вона містить 20 рисунків і 8 таблиць.

У **вступі** обґрунтовано актуальність та доцільність вибраної теми досліджень, чітко сформульовано мету і завдання роботи, визначено об’єкт, предмет і методи досліджень, викладено наукову новизну і практичну цінність одержаних результатів та обґрунтовано їх достовірність, наведено інформацію про апробацію роботи і особистий внесок здобувача. Дуже коротко дано огляд сучасних теоретичних методів досліджень, що використовуються у фізиці зіткнень атомних та молекулярних частинок.

У **першому розділі** дисертації міститься короткий огляд літератури, який в загальних рисах окреслює хід розвитку та стан асимптотичної теорії повільних атомних зіткнень на початок дисертаційних досліджень автора. Також тут представлено огляд аналітичних асимптотичних методів у теорії повільних іон-атомних та іон-молекулярних зіткнень з перерозподілом. Проаналізовано дві обставини, які спрощують задачу теоретичного дослідження таких зіткнень у випадках, коли їх динаміка визначається великими міжатомними відстанями R . При великих міжцентрових відстанях можна ввести малий параметр – відношення характерного розміру частинок до цієї відстані R , що дозволяє представити потенціали міжчастинкової взаємодії розкладом у асимптотичні ряди, які відповідають дальnodійній та обмінній типам взаємодій. Головною тут є обмінна взаємодія, яка обумовлена перекриттям хвильових функцій валентних електронів та відповідає перебуванню електронів на великих відстанях від своїх молекулярних чи атомних залишків. Коротко аналізуються особливості прояву обмінної взаємодії квазімолекулярних станів, утворених при зіткненнях. Наводяться посилання на відповідні наукові праці, що розвивали методи обчислення потенціалів обмінної взаємодії за допомогою методу поверхневих інтегралів. У цьому контексті коротко розглянуто резонансні та нерезонансні двоелектронні іон-атомні процеси, двоелектронна перезарядка та одноелектронне захоплення з

одночасним збудженням чи іонізацією мішені, як найбільш ймовірні. Також дано короткий огляд розвитку асимптотичних методів для описання одно- та двоелектронної перезарядки при іон-молекулярних зіткненнях.

У **другому розділі** побудовано електронні хвильові функції квазімолекулярних систем, які утворені багатозарядним іоном та молекулою. Для цього конфігураційний простір електронних координат розбивається на три основні області, що визначаються співвідношенням між відстанями електрона від центрів квазімолекул і міжцентровою відстанню R , у яких хвильова функція задається різними типами асимптотичної поведінки. Коротко сформульовано важливу процедуру зшивання розв'язків хвильової функції, знайдених у цих областях. Одержано аналітичні представлення для одноелектронних хвильових функцій у міжцентровій області для випадків квазімолекул, утворених іоном та двоатомною гомоядерною молекулою, полярною молекулою, а також дипольно-зв'язаним аніоном. У квазікласичному наближенні методом двоцентрової функції Гріна для модельного кулоно-дипольного потенціалу побудовано аналітичне зображення асимптотики хвильової функції полярної молекули у околі полярного катіона. Показано, що отримані результати при відповідних граничних умовах переходять у відомі аналітичні вирази, одержані раніше за допомогою більш простих методів, наприклад, Ландау-Херрінга.

Третій розділ присвячено розвитку квазікласичного варіанту асимптотичної теорії для розрахунку важливих потенціалів одноелектронної обмінної взаємодії між електронними станами квазімолекулярної системи, дослідженими у розділі 2. Потенціали обмінної взаємодії обчислено аналітично в рамках методу поверхневих інтегралів. Проаналізовано їх фізичну структуру та критично розглянуто умови їх отримання. Показано, що у граничних випадках вони відтворюють низку відомих результатів, одержаних для іон-атомних взаємодій та асимптотично великих міжцентрових відстаней. Для узагальнення результатів, отриманих у адіабатичному наближенні, на випадок великих (але ще нерелятивістських) швидкостей зіткнення враховано перенос імпульсу електронном у процесі перезарядки. У цьому випадку потенціал одноелектронної обмінної взаємодії стає залежним від швидкості. Для пар частинок H_2+H^+ , H_2+Ar^{q+} ($q=6,8,14,16$) розраховано парціальні та повні перерізи процесів одноелектронної перезарядки, в тому числі зі збудженням у кінцевому стані. При швидкостях більше 1 а.о. продемонстровано вплив на енергетичну поведінку перерізів ефекту переносу активним електронном імпульсу. Розраховано інтегральні перерізи одноелектронної перезарядки іонів H^+ , Be^{2+} , B^{2+} на полярних молекулах CO та C_3H_8 при повільних зіткненнях. Виявлено сильну залежність перерізів процесів перезарядки при зіткненні $B^{2+}+CO$ та $Be^{2+}+C_3H_8$ від орієнтації дипольних моментів молекулярних залишків. З приведених рисунків видно добру узгодженість розрахованих перерізів всіх досліджуваних реакцій перезарядки з експериментальними даними та з теоретичними розрахунками, одержаними іншими теоретичними методами, зокрема, методом молекулярних орбіталей. Варто підкреслити, що теоретичні розрахунки перерізів перезарядки у зіткненнях $B^{2+}+CO$, $Be^{2+}+CO$ та $Be^{2+}+C_3H_8$ проведено вперше.

У **четвертому розділі** детально розвинено квазікласичний варіант асимптотичної теорії для обчислення потенціалів двоелектронної обмінної взаємодії, що характеризують важливі (з огляду на їх достатньо великі перерізи) двоелектронні процеси з перерозподілом при повільних зіткненнях полярних молекул з атомними та молекулярними іонами. Досліджено загальну структуру матричних елементів двоелектронного обміну при зіткненні полярної молекули з багатозарядним іоном; для них одержано аналітичні представлення та з'ясовано основні механізми двоелектронних переходів – прямого і постадійного двоелектронного захоплення. Одержані для двоелектронних обмінних матричних елементів вирази застосовано до чисельних розрахунків залежності енергії двоелектронної обмінної взаємодії від міжцентрової відстані при різних значеннях орієнтації дипольного моменту молекули HF у процесі подвійної перезарядки $N^{3+} + HF$. Розроблений варіант теорії поширено на випадок взаємодії полярних молекул з полярними двозарядними катіонами, що дозволило розрахувати інтегральні перерізи резонансної двоелектронної перезарядки при повільних зіткненнях $CO^{2+} + CO$. Проведений кількісний і якісний аналіз енергетичної поведінки перерізу цієї реакції показав, що в області швидкостей, менших за 0.1 а.о., усереднений за орієнтаціями молекулярних залишків переріз стрімко зростає зі зменшенням швидкості. При швидкості 0.005 а.о. він досягає достатньо великого значення $3.9 \cdot 10^{-15} \text{ см}^2$, що вказує на те, що для даної реакції основним механізмом захоплення двох електронів є одноступінчатий двоелектронний перехід.

У **висновках** узагальнено та сформульовано основні результати досліджень дисертаційної роботи.

Результати дисертаційної роботи містять новизну і мають наукову цінність. Найважливішими фундаментальними та практичними результатами дисертації слід вважати розвинення аналітичних методів адіабатичної асимптотичної теорії непружних процесів з перерозподілом, отримання аналітичних представлень для матричних елементів одно- та двоелектронної перезарядки за участю полярних та гомоядерних молекул, а також їх застосування до розрахунків перерізів конкретних реакцій у широкому діапазоні швидкостей зіткнень.

Поряд з цим, до змісту дисертаційної роботи О.М. Карбованця можна зробити наступні зауваження:

– на мою думку, огляд теоретичних методів фізики атомних зіткнень варто було би дещо розширити з метою детального порівняльного опису різних методів досліджень: класичних; квазікласичних; квантовомеханічних; найсучасних числових, що базуються на новітніх *ab initio*, молекулярних розрахунків;

– більшу увагу слід було приділити застосуванню кулоно-дипольного потенціалу для теоретичного дослідження інших елементарних процесів за участю полярних молекул;

– доцільно було б детальніше вказати на можливість застосування розвинутого методу до описання таких важливих процесів зіткнень важких частинок, як дисоціація молекул, дисоціація зі збудженням та іонізацією їх фрагментів.

Водночас, вказані зауваження жодним чином не применшують значення отриманих в дисертації результатів і не впливають на загальну високу оцінку дисертаційної роботи Карбованця О.М.

Загалом, дисертаційна робота Карбованця О.М. є завершеним високоякісним науковим дослідженням, яке пройшло всі етапи розвитку від постановки проблеми, розробки адекватних математичних моделей побудови хвильових функцій дискретного спектру досліджуваних квазімолекулярних систем, обчислення матричних елементів одно- та двоелектронної обмінної взаємодії, і, зрештою, до розрахунків повних і парціальних перерізів електронного захоплення у повільних іон-молекулярних зіткненнях.

Всі основні результати опубліковано у відомих реферованих відчизняних та міжнародних журналах, широко представлялись на міжнародних конференціях. Число публікацій за темою дисертації є достатньою як за загальною кількістю (20), так і за якістю наукових праць (10 журнальних статей, з яких 4 – у провідних закордонних виданнях). Автореферат оформлено згідно чинних вимог і він повністю відображає зміст та основні положення дисертаційної роботи.

Вважаю, що дисертаційна робота “Адіабатична асимптотична теорія одно- і двоелектронної перезарядки за участю полярних та гомоядерних молекул” за обсягом виконаних досліджень, науковою і практичною цінністю отриманих результатів цілком відповідає вимогам “Порядку присудження наукових ступенів і присвоєння вченого звання старшого наукового співробітника”, затвердженого постановою Кабінету Міністрів України від 24 липня 2013 року, № 567, а її автор, Карбованець Олександр Мирославович, безумовно заслуговує присудження йому наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук зі спеціальності 01.04.04 – фізична електроніка.

Офіційний опонент,
старший науковий співробітник
відділу теорії елементарних взаємодій
Інституту електронної фізики
Національної академії наук України,
доктор фізико-математичних наук,
старший науковий співробітник

Ремета Є.Ю.

Підпис Ремети Євгена Юрійовича
засвідчую:
Вчений секретар
Інституту електронної фізики НАН України,
кандидат фізико-математичних наук



14 серпня 2016 р.

Торич З.З.