Облікова картка ДіР

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0221U100745

Державний реєстраційний номер: 0119U102495

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 08-01-2021

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 2

Назва етапу: Розрахунки перерізів збудження (4p55s5p)4S3/2 квазіметастабільного стану та дублетних (4p55s2)2P3/2,1/2 автоіонізаційних станів атома рубідію в діапазоні енергій зіткнень від порогів до 700 еВ. Розрахунки енергій, абсолютних перерізів збудження та іонізації іонів підгрупи алюмінію. Візуалізація, обробка та аналіз отриманих результатів досліджень з використанням відповідних прикладних програм, їх ототожнення й інтерпретація. З'ясування ролі кореляційних ефектів у перебігу елементарних процесів при взаємодії електронів зі складними атомами та іонами. Написання заключного звіту.

Початок етапу: 01.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Інститут електронної фізики НАНУ

Код за ЄДРПОУ: 05540008

Місцезнаходження: вул.Університетська,21, м. Ужгород, Ужгородський р-н., Закарпатська обл., 88017, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380312643524

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Національна академія наук України

Код за ЄДРПОУ: 00019270

Місцезнаходження: вул. Володимирська, 54, м. Київ, Київська обл., 01030, Україна

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380442396594

VI. Джерела, напрями та обсяги фінансування ДіР

Підстава для проведення ДіР: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 6541030

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 100

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Динаміка формування збуджених станів атомів та іонів у плазмі на парі металів: механізми елементарних процесів

Назва роботи англійською:

Dynamics of formation of the atomic and ionic excited states in the metal-vapor plasma: mechanisms of elementary processes

Реферат українською:

РЕФЕРАТ Звіт про науковий проєкт: 54 с., 2 табл., 12 рис., 53 джерела. АТОМ, АВТОІОНІЗАЦІЯ, ЗБУДЖЕННЯ, ІОНІЗАЦІЯ, ЕФЕКТИВНИЙ ПЕРЕРІЗ, КОРЕЛЯЦІЙНІ ЕФЕКТИ, ТЕОРЕТИЧНЕ НАБЛИЖЕННЯ. Об'єкт дослідження – процеси утворення і розпаду автоіонізаційних станів атома рубідію, іонів талію та свинцю, явища резонансного збудження та кореляційних ефектів, що супроводжують ці процеси. Мета роботи – дослідження ролі кореляційних ефектів у перебігу елементарних процесів при парних зіткненнях електронів з атомами лужних металів та іонами підгрупи алюмінію, що мають місце у плазмових середовищах з домішками пари металів, отримання енергетичних і динамічних характеристик, атомних констант та моделювання основних механізмів міжчастинкової взаємодії. Методи дослідження – в рамках сучасного програмного пакету Flexible Atomic Code для отримання перерізів збудження використовувались наближення спотворених хвиль та Борна, які враховують релятивістський характер збудження складних атомів шляхом використання гамільтоніана Дірака-Кулона та чисельного розрахунку базису релятивістських радіальних орбіталей Дірака-Фока-Слетера. Розрахунки проведено також у багатоконфігураційних наближеннях, що дозволило встановити роль кореляційних поправок при розрахунку перерізів збудження. Основні наукові результати – розраховано енергії електронного збудження, перерізи збудження, ймовірності електронного розпаду та коефіцієнти розкладу за власними векторами для вибраних автоіонізаційних станів атома рубідію, іонів талію та свинцю. Здійснено аналіз найбільш вдалого врахування різного набору конфігурацій остова для цих важких атомів та іонів. Досліджено параметр відношення інтенсивності R0 для атома рубідію, який дав змогу оцінити достовірність експериментальних та теоретичних даних. Одержані результати дали змогу не тільки інтерпретувати наявні експериментальні дані, а й модифікувати теоретичні підходи та наближення для розрахунків фундаментальних характеристик складних електрон-іонних систем.

Реферат англійською:

ABSTRACT Research project report: 54 pages, 2 tables, 12 figures, 53 sources. ATOM, AUTOIONIZATION, EXCITATION, IONIZATION, EFFECTIVE CROSS SECTION, CORRELATION EFFECTS, THEORETICAL APPROXIMATION. The object of research - the processes of formation and decay of autoionization states of the Rb atom, Tl and Pb ions, the phenomena of resonant excitation and correlation effects that accompany these processes. The aim of the work is to study the role of correlation effects in the course of elementary processes in paired collisions of electrons with alkali metal atoms and ions of the aluminum subgroup, which take place in plasma media with metal vapor impurities, obtaining energy and dynamic characteristics, atomic constants and modeling of basic interparticle interaction mechanisms. Research methods - within the modern software package Flexible Atomic Code to obtain excitation cross sections used distortion of wave and Born approximations, which take into account the relativistic nature of excitation of complex atoms by using the Dirac-Coulomb Hamiltonian and numerical calculation of the basis of relativistic Dirac-Fock radial orbitals. The calculations were also performed in multi-configuration approximations, which allowed to establish the role of correlation corrections in the calculation of excitation cross sections. The main scientific results are calculated electron excitation energies, excitation cross sections, electron decay probabilities and eigenvector decomposition coefficients for selected autoionization states of Rb atom, Tl and Pb ions. The analysis of the most successful consideration of the different

set of skeleton configurations for these heavy atoms and ions is carried out. The parameter of the intensity ratio R0 for the Rb atom was investigated, which made it possible to evaluate the reliability of experimental and theoretical data.

Індекс УДК: 533.93, 539.182/.184;535.33/.34, 539.184/186; 533.92

Коди тематичних рубрик: 29.27.07, 29.29.15

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Роман Вікторія Іванівна

Науковий ступінь: к. ф.-м. н.

Вчене звання:

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

VIII. Наукова (науково-технічна) продукція (НТП)

Назва НТП українською: Модифіковані теоретичні методи опису структури іонів та характеристик їх зіткнень з електронами.

Назва НТП англійською: Modified theoretical methods for describing the structure of ions and the characteristics of their collisions with electrons.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: Інші теоретичні методи дослідження.

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Результати досліджень можуть бути використані при розробці і модифікації різних теоретичних моделей, підходів і наближень, зокрема наближення спотворених хвиль, бінарних зіткнень та Кулон-Борна при переході від об'єктів дослідження атомів до іонів.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Результати досліджень можуть бути використані при розробці і модифікації різних теоретичних моделей, підходів і наближень.

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 03.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Споживачі продукції: Інститут теоретичної фізики ім. М.М. Боголюбова НАНУ, Інститут теоретичної фізики Вільнюського університету Литви

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

Назва НТП українською: Динаміка формування збуджених станів атомів та іонів у плазмі на парі металів: механізми елементарних процесів.

Назва НТП англійською: Dynamics of formation of excited states of atoms and ions in plasma on a pair of metals: mechanisms of elementary processes.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Фундаментальні характеристики атомних систем.

Галузь застосування: Бази даних NIST (США), МАГАТЕ (ЄС)

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Ефективні перерізи елементарних процесів, енергії збудження, іонізації, часи життя, канали утворення і розпаду автовідривних та автоіонізаційних станів досліджуваних атомів та іонів будуть використані у міжнародних базах даних NIST (США), МАГАТЕ (ЄС).

Соціально-економічна спрямованість НТП: Результати є необхідними для фізики плазми та керованого термоядерного синтезу.

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу: 03.2020

Закінчення етапу: 12.2020

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Характер співробітництва з інвестором

Потрібний обсяг інвестицій, тис. грн.:

Права, що надаються інвестору після завершення роботи:

Наявність бізнес-плану:

Техніко-економічне обгрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

1. V. Roman, Sh. Demesh Electron-impact excitation of the (4p55s5p)4S3/2 quasimetastable state in Rb // Journal of Physics: Conference Series. – 2020. – V. 1412. – P. 132012. DOI: 10.1088/1742-6596/1412/13/132012

2. V.I. Roman, O.M. Pop, I.V. Pylypchynets Theoretical calculations of electron excitation the lowest autoionizing states in Rb atom // Scientific Herald of Uzhhorod University. Series Physics. – 2020. – № 48. P.143-152.

3. V. Roman, V. Jonauskas, S. Kučas, A. Gomonai, A. Gomonai and Y. Hutych Excitation of the 6d 2D5/2,3/2□6p 2P1/2,3/2 transitions of Pb+ ion by electron impact: experiment and theory // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2020. (sent for publication)

4. Symkanych O.I., Maslyuk V.T., Boyko N.V., Tymoshchuk S.A., Svatiuk N.I., Pop O.M., Nyorba Bobikov M.M., Pitchenko G.F., Turkhovskij O.M., Romanyuk N.I., Megela I.G., Tarnay O.A., Gajnish I.I. Time evolution of chemical, physical parameters and biological activity of glucose and sucrose aqueous solutions irradiated on a M-30 Microtron with an energy of 12.5 MeV // Scientific Herald of Uzhhorod University. Series Chemistry – 2020. – № 43. P. 92-101. DOI: 10.24144/2414-0260.2020.1.92-101

5. В.І. Роман, О.М. Поп, І.В. Пилипчинець Використання програмного пакета Flexible Atomic Code для розрахунків фундаментальних характеристик збуджених станів атома рубідію // XXVII щорічна наукова конференція Інституту ядерних досліджень НАН України. До 50-річчя ІЯД НАН України (Київ, 21 - 25 вересня 2020 року) - Київ : Ін-т ядерних дослідж., 2020. – С. 214-215.

6. V.I. Roman, A.N. Gomonai, A.I. Gomonai, L.A. Bandurina Absolute emission cross section in electron-impact excitation of the 190.8 nm (6s6p 3Po1 □ 6s2 1S0) intercombination line of the Tl+ ion: experiment and theory // International Conference on Elementary Processes in Atomic Systems (Cepas'20) 11-14 August 2020, Debrecen, Hungary.

7. V. Roman, A. Borovik Autoionization and single ionization of K atoms by electron impact // International Conference on Elementary Processes in Atomic Systems (Cepas'20) 11-14 August 2020, Debrecen, Hungary.

8. V. Roman, A. Borovik «The role of autoionization in single ionization of Rb atoms // International Conference on Elementary Processes in Atomic Systems (Cepas'20) 11-14 August 2020, Debrecen, Hungary.

9. Pop O., Maslyuk V. Method of standard sets of the nuclides of U-Th series for nuclear dating of Carpathian rocks and soil // VII. Terrestrial radioisotopes in environment. International Conference on Environmental Protection. Program and materials. Veszprém. 12-14 August 2020. P. 55. DOI 10.18428/TREICEP-2020

10. O. Parlag, I. Pylyphynets, A. Lengyel, V. Maslyuk Use of delayed gamma rays for detection and identification of nuclear materials in steel containers by photofission / Book of abstracts V. Terrestrial radioisotopes in environment. International Conference on Environmental Protection. Veszprém 2020. P. 83. DOI 10.18428/TREICEP-2020

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Гомонай Ганна Миколаївна
д. ф.-м. н., 01.04.04, 01.04.04

Перелік осіб-виконавців

Пилипчинець Ігор Васильович

Поп Оксана Михайлівна
(к. ф.-м. н., 01.04.16)

Відповідальний за підготовку облікових документів

Роман Вікторія Іванівна

Телефон

+38 (050) 762-47-73

Реєстратор

Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності

