

Облікова картка ДіР



I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0225U001920

Державний реєстраційний номер: 0122U000939

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 11-02-2025

II. Етап виконання ДіР

Номер етапу: 1

Назва етапу: Елементарні процеси взаємодії повільних електронів та фотонів з багатоелектронними атомами, що мають відкриті p- і d-оболонки

Початок етапу: 01.2022

Закінчення етапу: 12.2024

Вид звітного документа: Остаточний звіт

III. Відомості про виконавця ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Державний вищий навчальний заклад "Ужгородський національний університет"

Код за ЄДРПОУ: 02070832

Місцезнаходження: вул. Підгірна, буд. 46, м. Ужгород, Ужгородський р-н., Закарпатська обл., 88000, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Міністерство освіти і науки України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380312613396, 380312613321

IV. Відомості про співвиконавців ДіР

V. Відомості про замовника ДіР

Повне найменування юридичної особи (або ПІБ фізичної особи): Міністерство освіти і науки України

Код за ЄДРПОУ: 38621185

Місцезнаходження: проспект Берестейський, буд. 10, м. Київ, 01135, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Кабінет Міністрів України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Розмір організації:

Телефон: 380444813221

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)

Напрямок фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

7713 - кошти держбюджету

Код програмної класифікації видатків і кредитування (КПКВК): 220 1040

Фактичний обсяг фінансування (тис. грн.): 2079.770

VII. Відомості про ДіР

Назва роботи українською:

Елементарні процеси взаємодії повільних електронів та фотонів з багатоелектронними атомами, що мають відкриті p- і d-оболонки

Назва роботи англійською:

Elementary processes of interaction of slow electrons and photons with multielectron atoms with open p- and d-shells

Реферат українською:

Розроблена в даній науково-дослідній роботі БСР-версія методу R-матриці є вельми універсальним та ефективним методом дослідження елементарних процесів взаємодії повільних електронів зі складними багатоелектронними атомами та іонами. У порівнянні зі стандартним R-матричним методом пропонується БСР-версія має три незаперечні переваги: 1) застосування залежних від терму неортогональних орбіталей є найекономішнім способом урахування резонансних ефектів без залучення будь-яких кореляційних функцій та без збільшення системи інтегро-диференціальних рівнянь сильного зв'язку; 2) квантово-механічні оператори після їх дискретизації у B-сплайновому базисі представляються сильно розрідженими стрічковими матрицями скінченного рангу, що суттєво спрощує розв'язання відповідних систем алгебраїчних та інтегро-диференціальних рівнянь; 3) локальні властивості та повнота скінченної системи базисних сплайнів забезпечують гарантовану збіжність R-матричного розкладу, що позбавляє нас від необхідності вводити поправки Баттла в діагональні елементи R-матриці. З використанням БСР-версії R-матричного методу проведено систематичні розрахунки енергетичних і кутових залежностей інтегральних та диференціальних перерізів пружного розсіяння, збудження та іонізації атомів кальцію і стронцію повільними електронами. Детально досліджена складна резонансна структура проінтегрованих за кутом повних перерізів пружного розсіяння та збудження атомів Ca і Sr електронним ударом. Визначено положення і ширини виявлених резонансів та проведено їх спектроскопічну класифікацію. Комбінованим методом БКХФ-БСР в LS-схемі зв'язку розраховано хвильові функції та енергетичний спектр 36 нижніх станів атома фосфору і 35 нижніх станів атома сірки. Шляхом діагоналізації гамільтоніана Брейта-Паулі в базисі розрахованих методом БКХФ багатоконфігураційних LS-хвильових функцій обчислено енергетичний спектр атома ванадію з урахуванням тонкого розщеплення рівнів.

Реферат англійською:

The BSR version of the R-matrix method developed in this research work is a very versatile and effective method for studying elementary processes of interaction of slow electrons with complex multi-electron atoms and ions. Compared to the standard R-matrix method, the proposed BSR version has three clear advantages: 1) the use of term-dependent non-orthogonal orbitals is the most efficient way to take into account resonance effects without involving any correlation functions and without increasing the system of integro-differential close coupling equations; 2) quantum mechanical operators, after their discretization in the B-spline basis, are represented by highly sparse band matrices of finite rank, and this significantly simplifies the solution of the corresponding systems of algebraic and integro-differential equations; 3) the local properties and completeness of the finite system of basis splines provide guaranteed convergence of the R-matrix expansion, which allows to avoid any Buttle corrections for the diagonal elements of the R-matrix. Using the BSR version of the R-matrix method, the systematic calculations of the energy and angular dependences of the integral and differential cross sections of elastic e+A-scattering, excitation, and ionization of calcium and strontium atoms by slow electrons were performed. The complex resonance structure of the angle-integrated total cross sections of elastic scattering and electron impact excitation of Ca and Sr atoms has been studied in detail. The positions and widths of the identified resonances have been determined and their spectroscopic classification has been performed. The combined

MCHF-BSR method was used to calculate the wave functions and energy spectrum of 36 lower states of the phosphorus atom and 35 lower states of the sulfur atom in scope of LS-coupling scheme. By diagonalizing the Breit-Pauli Hamiltonian in the basis of multi-configuration LS wave functions calculated by the MCHF method, the energy spect

Індекс УДК: 539.18/.19 , 539.183.3 + 539.184 + 539.186

Коди тематичних рубрик: 29.29

Керівники роботи

Власне Прізвище Ім'я По-батькові: Лазур Володимир Юрійович

Науковий ступінь: д. ф.-м. н.

Вчене звання: професор

Ідентифікатор ORCID ID:

Додаткова інформація:

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

Назва НТП українською: Систематичні розрахунки енергетичних і кутових залежностей інтегральних та диференціальних перерізів пружного розсіяння, збудження та іонізації атомів V, P, S, Ca, Sr повільними електронами.

Назва НТП англійською: Systematic calculations of the energy and angular dependences of the integral and differential cross sections of elastic scattering, excitation and ionization of V, P, S, Ca, Sr atoms by slow electrons have been carried out.

НТП, яку передбачалося створити:

Причини, через які НТП не було створено:

Отримані результати: Методичні документи

Галузь застосування: Фізика електрон-атомних зіткнень

Реєстраційний номер картки технології:

Опис НТП: Досліджені в даній НДР елементарні процеси взаємодії електронів з багатоелектронними атомами становлять значний інтерес як для розвитку фізики електрон-атомних зіткнень, так і для численних застосувань у суміжних галузях. Такі процеси мають високу ефективність і відіграють важливу роль при інжекції і діагностиці плазми в сучасних термоядерних пристроях, суттєвим чином проявляються у різних лабораторних системах та явищах природи, визначають властивості фотосфери та корони Сонця, різноманітних атмосферних явищ тощо. Характерні особливості, що притаманні атомам з відкритими p- і d-оболонками, дозволяють використовувати їх в таких застосуваннях, як квантові стандарти частоти, кількісний аналіз спектру зірок, квантові магнітометри, пристрої для запису та обробки квантової інформації.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Фізика електрон-атомних зіткнень

Вплив НТП на довкілля:

Впровадження НТП: Не впроваджено

Практична реалізація НТП

Початок етапу:

Закінчення етапу:

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 обґрунтування:

Потенціальний обсяг продажу, тис. грн.:

Очікуваний термін окупності (років):

Додаткова інформація:

IX. Бібліографічний опис

1. Gedeon V., Lazur V., Gedeon S., Yehiazarian O. Resonance Structure of Cross-Sections of Slow-Electron Scattering by Calcium Atom // Ukrainian Journal of Physics. – 2022. – V. 67. – No.3. – P. 161-182.
<https://doi.org/10.15407/ujpe67.3.161>
2. Gedeon V., Lazur V., Gedeon S., Yehiazarian O. Resonances in the electron scattering from a calcium atom // Journal of Physical Studies. – 2022. – V. 26. – No. 1. – P. 1301-1 – 1301-18. DOI: <https://doi.org/10.30970/jps.26.1301>
4. Kelemen V.I., Remeta E.Yu. Features in the electron elastic scattering cross sections of atoms Sb, Xe and Bi, Rn // Journal Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2024. – V. 57. – 245001. <https://doi.org/10.1088/1361-6455/ad9205>

X. Заключні відомості

Керівник юридичної особи

Миронюк Іван Святославович
д.мед.н., 01.04.07

Перелік осіб-виконавців

Алексій Віталій Вікторович
Боровик Олександр Олександрович
Гедеон Сергій Вікторович
Казаков Валентин Ігорович
Кочемба Аліса Анатоліївна
Лазур Володимир Юрійович
(д.ф.-м.н., 01.04.04)
Миня Олександр Йосипович
Рейтій Олександр Константинович
(к.ф.-м.н.)
Ремета Євген Юрійович
(д.ф.-м.н., 01.04.04)
Шуаїбов Олександр Камілович
(д.ф.-м.н., 01.04.04)

**Відповідальний за підготовку
облікових документів**

Фречка Н.І.

Телефон

+38 (050) 148-61-31

Реєстратор

**Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є
відповідальним за реєстрацію наукової
діяльності**

