Облікова картка дисертації

I. Загальні відомості

Державний обліковий номер: 0419U000746

Особливі позначки: відкрита

Дата реєстрації: 20-03-2019

Статус: Захищена

Реквізити наказу МОН / наказу закладу:

II. Відомості про здобувача

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Тимчик Роман Володимирович
2. Tymchyk Roman V.

Кваліфікація:

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Вид дисертації: кандидат наук

Аспірантура/Докторантура: так

Шифр наукової спеціальності: 01.04.02

Назва наукової спеціальності: Теоретична фізика

Галузь / галузі знань: Не застосовується

Освітньо-наукова програма зі спеціальності: Не застосовується

Дата захисту: 13-03-2019

Спеціальність за освітою: Фізика

Місце роботи здобувача: 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

III. Відомості про організацію, де відбувся захист

Шифр спеціалізованої вченої ради (разової спеціалізованої вченої ради): Д 35.156.01

Повне найменування юридичної особи: Інститут фізики конденсованих систем НАН України

Код за ЄДРПОУ: 05540014

Місцезнаходження: вул. Свєнціцького, 1, м. Львів, Львівська обл., 79011, Україна

Форма власності:

Сфера управління: Національна академія наук України

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

IV. Відомості про підприємство, установу, організацію, в якій було виконано дисертацію

Повне найменування юридичної 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

V. Відомості про дисертацію

Мова дисертації:

Коди тематичних рубрик: 29.29

Тема дисертації:

1. Розрахунки нижніх автоіонізаційних станів атомів берилію, магнію, кальцію

2. Calculations of the lowest autoionizing states of the beryllium, magnesium and calcium atoms

Реферат/анотація:

1. Дисертаційна робота присвячена розвитку методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел для отримання енергетичних положень та ширин автоіонізаційних станів, що виникають у процесі іонізації атомів Be, Mg, Ca електронним ударом та внаслідок фотоіонізації вказаних атомів. Мета виконуваних досліджень досягається цілеспрямованим поетапним ускладненням розрахунків енергетичних положень і ширин автоіонізаційних станів, що виникають у процесах іонізації атомних систем, від іонів до багатоелектронних атомів. Фундаментальний аспект актуальності полягає у розширенні меж застосування методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел на багатоелектронні атомні системи. Метод дозволяє розраховувати не лише положення, але і ширини автоіонізаційних станів, досліджувати не лише процес розсіювання, але і процес іонізації атомних систем електронами та фотонами. У дисертації метод застосовується саме для досліджень процесу іонізації атомів та іонів електронами, що, на відміну від вивчення процесу розсіювання електронів на атомах, є певною проблемою сучасної теорії. Прикладний

аспект актуальності полягає у ролі автоіонізаційних станів як джерела інформації про структуру спектрів атомів та іонів, про ефективні перерізи процесів та імовірності переходів, які відіграють важливу роль у всіх процесах електрон-атомних, електрон-іонних зіткнень, оскільки у більшості випадків перерізи резонансної іонізації, завдяки наявності квазістаціонарних станів, можуть у кілька разів перевищувати перерізи прямої іонізації, що є важливим аспектом у діагностиці низькотемпературної плазми. Збудження та розпад автоіонізаційних станів є яскравим проявом кореляційних ефектів у електронних оболонках атомів і, як наслідок, – одним із найбільш пріоритетних напрямів у сучасній фізиці електрон-атомних зіткнень. Наукові результати, які виносяться на захист. Успішно розвинуто обчислювальні можливості методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел і вперше застосовано цей метод для отримання повних та парціальних характеристик автоіонізаційних станів Be, Mg, Ca. Таким чином, розширено можливості застосування цього методу на опис багатоелектронних атомних систем. Обгрунтовано вибір хвильової функції основного стану атома для адекватного опису процесів іонізації багатоелектронних атомів. Виконано порівняння та аналіз характеристик квазістаціонарних станів, знайдених на основі різних багатопараметричних хвильових функцій основного стану атома. Завдяки адекватному вибору хвильової функції основного стану суттєво покращено точність розрахунків. Вперше спостережено ефект особливої зміни парціальних ширин у порівнянні із повними ширинами при застосуванні різних хвильових функцій основного стану. Енергетичні положення та ширини автоіонізаційних станів іонів H-, Li+, Be++ та атомів Be, Mg, Ca розраховано в межах точного квантово-механічного методу, яким є метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел, що добре відомий завдяки прецизійному опису квазістаціонарних станів атома гелію. Метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел успішно застосовано до більш складної, ніж задача розсіювання електрона на іоні, проблеми, а саме до задачі розрахунку процесу іонізації багатоелектронних атомів. Уточнено положення та ширини нижніх автоіонізаційних станів атомів Be, Mg, Ca. Наочно продемонстровано переваги методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел у порівнянні з іншими методами розрахунків багаточастинкових задач атомної фізики. Показано, що переваги полягають в автоматичному отриманні не лише енергетичних положень, але і ширин квазістаціонарних станів, а також у застосовності до опису процесів іонізації багатоелектронних систем.

2. Thesis is devoted to the development of the method of interacting configurations in the complex numbers representation. The investigation of the energetic positions and widths of autoionizing states, which are formed in the process of ionization of Be, Mg and Ca atoms by electron-impact and as a result of photoionization, is under consideration. The purpose of the research is achieved in step by step complication of calculations of the energetic positions and widths of autoionizing states, which are formed in the process of ionization of atomic systems, from the ions to the multielectron atoms. Fundamental aspect of actuality consists in the extension of the method application for multielectron atomic systems. The method of interacting configurations in the complex numbers representation gives the possibility to calculate both the energetic positions and widths of autoionizing states. Moreover, not only the scattering process but the process of atomic systems ionization by electrons and photons as well can be investigated in this method. We investigate the process of atomic systems ionization by electrons and photons, which, contrary to the scattering process investigation, is some problem of modern theory. The applied aspect of actuality is ensured by the role of autoionizing states as a source of information on the structure of spectra of atoms and ions, on the effective cross sections of processes and transition probabilities. Indeed, the autoionizing states play the important role in all processes of electron-atomic and electron-ionic collisions due to the fact that usually the resonance ionization cross sections can dominate several times over the direct ionization cross sections. The reason is in quasistationary states existence. This is an important aspect of the low-temperature plasma diagnostics. Moreover, the excitation and decay of autoionizing states is a clear manifestation of correlation effects in the electron shells of atoms. Therefore, these processes are among the main problems in modern physics of electron-atomic collisions. The main scientic results for defence are as follows. The calculating possibilities of the method of interacting configurations in the complex numbers representation have been developed successfully. The method has been applied for the first time to the calculations of the total and partial characteristics of the Be, Mg, Ca atoms autoionizing states. Hence, the possibilities of the method application have

been extended for the description of the multielectron atomic systems. The choice of the atom ground state wave function for adequate description of the multielectron atoms ionization processes has been justified. The comparison and analysis of the quasistationary states characteristics calculated on the basis of different multipapametric wave functions of the atom ground state have been performed. Due to the adequate choice of the ground state wave function, the accuracy of calculations is essentially improved. The effect of essential changes of partial widths in comparison with the total widths, when the different ground state wave functions were applied, has been observed for the first time. The energetic positions and widths of the ions H-, Li+, Be++ and atoms Be, Mg, Ca autoionizing states are calculated in the framework of the exact quantum-mechanical method of interacting configurations in complex numbers representation. The method is well known due to the precise description of the helium atom quasistationary states. The method of interacting configurations in complex numbers representation has been applied successfully for more complicated problem as the scattering of electrons by ion. The process of multielectron atoms ionization has been calculated. The energies and widths of the lowest autoionizing states of the Be, Mg, Ca atoms have been clarified. The advantages of the method of interacting configurations in complex numbers representation, in comparison with other methods of calculations of multielectron atomic systems, have been demonstrated. It is shown that advantages are in automatic receiving both the energies and widths of the quasistationary states, as well as in the possibility to describe the ionization processes of multielectron systems.

Державний реєстраційний номер ДіР:

Пріоритетний напрям розвитку науки і техніки:

Стратегічний пріоритетний напрям інноваційної діяльності:

Підсумки дослідження:

Публікації:

Наукова (науково-технічна) продукція:

Соціально-економічна спрямованість:

Охоронні документи на ОПІВ:

Впровадження результатів дисертації:

Зв'язок з науковими темами:

VI. Відомості про наукового керівника/керівників (консультанта)

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Симулик Володимир Михайлович
2. Simulik Volodimir M.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

VII. Відомості про офіційних опонентів та рецензентів

Офіційні опоненти

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Ваврух Маркіян Васильович

2. Vavrukh Markiyan V.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Денисов Віталій Юрійович

2. Denisov Vitaly Yu.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.16

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Власне Прізвище Ім'я По-батькові:

1. Держко Олег Володимирович

2. Derzhko Oleg V.

Кваліфікація: д. ф.-м. н., 01.04.02

Ідентифікатор ORCID ID: Не застосовується

Додаткова інформація:

Повне найменування юридичної особи:

Код за ЄДРПОУ:

Місцезнаходження:

Форма власності:

Сфера управління:

Ідентифікатор ROR: Не застосовується

Рецензенти

VIII. Заключні відомості

Власне Прізвище Ім'я По-батькові голови ради	Мриглод Ігор Миронович
Власне Прізвище Ім'я По-батькові головуючого на засіданні	Мриглод Ігор Миронович
Відповідальний за підготовку облікових документів	
Реєстратор	
Керівник відділу УкрІНТЕІ, що є відповідальним за реєстрацію наукової діяльності	Юрченко Т.А.