

ВІДГУК

офіційного опонента на дисертаційну роботу **Тимчика Романа Володимировича** “**Розрахунки нижніх автоіонізаційних станів атомів берилію, магнію, кальцію**”, подану на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 — теоретична фізика

1. Актуальність.

Дослідження енергетичної структури багатоелектронних атомів та іонів є однією з актуальних проблем сучасної атомної фізики, якій присвячено велике число теоретичних та експериментальних робіт. Автоіонізаційні стани є важливим джерелом інформації про структуру спектрів атомів та іонів, ефективні перерізи процесів іонізації та імовірності переходів при електрон-атомних зіткненнях. Сучасний стан досліджень у цій області характеризується переходом від вивчення двоелектронних систем ізогелієвого ряду до багатоелектронних атомів та іонів.

Всебічне вивчення автоіонізаційних станів має не тільки фундаментальне значення для фізики атома, але й важливі практичні застосування у прикладних задачах електроніки, низькотемпературної плазми, астрофізики, фізики ядерних реакцій, тощо.

Вивчення автоіонізаційних явищ є цікавою і актуальною задачею теоретичної фізики. Сформульовані у дисертаційній роботі Р.В.Тимчика мета і основні задачі дійсно є актуальними. Дисертаційна робота, присвячена розвитку методів теоретичного опису енергетичної структури багатоелектронних атомів і розрахунку автоіонізаційних станів конкретних атомних об'єктів, належить до актуального напрямку теоретичної фізики.

2. Структура дисертаційної роботи.

Дисертаційна робота Р.В.Тимчика має традиційну структуру — вона складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, переліку використаних джерел та додатків. У вступі обґрунтовано актуальність роботи, сформульовано її мету і основні задачі, описано об'єкти і предмет дослідження, наукову новизну результатів та їх практичну цінність.

Перший розділ роботи — оглядовий. Тут описано історію теоретичних і експериментальних досліджень автоіонізаційних станів, а також детально проаналізовано всі існуючі методи теоретичних досліджень процесів іонізації атомних систем.

Другий розділ присвячено обґрунтуванню вибору хвильової функції основного стану іонів ізогелієвого ряду (H^- , He , Li^+ , Be^{++}) та хвильової функції основного стану атомів Be , Mg , Ca .

У третьому розділі описано так званий метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел для задачі іонізації гелієподібних іонів та атомів електронним ударом: наведено основні положення методу, розрахункові схеми його реалізації та основні наближення. На основі цього методу у четвертому розділі виконано розрахунки енергетичних характеристик нижніх автоіонізаційних станів іонів H^- , Li^+ , Be^{++} та атомів Be , Mg , Ca . Одержані значення енергетичних рівнів та їхніх ширин наведено у таблицях. Порівняння з результатами, одержаними іншими авторами за допомогою інших методів, а також з результатами експериментальних досліджень, свідчить про ефективність використаного методу та його переваги перед іншими підходами.

3. Ступінь обґрунтованості наукових положень, висновків і рекомендацій.

Одержані в дисертації результати та положення, які винесено до захисту, є обґрунтованими з таких причин.

1. Для розв'язання поставлених задач використовується апарат квантової механіки, розроблений для опису об'єктів з декількома чи багатьма електронами.
2. У практичних розрахунках використано потужні комп'ютерні методи досліджень.
3. Одержані результати порівнюються із результатами інших авторів та результатами експериментів.
4. Розраховані автором характеристики автоіонізаційних станів, одержані при описі процесів іонізації електронним ударом, зіставляються із характеристиками, одержаними іншими авторами при описі процесів розсіяння електронів на атомних об'єктах.
5. Одержані результати не суперечать відомим уявленням про розглянуті фізичні процеси, а уточнюють та поглиблюють їх.

Результати дисертаційної роботи опубліковані у провідних фахових виданнях і доповідались на авторитетних наукових конференціях.

4. Достовірність і новизна, повнота їх викладу в опублікованих працях.

Розвинуто та вперше застосовано метод взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел для опису процесу іонізації багатоелектронних систем електронним ударом на прикладі атомів Be , Mg і Ca .

Метод взаємодіючих конфігурацій застосовано для розрахунку енергетичних рівнів та їх ширин для ізогелієвого ряду іонів H^- , Li^+ , Be^{++} .

Одержані результати уточнюють характеристики автоіонізаційних станів двоелектронних іонів та атомів Be , Mg , Ca , одержані іншими методами.

Встановлено ефективність і переваги методу взаємодіючих конфігурацій у зображенні комплексних чисел перед іншими підходами.

Одержані дисертантом результати добре аргументовані, їх достовірність не викликає сумніву, про що свідчить їх зіставлення з результатами інших авторів.

Основні результати дослідження викладено у 7-ми статтях у провідних реферованих журналах, двох електронних препринтах та 11-ти тезах наукових конференцій. Статті опубліковано у таких журналах: “Укр. фізичний журнал”, “Науковий вісник Ужгородського університету. Серія фізика”, “Int. J. Theor. Math. Phys.”, “Univ. J. Phys. Appl. ”, “Журнал тех. физ.”.

Результати дисертаційної роботи повністю відображені у вказаних публікаціях.

Основні положення дисертації доповідались і обговорювались на конференціях і наукових семінарах, де отримали підтримку.

5. Значущість для науки і практики.

Наукова значущість дисертації полягає перш за все у розвитку методу взаємодіючих конфігурацій, що складає методичний аспект роботи.

Практична значущість отриманих результатів полягає у тому, що вони можуть бути використані для інтерпретації результатів експериментальних досліджень.

6. Можливі конкретні шляхи використання результатів досліджень.

Отримані у дисертаційній роботі результати можуть використовуватись для розрахунків енергетичних параметрів автоіонізаційних станів інших, зокрема складніших атомних об'єктів. Вони можуть використовуватись у навчальному процесі Львівського національного університету імені Івана Франка, Київського національного університету імені Тараса Шевченка, Харківського національного університету імені В.Н.Каразіна, Одеського національного університету імені І.І.Мечнікова, Ужгородського національного університету та інших навчальних закладів України.

7. Мова і оформлення дисертації.

Робота написана зрозумілою науковою мовою і оформлена, в основному, відповідно до вимог. Автореферат повністю відповідає дисертації, її основні положення ідентичні змісту автореферату.

8. Недоліки, зауваження та запитання.

1. Перший (оглядовий) розділ дисертації є занадто великий, там детально описуються 14 різних методів досліджень, хоча в наступних розділах є посилання лише на деякі з них. Розділ третій також має дуже багато оглядового матеріалу, який слід було помістити у першому розділі, щоб чітко розділити оригінальні результати дисертанта і вже відомі речі, що належать іншим дослідникам.

2. Критерієм вибору хвильової функції основного стану іонів ізогелієвого ряду повинно бути значення енергії цих об'єктів в основному стані, а не розраховані на цій основі

характеристики резонансів. Вибираючи різні варіаційні функції основного стану, слід було подати значення їхніх варіаційних параметрів.

3. Навіщо порівнювати результати розрахунків (див. таблицю 5), виконаних на основі функцій, що мають 6 чи 8 варіаційних параметрів, із результатами, одержаними на основі функції Твіда, яка має 41 варіаційний параметр? Адже результат очевидний і без розрахунків: чим більше параметрів, тим кращий результат. Чому не згадано варіаційні функції Гарта-Герцберга (20 параметрів) чи Шварца (70 параметрів), побудовані за схемою Гіллерааса?

4. Є загальний недолік в оформленні всіх таблиць дисертаційної роботи: відсутність детального опису таблиць у тексті та відсутність підписів до таблиць, де було би вказано, чому відповідають ті чи інші числа. Наприклад: таблиця 1, де наведено ширини 1S -резонансів. У таблиці є позначення $1s\epsilon s$, $2s\epsilon s$, $2p\epsilon r$, але невідомо, що таке ϵ . У таблиці 5 вже інші позначення: $1s\epsilon s$, $2s\epsilon s$, $2p\epsilon r$, $2p\epsilon d$ і знову невідомо, що позначає буква ϵ . Недбалість проявляється не тільки при оформленні таблиць. Наприклад, на стор. 81 написано, що енергія основного стану атома гелію дорівнює 2.903557 а.е. (замість - 2.903557 а.о.).

5. У розділі 4 не наведено жодних вихідних даних, що стосуються відповідних об'єктів, зокрема хвильових функцій у наближенні Гартрі-Фока.

6. Чому не обчислено енергетичну структуру хоча б одного з атомів, для яких немає даних в літературі?

7. Для кращого представлення результатів варто було б навести енергетичні діаграми іонів та атомів і показати на них місце автоіонізаційних станів.

8. У тексті дисертації та в авторефераті є багато стилістичних і граматичних огріхів, зокрема русизмів (напр. «двохелектронні», «трьохелектронні», «по станам», «по хвильовим функціям», «по електронам»), є плутанина із закінченням іменників у родовому відмінку та ін.

9. Загальний підсумок.

Перераховані недоліки не мають вирішального значення для загальної оцінки дисертаційної роботи Р.В.Тимчика і не впливають на загальний науковий рівень дисертації. Методична цінність дисертації полягає у розвитку методу взаємодіючих конфігурацій для опису процесів іонізації атомних об'єктів – іонів та атомів – електронним ударом. Практична цінність роботи визначається перш за все тим, що в роботі одержано достовірні значення параметрів автоіонізаційних станів багатоелектронних атомів, що поглиблює наші уявлення про їхню енергетичну структуру.

Результати, що входять до дисертаційної роботи, опубліковані у провідних фахових журналах і пройшли апробацію на міжнародних наукових конференціях.

Результати дисертаційної роботи можуть бути використаними в наукових інститутах та національних університетах України.

Задачі, які розв'язуються у дисертаційній роботі Р.В.Тимчика, є дуже складними і громіздкими. Тому не викликає сумніву, що автором виконано дуже великий обсяг роботи. Результати роботи є цікавими і важливими. Р.В.Тимчик є кваліфікованим фахівцем в галузі теоретичної фізики. Під час роботи над дисертацією він оволодів широким колом знань, теоретичними методами і практичними методиками, тісно пов'язаними з фізикою атомних систем.

Сукупність проведених досліджень і отриманих у дисертаційній роботі результатів є важливим внеском у вивчення енергетичної структури атомів та іонів.

Дисертаційна робота Р.В.Тимчика є закінченою науковою роботою з актуальної області теоретичної фізики. Одержані результати свідчать про те, що робота є цілісним і завершеним науковим дослідженням, яке за актуальністю, новизною, науковим та практичним значенням, а також за достовірністю результатів відповідає всім вимогам до кандидатських дисертацій, а її автор Тимчик Роман Володимирович заслуговує присудження наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 - теоретична фізика.

Доктор фізико-математичних наук,
професор кафедри астрофізики
Львівського національного університету
імені Івана Франка

Підпис професора Вавруха М.В. з а с в і д ч у ю:

Вчений секретар
Львівського національного університету
імені Івана Франка, доцент


Вавруха М.В.


Бабовецька О.С.

27 лютого 2019 р.