

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ЕЛЕКТРОННОЇ ФІЗИКИ**

**Цикл наукових праць на здобуття
премії Президента України для молодих вчених**

**“СПЕКТРОСКОПІЯ ЗБУДЖЕНИХ СТАНІВ АТОМІВ ТА ІОНІВ У
ПЛАЗМІ НА ПАРІ МЕТАЛІВ: МЕХАНІЗМИ ЕЛЕМЕНТАРНИХ
ПРОЦЕСІВ”**

10 - Природничі науки

РОМАН Вікторія Іванівна кандидат фіз.-мат. наук,
старший дослідник,
завідувач відділу електронних
процесів і елементарних взаємодій
Інституту електронної фізики НАН
України
11.06.1988 р.н.

Реферат роботи

Ключові слова: атом, іон, електрон, автоіонізаційний стан, кореляція, збудження, іонізація, автоіонізація.

Об'єкти дослідження – процеси елементарних взаємодій електронів контрольованої енергії з атомами Rb, K, Ba та іонами Tl^+ , Pb^+ у газовій фазі.

Мета роботи – дослідження процесів взаємодії повільних електронів з атомами й іонами важких металів, встановлення їх основних характеристик, визначення основних механізмів взаємодії вказаних частинок та впливу на ці механізми процесів вищих порядків.

Методи дослідження та експериментальна апаратура – експериментальні методики електронної та оптичної спектроскопії у поєднанні з методом пучків атомів (іонів), що перетинаються під прямим кутом з пучком електронів контрольованої енергії. Теоретичні розрахунки спектроскопічних параметрів складних атомних систем проводилися з використанням сучасних квантово-механічних релятивістських методів Кулон-Борна, спотворених хвиль та дипольних бінарних зіткнень у рамках програминого пакету FAC (Flexible Atomic Code).

Актуальність та важливість проведених досліджень полягає в тому, що у ньому отримано цілий ряд науково обґрунтованих результатів, які є важливими для розуміння механізмів елементарних процесів при взаємодії електронів з багатоелектронними атомними системами, а також резонансних і автоіонізаційних явищ, що супроводжують ці процеси. Елементарні процеси, що мають місце при парних зіткненнях атомів, іонів металів та електронів, пов'язані, зокрема, з переходами з автоіонізаційних станів, мають як фундаментальний, так і практичний інтерес. Явище автоіонізації є фундаментальним природним явищем, і, відповідно, розширює розуміння фізичного світу. З іншого боку, елементарні процеси визначають властивості газових та плазмових середовищ. Наприклад, у газових лазерах, в атмосфері Землі, у фотосфері зірок, у низькотемпературній плазмі тощо. У зв'язку з цим, існує постійна потреба у розробці та використанні надійних і найбільш точних методів визначення параметрів різних процесів, що відбуваються при електрон-атомних (іонних) зіткненнях, а також у проведенні систематичних і максимально точних розрахунків таких фундаментальних характеристик процесів і атомних констант, як енергії та канали утворення і розпаду автоіонізаційних станів, ефективні перерізи збудження та іонізації.

Отримані дані будуть використані при створенні різних баз даних з атомних констант, зокрема бази даних NIST. Результати досліджень також будуть використані при розробці і модифікації різних теоретичних моделей, підходів і наближень, які застосовують при розрахунках складних багатоелектронних атомних систем.

Соціальна та економічна значимість проведеного циклу досліджень визначається рядом переваг. Зокрема, розробка ефективних методів опису структури, одночастинкових та колективних збуджень, багатоканальних розпадів атомних систем відкриває нові можливості для побудови математичних моделей та проведення модельних експериментів, які дають

зможу виконати з високою точністю розрахунки фундаментальних характеристик структури енергетичних автоіонізаційних рівнів атомів та іонів, а також переходів між ними. Такі характеристики широко використовуються при дослідженні фізичних процесів, які мають місце у лабораторній та астрофізичній плазмі, а також у фізиці та хімії атмосфери. Інформацію про такі властивості отримують, здебільшого, експериментальними методами, які описані в роботі також, але вони потребують досить значних фінансових затрат. Тому розробка й удосконалення адекватних теоретичних методів і математичних моделей та підвищення їх точності є доцільними як з економічної, так і соціальної точок зору, і значно скоротить шлях до впровадження фізичних результатів у практику.

Основні результати, які представлені в публікаціях та у Томі 2.

В циклі робіт представлено експериментальні та теоретичні дані перерізів збудження дублетних $(4p^55s^2)^2P_{3/2,1/2}$ та кватретних $4p^5(4d5s)$ автоіонізаційних станів атома Rb в широкому діапазоні енергій зіткнень від порогів збудження до 700 еВ. Наближення релятивістських спотворених хвиль дало змогу описати ці процеси у широкому діапазоні, але тільки при високих енергіях зіткнень і разом з цим дає змогу експериментальні дані привести до абсолютних значень перерізів. Досліджений в роботі параметр відношення інтенсивності R_0 дав змогу оцінити достовірність отриманих даних. З одного боку – це вдало підібраний модельний потенціал та правильно враховано конфігураційне змішування в теоретичних розрахунках методом релятивістських спотворених хвиль. З іншого боку – це достовірність експериментальних даних, проведених методом електронної спектроскопії з використанням електронного та атомного пучків, що перетинаються.

В роботі представлено дослідження електронного каналу розпаду квазіметастабільного $(4p^55s5p)^4S_{3/2}$ стану атома рубідію в діапазоні енергій зіткнень від порогу збудження до 100 еВ. Аналіз поведінки перерізу збудження дослідженого стану та порівняння його з теоретичними й експериментальними даними перерізів збудження інших кватретних автоіонізаційних станів вказують на складну парціальну структуру припорогового резонансного збудження за рахунок короткоіснуючих станів негативного іона Rb⁻.

Встановлено, що експериментальні перерізи збудження автоіонізаційних станів $5p^55d6s^2$ барію мають максимальні значення при низьких енергіях зіткнень, виявляючи тим самим їх спін-обмінний характер збудження. Наявність структури біляпорогових максимумів вказує на ефективне утворення резонансів негативних іонів барію. При великих енергіях зіткнень, форма і абсолютне значення перерізів визначаються ефектами змішування як різних конфігурацій, так і станів в рамках однієї конфігурації. Розраховані перерізи збудження задовільно описують експеримент при енергіях зіткнень вище 40 еВ. Енергетичні залежності

перерізів збудження-автоіонізації атомів барію відображають динаміку збудження автоіонізаційних станів, що відіграють основну роль в їх формуванні.

Представлені результати експериментальних та теоретичних досліджень електронного збудження резонансних переходів $6s^2 6d \ ^2D_{3/2} \rightarrow 6s^2 6p^2 P_{1/2}$ ($\lambda 143.4$ нм) та $6s^2 6d \ ^2D_{5/2} \rightarrow 6s^2 6p^2 P_{3/2}$ ($\lambda 182.2$ нм) іона Pb^+ . Відносні перерізи збудження були виміряні методом ВУФ-спектроскопії, використовуючи техніку схрещених моноенергетичних електронних та іонних пучків в діапазоні енергій зіткнень від порогів збудження до 100 еВ. Спостережено чітку структуру в енергетичних залежностях ефективних перерізів збудження, що є результатом заселеності $6s^2 6d \ ^2D_{3/2}$ та $6s^2 6d \ ^2D_{5/2}$ резонансних рівнів, внаслідок електронного розпаду атомних $5d^{10} 6s 6p^2 np$ ($n \geq 7$) та автоіонізаційних $5d^9 6s^2 6p^3$ станів, а також радіаційних переходів з вищих $5d^{10} 6s^2 np, mf$ ($n \geq 7, m \geq 5$) рівнів іона Pb^+ нижче потенціалу іонізації і електронного розпаду атомних $5d^9 6s^2 6p^2 np, mf$ ($n \geq 6, m \geq 5$) та іонних $5d^9 6s^2 6p \ np, mf$ ($n \geq 7, m \geq 5$), $5d^{10} 6p^2 nd, mp$ ($n \geq 6, m \geq 7$) автоіонізаційних станів вище потенціалу іонізації. Дослідження виконані спільно з Інститутом теоретичної фізики і астрономії Вільнюського університету (Литва). Теоретичні перерізи були отримані з використанням наближення релятивістських спотворених хвиль з включенням кореляційних поправок. Експериментальні дані були нормовані на теоретичні та проаналізовані з точки зору кореляційних ефектів. Встановлено, що абсолютні значення перерізів для досліджуваних ліній при 100 еВ становлять $(0,35 \pm 0,17) \times 10^{-16}$ см² ($\lambda 143,4$ нм) та $(0,19 \pm 0,09) \times 10^{-16}$ см² ($\lambda 182,2$ нм).

У циклі праць представлено комплексні експериментально-теоретичні результати досліджень електронного збудження резонансного переходу $6s 6p \ ^1P^o_1 \rightarrow 6s^2 \ ^1S_0$ (132.2 нм), каскадних $6s 7s \ ^1S_0 \rightarrow 6s 6p \ ^1P^o_1$ (309.2 нм), $6p^2 \ ^1D_2 \rightarrow 6s 6p \ ^1P^o_1$ (150.8 нм) та інтеркомбінаційних $6s 6p \ ^3P^o_1 \rightarrow 6s^2 \ ^1S_0$ (190.8 нм), $6s 7s \ ^1S_0 \rightarrow 6s 6p \ ^3P^o_1$ (179.9 нм) переходів іона Tl^+ . Встановлено, що структура, яка спостерігається на перерізах у діапазоні енергій нижче потенціалу іонізації Tl^+ (20.4 еВ) є результатом заселеності рівня внаслідок радіаційних переходів із вищих рівнів $6s 7s \ ^1S_0$, $6s 6d \ ^1D_2$ і $6p^2 \ ^1D_2, \ ^1S_0$ іона Tl^+ , а також внеску автоіонізаційних станів атома Tl , утворених внаслідок резонансного захоплення іоном електрона, що налітає, та їх подальшим електронним розпадом. Вище потенціалу іонізації за спостережувану структуру відповідають два основні процеси - це збудження одного з електронів оболонки $5d^{10}$ та одночасне збудження двох електронів оболонок $5d^{10}$ і $6s^2$, що призводить до утворення іонних автоіонізаційних станів. Дослідження виконані спільно з колегами з Індійського технологічного інституту Руркі (Індія). Теоретичні перерізи були отримані з використанням наближення релятивістських спотворених хвиль з включенням кореляційних поправок. Експериментальні дані були нормовані на теоретичні з отриманням

абсолютних значень перерізів для досліджуваних ліній, приведених в таблиці.

Проведений в результаті досліджень аналіз показав, що для моделювання процесів збудження при зіткненнях моноенергетичних електронів не тільки з атомами, а й з іонами сучасний програмний пакет Flexible Atomic Code є виключно вдалим інструментом. Для важких лужних чи лужноземельних атомів, таких, наприклад, як атом рубідію чи барію, та важких іонів талію і свинцю суттєвими є кореляційні й релятивістські ефекти, зокрема конфігураційне зміщення рівнів. І тому дане дослідження показує наскільки важливим є включення релятивістських та кореляційних поправок при розрахунках енергій та перерізів збудження автоіонізаційних станів.

Прояв кореляційних ефектів цілком можливий не тільки у плазмових та газових середовищах, а й у молекулах, кластерах, кристалічних структурах та інших багатоатомних утвореннях. Тому отримані результати дозволять з нових позицій розглядати різні фізичні явища у фізиці плазми та суміжних галузях (у тому числі для оптичних стандартів частоти та лазерів вакуумного ультрафіолетового діапазону). Досліджені в роботі процеси є важливими як у фізиці плазми, так і в астрофізиці для визначення хімічного складу астрофізичних об'єктів. Одержані абсолютні перерізи збудження є необхідними для розробки моделей атмосфер і внутрішньої частини зірок, а також для перевірки теорій нуклеосинтезу.

За рівнем науково-технічного дослідження дана робота немає аналогів в Україні, а також може слугувати для покращення рівня теоретичних досліджень у світі.

У 2019 році за подібний цикл робіт «Збудження та іонізація субвалентних оболонок атомів лужних металів» було отримано премію Верховної Ради України молодим вченим, за результатами досліджень 2010-2018 рр. Матеріали тих досліджень не увійшли до представленого циклу робіт на премію Президента України 2024 року, про що свідчить дати публікування статей та тез доповідей (2019-2023 рр.).

Претендент на присудження Премії,
кандидат фіз.-мат. наук



Вікторія РОМАН

Учений секретар ІЕФ НАН України,
кандидат хім. наук



Людмила РОМАНОВА

Перелік наукових публікацій, висунутих на присудження Премії

№з/п	Назва	Вихідні дані/ реквізити публікації	Співавтори
II. Статті в журналах, включених до категорії "А" Переліку наукових фахових видань України та у закордонних виданнях, проіндексованих у базах даних Web of Science Core Collection та/або Scopus			
1.	Electron-impact excitation of the $\lambda 190.8$ nm and $\lambda 179.9$ nm intercombination lines in the Tl ⁺ ion	<i>Atoms</i> — 2022, — V. 10, N. 4. — P.136 (12pp). https://doi.org/10.3390/atoms10040136 (Scopus, Q2)	Gomonai A.N., Gomonai A.I., Sahoo A.K., Sharma L.
2.	Electron impact excitation of the Tl ⁺ ion: resonance and cascade transitions	<i>J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.</i> - 2022. — V. 55, — N. 16. — P. 165203-165208 https://doi.org/10.1088/1361-6455/ac7924 (Scopus, Q2)	Gomonai A.I., Sharma L., Sahoo A.K., Gomonai A.N.
3.	Excitation of the $6d^2D \rightarrow 6p^2P^o$ Radiative Transitions in the Pb ⁺ Ion by Electron Impact.	<i>Atoms</i> — 2021, — V. 9, — N. 4. — P. 102-110. https://doi.org/10.3390/atoms9040102 (Scopus, Q2)	Jonauskas V., Kučas S., Gomonai A., Gomonai A.
4.	Theoretical Calculations of Electron Excitation of the Lowest Autoionization States of the Rb Atom.	<i>Scientific Herald of Uzhhorod University. Series "Physics"</i> – 2020. – V. 48, P.58-66. https://doi.org/10.54919/2415-8038.2020.48.58-66 (Scopus, Q2)	Pop O.M., Pylypchynets I.V.
5.	Electron-impact excitation of the $(4p^55s5p)^4S_{3/2}$ quasimetastable state in Rb	<i>Journal of Physics: Conference Series.</i> – 2020. – V. 1412. – P. 132012. DOI: 10.1088/1742-6596/1412/13/132012_ (Scopus, Q3)	Demesh Sh.
6.	Excitation-autoionization of the $5p^6$ subshell in Ba atoms	<i>The European Physical Journal D.</i> – 2019. – V. 73. – P. 43 (5 pp.). (DOI: 10.1140/epjd/e2019-90430-8) (Scopus, Q3)	Borovik V., Kupliauskiene A., Shafranyosh I.
V. Тези доповідей (одноосібні)			
1.	Ionization of outer shells in the K atom by electron impact	<i>33rd International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC): Book of Abstracts ICPEAC 2023, July 25 - August 1, 2023, Ottawa, Canada, P.70.</i> https://icpeac2023.ca/resources/ICPEAC2023_Book_of_Abstracts.pdf	

2.	Повний переріз однократної іонізації атома калію електронним ударом.	<i>ІЕФ-2023</i> . Тези доп. Міжнародної конференції молодих вчених та аспірантів (м. Ужгород, 15-18 травня 2023). Ужгород, 2023. С. 61-62. http://www.iep.org.ua/content/conferenc/iep_2023/files/Book_of_abstracts_iep2023.pdf
3.	Theoretical Cross-Sections of the Ionization of the K atom by Electron Impact	<i>International Avanced Study Conference on Condenced Matter and Low Temperature Physics: Book of Abstracts "CM&LTP"</i> , Kharkiv, Ukraine, June 6-12, 2021, P.221. https://ilt.kharkov.ua/cmltp2021/doc/ProgramCM&LTP2021.pdf
4.	Розрахунки перерізів збудження $3p^6$ та $3s^2$ оболонки атома калію.	<i>ІЕФ-2021</i> . Тези доп. Міжнародної конференції молодих вчених та аспірантів (м. Ужгород, 26-28 травня 2021). Ужгород, 2021. С. 173. http://www.iep.org.ua/content/conferenc/iep_2021/files/IEP-2021%20Book%20of%20abstracts.pdf
5.	Theoretical research electron excitation of the autoionizing states in Rb atoms	Programme and abstract « <i>International Conference of Young Scientists and Post-graduate Students IEP-2019</i> ». – Uzhgorod. – 2019. – P. 120. http://www.iep.org.ua/content/conferenc/iep_2019/files/prog_IEP-2019.pdf

Кількість вітчизняних наукових проєктів та грантів, за якими працював претендент	як науковий керівник	як виконавець
	4	3
Кількість закордонних наукових проєктів та грантів, за якими працював претендент	як науковий керівник	як виконавець
		1

Претендент на присудження Премії
кандидат фіз.-мат. наук

Вікторія РОМАН

Учений секретар ІЕФ НАН України,
кандидат хім. наук

Людмила РОМАНОВА

