Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0220U101782

Державний реєстраційний номер: 0119U102495

Відкрита

Дата реєстрації: 24-02-2020

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Проведення тестових та контрольних теоретичних розрахунків перерізів збудження, іонізації атомів та іонів металів електронним ударом в релятивістських наближеннях спотворених хвиль та Борна. Вибір алгоритмів розрахунків, порівняльна оцінка ролі числа врахованих конфігурацій, аналіз мультиплетного розщеплення рівнів.

Початок етапу: 07-2019

Закінчення етапу: 12-2019

Вид звітного документа: Проміжний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Інститут електронної фізики НАНУ

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05540008

Підпорядкованість: Національна академія наук України

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

Телефон: 380312643524

E-mail: nanu.iep@gmail.com

WWW: http://www.iep.org.ua/

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Національна академія наук України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 00019270

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

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380442350981

E-mail: prez@nas.gov.ua

WWW: http://nas.gov.ua

4. Джерела та напрями фінансування

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

КПКВК: 6541030

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 50 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

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

Назва роботи (англ)

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

Реферат (укр)

Реферат Звіт про науковий проект: 32 с., 1 табл., 8 рис., 25 джерел. АТОМ, АВТОІОНІЗАЦІЯ, ЗБУДЖЕННЯ, ІОНІЗАЦІЯ, ЕФЕКТИВНИЙ ПЕРЕРІЗ, КОРЕЛЯЦІЙНІ ЕФЕКТИ. Об’єкт дослідження – процеси утворення і розпаду автоіонізаційних станів атома рубідію, явища резонансного збудження та кореляційних ефектів, що супроводжують ці процеси. Мета роботи – дослідження ролі кореляційних ефектів у перебігу елементарних процесів при парних зіткненнях електронів та атомів лужних металів, 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 AIC 4p5nl(L1S1)n'l'LSJ атома рубідію. Здійснено аналіз найбільш вдалого врахування різного набору конфігурацій остова для важкого атома рубідію. Показано наявність припорогового резонансного збудження за рахунок короткоіснуючих станів нега¬тивного іона Rb-. Досліджено параметр відношення інтенсивності R0, 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 майбутніх розрахунків фундаментальних характеристик складних електрон-іонних систем.

Реферат (англ)

Annotation ATOM, AUTOIONIZATION, EXCITATION, IONIZATION, EFFECTIVE CROSS-SECTION, CORRELATION EFFECTS. Objects of research is the processes of formation and decay of the autoionization states of a rubidium atom, the phenomena of resonant excitation and the correlation effects that accompany these processes. Purpose of the work: investigation of the role of correlation effects in the course of elementary processes in pair collisions of electrons and atoms of alkali metals occurring in plasma media with impurities of metal vapor, obtaining energy and dynamic characteristics, atomic constants and modeling of the basic mechanisms of interparticle interaction. Research Methods - within the modern Flexible Atomic Code software package, distorted-wave and Borne approximations were used to obtain excitation cross sections, which take into account the relativistic nature of the excitation of complex atoms by using the Dirac-Coulomb Hamiltonian and the numerical calculation of the basis Dirac-Fock-Slater relativistic radial orbitals. The calculations were also performed in multi-configuration approximations, which allowed to establish the role of correlation effects in the calculation of excitation cross sections. The main scientific results are calculated electron excitation energies, excitation cross sections, the probability of electronic decay, and for selected AIS 4p5nl (L1S1) n'l'LSJ rubidium atoms. The analysis of the most successful incorporation of various core set of configurations for heavy rubidium atom.. The presence of a threshold resonant excitation due to the short-lived states of the negative Rb- ion is shown. Studied intensity ratio parameter R0, which made it possible to assess the reliability of experimental and theoretical data. The results obtained not only allowed us to interpret the available experimental data, also modify theoretical approaches for future calculations of the fundamental characteristics of complex electron-ion systems.

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

Коди тематичних рубрик НТІ: 29.27.07, 29.29.15

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Модифіковані теоретичні методи опису структури атомних систем та характеристик їх зіткнень з електронами.

Назва продукції (англ): Modified methods of theoretical description of atomic systems structure and characteristics of collisions with electrons.

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 72.19 - дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук

Опис продукції (укр): Результати досліджень можуть бути використані при розробці і модифікації різних теоретичних моделей, підходів і наближень; у розв'язку прикладних проблем обміну енергією у низькотемпературній плазмі; для інтерпретації і моделювання процесів у міжзоряному просторі, астрофізичних об‘єктах, складових атмосфери Землі; при аналізі процесів у активних середовищах оптичних квантових генераторів та інших пристроїв нелінійної оптики. Одержані результати дали змогу не тільки інтерпретувати наявні експериментальні дані, а й модифікувати теоретичні підходи та наближення для майбутніх розрахунків фундаментальних характеристик складних електрон-іонних систем. 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). Отримані дані будуть використані при створенні різних баз даних з атомних констант, зокрема бази даних NIST.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Результати досліджень можуть бути використані при розробці і модифікації різних теоретичних моделей, підходів і наближень; у розв'язку прикладних проблем обміну енергією у низькотемпературній плазмі.

Стадія завершеності НТП: Проміжний звіт

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: 07.201912.2019

Виробник продукції: ІЕФ НАНУ

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

НТП 2

Назва продукції (укр): Дослідження ролі кореляційних ефектів у перебігу елементарних процесів при парних зіткненнях електронів та атомів, що мають місце у плазмових середовищах з домішками пари металів, отримання енергетичних і динамічних характеристик, атомних констант та моделювання основних механізмів міжчастинкової взаємодії.

Назва продукції (англ): Investigation of the role of correlation effects in the course of elementary processes at pair collisions of electrons and atoms that occur in plasma environments impurities pair of metals, energy and obtaining dynamic characteristics and atomic constants modeling of basic mechanisms of interparticle interactions.

Очікувані результати: Методи, теорії

Галузь застосування: 72.19 - дослідження й експериментальні розробки у сфері інших природничих і технічних наук

Опис продукції (укр): Результати досліджень можуть бути використані при розробці і модифікації різних теоретичних моделей, підходів і наближень; у розв'язку прикладних проблем обміну енергією у низькотемпературній плазмі; для інтерпретації і моделювання процесів у міжзоряному просторі, астрофізичних об‘єктах, складових атмосфери Землі; при аналізі процесів у активних середовищах оптичних квантових генераторів та інших пристроїв нелінійної оптики.

Одержані результати дали змогу не тільки інтерпретувати наявні експериментальні дані, а й модифікувати теоретичні підходи та наближення для майбутніх розрахунків фундаментальних характеристик складних електрон-іонних систем. 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). Отримані дані будуть використані при створенні різних баз даних з атомних констант, зокрема бази даних NIST.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Результати досліджень можуть бути використані при розробці і модифікації різних теоретичних моделей, підходів і наближень; у розв'язку прикладних проблем обміну енергією у низькотемпературній плазмі.

Стадія завершеності НТП: Проміжний звіт

Впровадження НТП: Не впроваджено

Строки впровадження: 07.201912.2019

Виробник продукції: ІЕФ НАНУ

Споживачі продукції:

Перспективні ринки:

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

1. Roman V., Demesh Sh. Electron-impact excitation of the (4p55s5p)4S3/2 quasimetastable state in Rb // XXXI Int. Conf. on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC). – Extended Abstracts, Deauville, France, on July 23-30, 2019, WE-064, P.127.

2. Maslyuk V.T., Parlag O.O., Romanyuk M.I., Lendyel O.I., Pop O.M. Transformations of mass/charges fission fragments spectra with consideration the postfission emission of nuclear particles: 232Th // arXiv:1907.04922. – 2019. – 9 pp.

3. Roman V. Theoretical research electron excitation of the autoionizing states in Rb atoms // Programme and abstract «International Conference of Young Scientists and Post-graduate Students IEP-2019». – Uzhgorod. – 2019. – P. 120.

4. Демеш Ш.Ш., Келемен В.І., Ремета Е.Ю., Роман В.І. Розрахунки перерізів розсіювання електрона молекулярними системами // Українська конференція з ФП та КТС – 2019. – Київ. – С. 52.

5. Демеш Ш.Ш., Келемен В.І., Ремета Е.Ю., Роман В.І. Розрахунки перерізів розсіювання електрона атомними системами // Українська конференція з ФП та КТС – 2019. – Київ. – С. 51.

6. Роман В.І., Поп О.М., Пилипчинець І.В. Розрахунки перерізів збудження автоіонізаційних станів атома рубідію // Українська конференція з ФП та КТС – 2019. – Київ. – С. 50.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 32

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Пилипчинець Ігор Васильович

Поп Оксана Михайлівна (к. ф.-м. н.)

Керівник організації:

Гомонай Ганна Миколаївна (д. ф.-м. н., с.н.с.)

Керівники роботи:

Роман Вікторія Іванівна (к. ф.-м. н.)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.