

«УТВЕРЖДАЮ»

Проректор по научной работе
и инновационной деятельности
Российского государственного
педагогического университета
им. А. И. Герцена

член-корреспондент РАО,
доктор педагогических наук, профессор
Писарева Светлана Анатольевна

«26» мая 2023 г.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

**федерального государственного бюджетного образовательного
учреждения высшего образования «Российский государственный
педагогический университет им. А. И. Герцена»**

Диссертация Воронова Ярослава Владимировича «Теоретические исследования неупругих столкновений атомов и ионов различных химических элементов с атомами и ионами водорода» выполнена на кафедре теоретической физики и астрономии федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена».

В период подготовки диссертации соискатель Воронов Ярослав Владимирович работал в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена», на кафедре теоретической физики и астрономии института физики, в должности ассистента.

В 2018 г. окончил федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена», освоил программу магистратуры по направлению подготовки 03.04.02 Физика, присвоена квалификация магистра.

В 2022 г. году окончил федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена», освоил программу подготовки научно-педагогических кадров в аспирантуре по направлению подготовки 03.06.01 Физика и астрономия, присвоена квалификация «Исследователь. Преподаватель-исследователь».

Справка о результатах кандидатских экзаменов №50 выдана 29.05.2023 федеральным государственным бюджетным образовательным учреждением высшего образования «Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена».

Научный руководитель – Беляев Андрей Константинович, доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой теоретической физики и астрономии института физики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена».

По итогам обсуждения принято следующее заключение:

Оценка выполненной соискателем работы

В диссертационном исследовании Воронова Ярослава Владимировича решена научная задача определения характеристик неупругих процессов возбуждения, девозбуждения, перезарядки, происходящих при низкоэнергетических столкновениях атомов и ионов кислорода, кальция и лития с атомами и ионами водорода.

Диссертация является законченной научно-квалифицированной работой, соответствующей требованиям, предъявляемым к кандидатским диссертациям.

По теме диссертации опубликовано 9 работ, из них в рецензируемых научных журналах, рекомендованы ВАК при Министерстве науки и высшего образования РФ 9 работ, что подтверждает достаточность апробации исследования.

Диссертация может быть представлена в совет по защите диссертации на соискание ученой степени кандидата наук, на соискание ученой степени доктора наук.

Личное участие соискателя в получении результатов, изложенных в диссертации.

Соискатель самостоятельно проводил поиск и анализ актуальной литературы по теме диссертации, принимал участие в обсуждении целей и задач исследования, лично планировал и проводил численные и аналитические расчёты, а также принимал участие в создании специальных программ для ПЭВМ, необходимых для вычислений, подготавливал результаты проведённых исследований для опубликования в международных рецензируемых журналах.

Обсуждение и анализ полученных результатов проводились совместно с научным руководителем, а также Яковлевой Светланой Анатольевной, к.ф.-м.н., доцентом кафедры теоретической физики и астрономии и Родионовым Дмитрием Сергеевичем, к.ф.-м.н., директором обсерватории.

В ходе исследования были получены следующие результаты.

Квантовым методом токов вероятности, позволяющим учесть неадиабатические переходы на малых межъядерных расстояниях, рассчитаны полные вероятности неадиабатических переходов, а также сечения и константы скорости неупругих процессов, происходящих при медленных столкновениях атомов и ионов кислорода, кальция и лития с атомами и ионами водорода с использованием наиболее точных на сегодняшний день молекулярных потенциальных энергий квазимолекул OH , CaH , LiH , квазимолекулярного иона CaH^+ , полученных квантово-химическими методами из первых принципов.

Степень достоверности результатов проведенных исследований.

Достоверность и обоснованность результатов и выводов диссертационного исследования обеспечивается четкой формулировкой поставленных задач, использованием надёжных квантовых методов для расчета ядерной динамики, сотрудничеством с международными научными группами, занимающимися решением задач квантовой химии и являющимися экспертами в данной области, хорошим согласием полученных результатов с известными результатами, полученными другими научными группами, а также непротиворечивыми результатами применения полученных автором диссертации констант скоростей при моделировании спектров в условиях отклонения от локального термодинамического равновесия.

Новизна результатов проведенного исследования.

Научная новизна диссертационного исследования заключается в следующем:

1. Впервые квантовым методом токов вероятности и по многоканальной формуле рассчитаны характеристики неупругих процессов, происходящих при медленных столкновениях атомов и ионов кислорода с атомами и ионами водорода с использованием потенциальных энергий квазимолекулы OH , полученных квантово-химическими методами из первых принципов.

2. Впервые квантовым методом токов вероятности получены сечения и константы скоростей для неупругих столкновений $\text{Ca} + \text{H}^+$, $\text{Ca}^+ + \text{H}$ и $\text{Ca}^{2+} + \text{H}^-$ с использованием потенциальных энергий молекулярного иона CaH^+ , полученных с помощью квантово-химических расчётов из первых принципов.

3. Впервые с помощью многоканальной формулы получены сечения и константы скоростей для неупругих столкновений $\text{Ca}^+ + \text{H}$ и $\text{Ca}^{2+} + \text{H}^-$ с учётом тонкой структуры энергетических уровней с использованием потенциальных энергий молекулярного иона CaH^+ , полученных с помощью квантово-химических расчётов из первых принципов и модифицированных в

рамках асимптотической модели учёта тонкого расщепления энергетических уровней.

4. Квантовым методом токов вероятности получены уточнённые сечения и константы скоростей неупругих процессов, происходящих при столкновениях атомов и катионов лития с атомами и анионами водорода. Исследовано влияние замены изотопов лития (${}^6\text{Li} \leftrightarrow {}^7\text{Li}$) и водорода (${}^1\text{H} \leftrightarrow {}^2\text{H} \leftrightarrow {}^3\text{H}$) при столкновениях на величины сечений и констант скоростей неупругих процессов.

5. Квантовым методом токов вероятности (стохастическая версия алгоритма) получены полные вероятности неадиабатических переходов, сечения и константы скоростей неупругих процессов, происходящих при столкновениях кальция с водородом с использованием потенциальных энергий квазимолекулы CaH, полученных квантово-химическими методами из первых принципов с учётом областей неадиабатичности, расположенных на относительно малых межъядерных расстояниях.

6. Модифицированный асимптотический метод учёта тонкой структуры энергетических уровней получил дальнейшее обобщение для столкновений с водородом элементов II группы таблицы Менделеева.

Практическая значимость проведенного исследования.

Практическая значимость работы обусловлена следующим:

1. Рассчитаны сечения и константы скоростей неупругих процессов, происходящих при столкновениях атомов и ионов лития, кальция, кислорода с атомами и ионами водорода, необходимые для дальнейшего использования при моделировании фотосфер звёзд в условиях отклонения от локального термодинамического равновесия и получения более точных данных о количественном составе фотосфер звёзд.

2. Написаны и отлажены компьютерные программы, предназначенные для расчёта полных вероятностей неадиабатических переходов из выбранного начального состояния в заданное конечное состояние, методом токов вероятности (детерминистическая и стохастическая версии алгоритма), а также сечений и констант скорости неупругих процессов. Стохастическая версия алгоритма использует технологию CUDA, предназначенную для параллельных вычислений на GPU.

Ценность научных работ соискателя.

Ценность научных работ соискателя состоит в том, что в опубликованных автором работах отражены основные результаты исследования – с помощью физически обоснованных квантовых методов получены значения величин сечений и констант скоростей неупругих процессов, происходящих при столкновениях атомов и ионов кислорода, кальция и лития с атомами и ионами водорода. Полученные константы скоростей применяются при моделировании спектров в условиях отклонения

от локального термодинамического равновесия, что позволяет точнее определять содержание кислорода, кальция и лития в фотосферах звезд.

**Полнота изложения материалов диссертации в работах,
опубликованных соискателем.**

Научные результаты, полученные автором, представлены в его публикациях в международных рецензируемых журналах, входящих в первый квартиль (Q1), включенных в перечень изданий, рекомендованных ВАК РФ и индексируемых в Web of Science и Scopus:

1. Voronov Ya. V. et.al. Atomic Data on Inelastic Processes in Calcium–Hydrogen Collisions / A. K. Belyaev, Ya. V. Voronov, S. A. Yakovleva, A. Mitrushchenkov, M. Guitou, N. Feautrier // *The Astrophysical Journal*. – 2017. – Vol. 851. – №1. – Article ID 59 (5pp). (0.6 п.л. / 0.1 п.л.).

2. Voronov Ya. V. et. al. Atomic Data on Inelastic Processes in Low-energy Lithium–Hydrogen Collisions / A. K. Belyaev, Ya. V. Voronov // *The Astrophysical Journal*. – 2018. – Vol. 868. – №2. – Article ID 86 (6pp). (0.7 п.л. / 0.3 п.л.).

3. Voronov Ya. V. et. al. Data on Inelastic Processes in Low-energy Calcium–Hydrogen Ionic Collisions / A. K. Belyaev, Ya. V. Voronov, F. X. Gadea // *The Astrophysical Journal*. – №1. – 2018. – Vol. 867. – Article ID 87 (7pp). (0.8 п.л. / 0.3 п.л.).

4. Voronov Ya. V. et. al. Inelastic processes in calcium-hydrogen ionic collisions with account for fine structure / A. K. Belyaev, Ya. V. Voronov, S.A. Yakovleva // *Physical Review A*. – 2019. – Vol. 100 (6). – Article ID 062710 (10pp). (1.2 п.л. / 0.4 п.л.).

5. Voronov Ya. V. et.al. Inelastic excitation and charge transfer processes for oxygen in collision with H atoms / A. Mitrushchenkov, M. Guitou, A. K. Belyaev, Ya. V. Voronov, N. Feautrier // *Journal of Chemical Physics*. – 2019. – Vol. 150 (6). – Article ID 064312 (9pp). (1.0 п.л. / 0.2 п.л.).

6. Voronov Ya. V. et.al. Inelastic processes in oxygen–hydrogen collisions / A. K. Belyaev, Ya. V. Voronov, A. Mitrushchenkov, M. Guitou, N. Feautrier // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. – 2019. – Vol. 487 (4). – P. 5097–5105. (1.0 п.л. / 0.2 п.л.).

7. Voronov Ya. V. et.al. Solar oxygen abundance / M. Bergemann, R. Hoppe, E. Semanova, M. Carlsson, S. A. Yakovleva, Ya. V. Voronov, M. Bautista, A. Nemer, A. K. Belyaev, J. Leenaarts, L. Mashonkina, A. Reiners, M. Ellwarth // *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*. – 2021. Vol. 508. – P. 2236–2253. (2.1 п.л. / 0.1 п.л.).

8. Voronov Ya. V. et. al. Isotopic effects in low-energy lithium-hydrogen collisions / A. K. Belyaev, Ya. V. Voronov // *Physical Review A*. – 2021. – Vol. 104, №2. – Article ID 022812 (13pp) (1.5 п.л. / 0.8 п.л.).

9. Voronov Ya. V. et. al. Atomic data on inelastic processes in boron-hydrogen collisions with accounting for fine structure / Ya. V. Voronov,

Соответствие научной специальности и отрасли науки

Диссертация Воронова Ярослава Владимировича «Теоретические исследования неупругих столкновений атомов и ионов различных химических элементов с атомами и ионами водорода» соответствует специальности 1.3.3. Теоретическая физика (физико-математические науки).

Диссертация соответствует требованиям, установленным п. 9-14 «Положения о присуждении ученых степеней» утвержденного постановлением Правительства Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842 (с изменениями и дополнениями).

Диссертация «Теоретические исследования неупругих столкновений атомов и ионов различных химических элементов с атомами и ионами водорода» Воронова Ярослава Владимировича рекомендуется к защите на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3. Теоретическая физика (физико-математические науки).

Заключение принято на заседании кафедры теоретической физики и астрономии института физики федерального государственного бюджетного образовательного учреждения высшего образования «Российский государственный педагогический университет им. А. И. Герцена».

Присутствовало на заседании 10 человек.

Результаты голосования:

"за" - 10 чел., "против" - нет, "воздержалось" - нет.

Протокол № 8-22/23 от «16» мая 2023 г.



Яковлева С.А.,
кандидат физико-математических наук,
и.о. заведующего кафедрой
теоретической физики и
астрономии
председатель заседания



Родионов Д.С.,
кандидат физико-математических наук,
директор обсерватории
секретарь