

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Гелина Максима на диссертацию Воронова Ярослава Владимировича на тему «Теоретические исследования неупругих столкновений атомов и ионов различных химических элементов с атомами и ионами водорода», представленную на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3 Теоретическая физика

Моделирование спектров звёзд в рамках предположения об отклонении от локального термодинамического равновесия является современным мощным инструментом астрофизических исследований, позволяющим наиболее точно определять количественный состав звёзд. Однако для применения этого инструмента необходимо большое количество данных о столкновительных и радиационных процессах. Среди столкновительных процессов важны в первую очередь столкновения с электронами и нейтральным водородом. В случае относительно холодных звёзд классов FGK с низким содержанием металлов (элементов тяжелее гелия) столкновения с нейтральным водородом играют очень большую роль. Поэтому генерация атомных данных о столкновениях с водородом для значимых в астрофизике химических элементов надёжными квантовыми методами является весьма важной задачей. В связи с этим, **актуальность и значимость** темы данной диссертации, целью которой и является расчёт констант скорости неупругих процессов в столкновениях кислорода, кальция и лития с водородом, не вызывает никаких сомнений.

Научная новизна диссертации заключается в расчётах сечений и констант скорости неупругих процессов возбуждения, девозбуждения, перезарядки для столкновений кислорода, кальция и лития с водородом, впервые полученных автором в рамках квантовых методов. Также отметим, что автором развит асимптотический метод учёта тонкой структуры для случая столкновений с водородом атомов и ионов с двумя валентными электронами, что также является важным результатом данной работы.

Практическая значимость диссертации обусловлена тем, что рассчитанные автором константы скорости могут быть применены для моделирования спектральных линий кислорода, кальция (как нейтрального, так и однократно заряженного катиона) и лития в условиях отклонения от локального термодинамического равновесия, что позволит увеличить точность определения содержания указанных элементов в звёздах. Это, в свою очередь, приведёт к лучшему пониманию химической эволюции звёздного вещества. Кроме того, автором разработан комплекс компьютерных программ, которые впоследствии могут использоваться другими исследователями.

Обоснованность полученных результатов обусловлена тем, что автор использовал надёжные квантово-химические данные, полученные квантовыми методами из первых принципов международными коллективами, участники которых являются признанными экспертами в области квантовой химии, а также проверенные методы исследования ядерной динамики. **Достоверность** полученных результатов сомнений не вызывает. Стоит отметить,

что **личный вклад** Воронова Я. В. в получение результатов, отражённых в данном диссертационном исследовании, является определяющим.

Диссертация состоит из Введения, пяти глав, Заключения и списка литературы из 151 наименования, а также включает 48 рисунков и 11 таблиц.

Во **Введении** автор обосновывает актуальность темы диссертации, формулирует цель и задачи диссертационного исследования, положения, выносимые на защиту, теоретическую и практическую значимости результатов, научную новизну, обосновывает достоверность выводов, а также указывает личный вклад в исследование.

В **первой главе** автор приводит теоретические методы исследования неупругих процессов, происходящих при низкоэнергетических атомных столкновениях. Автор довольно подробно описывает стандартный адиабатический подход Борна-Оппенгеймера, в рамках которого и проводятся все исследования в данной работе. Также автор описывает методы решения как электронной задачи (такие как метод Хартри-Фока (HF), методы самосогласованного поля (SCF), методы конфигурационного взаимодействия (CI), методы связанных кластеров (CC), теория возмущений Мёллера-Плессета (MP), модельные асимптотические методы), так и методы решения задачи о неадиабатической ядерной динамике (такие как метод перепроецирования, многоканальная формула, метод токов вероятности). Хочу отметить, что кратко разобранное в диссертационной работе представление вероятности Ландау-Зинеровских переходов через межъядерное расстояние и его вторую производную, разработанное научным руководителем данной диссертационной работы профессором Беляевым и доктором Лебедевым, в настоящее время повсеместно используется для расчета неадиабатических молекулярных переходов в методе квазиклассических траекторий. Также приведены формулы для расчёта сечений и констант скорости неупругих процессов.

Во **второй главе** автор приводит обобщение метода учёта тонкой структуры энергетических уровней в столкновениях с водородом, предложенного в рамках модельного асимптотического метода построения молекулярных термов для столкновений с водородом атомов и ионов с одним валентным электроном, на случай атомов и ионов с двумя валентными электронами. Автором получены коэффициенты, связывающие радиальные матричные элементы неадиабатической связи в представлении LS-связи и JJ-связи. Выводы расписаны весьма подробно на примере столкновений Ca + H.

В **главах 3-5** автор приводит результаты исследования неупругих процессов в столкновениях кислорода, кальция и лития с водородом соответственно. Во всех трёх главах автор использует квантовые модельные методы, основанные на модели Ландау-Зинера, для исследования ядерной динамики в столкновительных квазимолекулах OH, CaH, LiH, а также квазимолекулярного иона CaH⁺, при этом используя потенциальные энергии указанных квазимолекул и квазимолекулярных ионов, полученные различными международными коллективами квантово-химическими методами из первых принципов (таких как MRCI и метод псевдопотенциала). Всего автор рассчитал сечения и константы скорости для 1432 неупругих процесса возбуждения, девозбуждения, перезарядки, и исследовал зависимость некоторых из этих констант скорости от температуры. Также представлен анализ полученных автором результатов с известными в литературе данными, причём как

теоретическими, так и экспериментальными. Автором показано хорошее согласие полученных им результатов для лития с экспериментом, а для кальция с более точными и трудоёмкими результатами, полученными позднее наиболее точным квантовым методом перепроецирования. Для кислорода же сравнение было проведено лишь с другими данными, полученными также модельными методами, ввиду отсутствия как экспериментальных данных, так и более точных теоретических расчётов.

В **Заключении** автор формулирует основные результаты, полученные им в диссертационной работе.

Тем не менее, к представленной работе можно сделать следующие замечания:

- 1) Мне кажется, обозначение операторов неадиабатической связи через D_{kj} в совокупности с DD_{kj} (уравнения (1.20)) не очень удачно. На мой взгляд, выражения $D_{kj}^{(1)}$ и $D_{kj}^{(2)}$ являются более адекватными. Но если используемые автором обозначения являются общепринятым, я снимаю свои возражения.
- 2) Во второй главе автор получает явные численные значения коэффициентов связи радиальных матричных элементов неадиабатической связи в представлениях LS- и JJ-связи. Для данного метода учёта тонкой структуры в случае атомов и ионов с одним валентным электроном имеется формула, позволяющая получить численные значения этих коэффициентов. Для полной завершённости в этой главе не хватает такой формулы для рассматриваемого автором случая, хотя конкретные численные коэффициенты охватывают широкий спектр возникающих на практике задач. Кроме того, квантовые числа, определяющие угловые моменты и спиновые переменные, не определены в уравнениях (2.2) и ниже.
- 3) Автор приводит зависимость констант нейтрализации от температуры, но не раскрывает физические причины подобных зависимостей. Я легко могу представить, почему константа скорости возрастает с температурой, но в чем причины убывания констант нейтрализации с ростом температуры? И вообще, какова природа зависимостей констант скорости атомных столкновений от температуры? Является ли это чисто кинетическим эффектом, или роль температуры более многогранна?
- 4) Мне любопытно было бы узнать, для исследования каких именно звёзд использовались данные, полученные диссертантом.

Эти замечания, разумеется, не снижают общей положительной оценки диссертации Я. В. Воронова, которая является оригинальным научным исследованием, выполненным на высоком научном уровне. Диссертация представляет собой законченное научное исследование – научно-квалификационную работу, в которой содержится решение задачи, имеющей большое значение для теоретической физики. Основные результаты, изложенные в данной диссертации, опубликованы суммарно в 9 статьях в ведущих международных высокорейтинговых рецензируемых научных журналах (PRA, MNRAS, ApJ, JCP), индексируемых базами данных Web of Science, Scopus. Также результаты данного диссертационного исследования были представлены автором на ряде международных конференций и семинарах по теоретической физике.

Диссертационная работа Воронова Ярослава Владимировича на тему: «Теоретические исследования неупругих столкновений атомов и ионов различных химических элементов с атомами и ионами водорода» соответствует требованиям, установленным Приказом № 11181/1 от 19.11.2021 «О порядке присуждения ученых

степеней в Санкт-Петербургском государственном университете», соискатель Воронов Ярослав Владимирович заслуживает присуждения учёной степени кандидата физико-математических наук по специальности 1.3.3 Теоретическая физика. Нарушения пунктов 9 и 11 указанного Порядка в диссертации не обнаружены.

Член диссертационного совета

PhD, Doctor habil.,
professor of physics,
School of Sciences,
Hangzhou Dianzi University,
Xiasha Higher Education Zone,
Hangzhou, 310018, China.

Phone: +86 19558230775
e-mail: maxim@hdu.edu.cn

May 20, 2024

