

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Полозкова Романа Григорьевича 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

Диссертационная работа Воронова Я. В. посвящена теоретическим исследованиям неупругих процессов, происходящих при столкновениях атомов и положительных ионов кислорода, кальция и лития с атомами и отрицательными ионами водорода, включая детальные расчеты сечений и констант скоростей этих процессов. Перечисленные химические элементы представляют интерес для астрофизических исследований, например, для моделирования спектров этих элементов в атмосферах звёзд в условиях отклонения от локального термодинамического равновесия. Потребность в указанных характеристиках определяется тем, что неупругие процессы, происходящие при столкновениях с нейтральным водородом, вносят большую погрешность в расчетах моделируемых спектральных линий. Дело в том, что при моделировании атмосфер звезд в условиях отклонения от локального термодинамического равновесия, требуются характеристики большого числа неупругих процессов как излучательных, так и безизлучательных, например, столкновительных с электронами, атомами и ионами. Однако, для неупругих процессов при столкновениях с водородом такие данные практически отсутствовали, и для оценок величин констант скорости долгое время использовалась полуэмпирическая формула Дравина, которая является модификацией классической формулы Томпсона для расчёта сечений ионизации при электронном ударе. Впоследствии было осознано, что константы скорости, полученные по формуле Дравина, являются недостоверными, они отличаются от констант скорости, полученных квантовыми методами из первых принципов, на несколько порядков как в большую, так и в меньшую сторону, а для процессов перезарядки, для которых квантовые расчеты дают характерные величины констант скорости порядка 10^{-8} см³/с, формула Дравина приводит к нулевым значениям констант скорости. В связи с этим физически достоверные расчёты констант скорости большого числа неупругих процессов при столкновениях астрофизически значимых элементов с водородом представляют большой интерес и являются целью данной диссертационной работы. Таким образом, **актуальность и значимость** темы диссертации вполне обоснована.

Научная новизна диссертации состоит (1) в дальнейшем обобщении асимптотического метода учёта тонкой структуры в столкновениях атомов и ионов с двумя валентными электронами с атомами и ионами водорода, (2) а также в том, что автором впервые квантовыми методами были рассчитаны сечения и константы скорости неупругих процессов возбуждения, девозбуждения, перезарядки для столкновений атомов и ионов кислорода, кальция и лития с водородом, (3) и полученные данные проанализированы и на основе анализа выявлены важные закономерности.

Практическая значимость диссертации состоит в том, рассчитанные автором константы скорости могут быть использованы в дальнейшем, и уже используются, для более точного астрофизического моделирования спектральных линий кислорода, кальция и лития в условиях отклонения от локального термодинамического равновесия, что приведёт к более точному определению содержания указанных элементов в звёздах.

Обоснованность полученных результатов обусловлена тем, что автор использовал проверенные и надёжные квантовые методы для исследования ядерной динамики, а также сотрудничеством с международными научными группами, занимающимися решением задач квантовой химии и являющихся признанными экспертами в данной области. **Достоверность** полученных результатов сомнений не вызывает. **Личный вклад** Воронова Я. В. в исследованиях, отражённых в диссертации, 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** обосновывается актуальность работы, сформулированы цель и задачи диссертационного исследования, положения, выносимые на защиту, теоретическая и практическая значимости результатов, научная новизна, а также достоверность и обоснованность выводов, указан личный вклад автора.

Первая глава посвящена описанию теоретических методов исследования неупругих процессов, происходящих при медленных атомных столкновениях. Подробно описан стандартный подход Борна-Оппенгеймера, в рамках которого задача об атомных столкновениях разделяется на два этапа: 1) решение задачи на собственные значения и собственные функции электронного гамильтониана; 2) решение неадиабатической ядерной динамики. В этой главе описаны методы решения обоих этапов, как квантовые методы из первых принципов, так и модельные методы.

Во **второй главе** представлен метод учёта тонкой структуры энергетических уровней в столкновениях с водородом атомов и ионов с двумя валентными электронами, являющийся дальнейшим обобщением метода учёта тонкой структуры в асимптотической модели построения молекулярных термов при столкновениях водорода с атомами и ионами, имеющими один валентный электрон. Все выкладки довольно подробно расписаны на примере столкновений нейтрального кальция с водородом.

Главы 3-5 посвящены исследованию неупругих процессов, происходящих при столкновениях кислорода, кальция и лития с водородом соответственно. В **третьей главе** рассматриваются столкновения кислорода с водородом. Исследование ядерной динамики проведено двумя модельными методами: методом токов вероятности и многоканальной формулой. Первым методом исследована неадиабатическая ядерная динамика в шести молекулярных симметриях для различного количества молекулярных состояний, порождаемых 13-ю молекулярными состояниями столкновительной квазимолекулы OH, а именно: 11 состояний в симметрии $^4\Sigma^-$, 4 состояния в $^2\Sigma^+$, 7 в $^2\Pi$, 7 в $^2\Sigma^-$, 6 в $^4\Pi$ и 3 в симметрии $^6\Sigma^-$. Вторым методом неадиабатическая ядерная динамика исследована только для молекулярной симметрии $^4\Sigma^-$, но в этом расчёте были учтены дополнительные 5 высоковозбуждённых состояний квазимолекулы OH с помощью асимптотической модели.

Для всех неупругих процессов возбуждения, девозбуждения и перезарядки автором были рассчитаны сечения в диапазоне энергий столкновения от 0,01 до 100 эВ, а константы скорости рассчитаны в диапазоне температур от 1000 до 10000 К. Полученные результаты довольно подробно проанализированы автором.

В **четвёртой главе** рассматриваются столкновения кальция с водородом. Автор исследует неадиабатическую ядерную динамику в столкновительных системах CaH для 11 молекулярных состояний и CaH⁺ для 17 и 22 молекулярных состояний без учёта тонкой структуры и с её учётом соответственно. Причём учёт тонкой структуры в последнем случае осуществлялся в рамках модернизированного асимптотического метода учёта тонкой структуры, но с использованием потенциалов, полученных методом конфигурационного взаимодействия для двух валентных электронов с учётом неэмпирического псевдопотенциала остова иона Ca²⁺, которые также использовались при исследовании неадиабатической ядерной динамики в столкновительной системе CaH⁺ без учёта тонкой структуры. Также получены сечения и константы скорости неупругих процессов возбуждения, девозбуждения и перезарядки, результаты проанализированы. Проведено сравнение констант скорости, полученных методом токов вероятности, с результатами, полученными позднее другими авторами квантовым методом перепроецирования. Показано очень хорошее согласие обоих наборов данных.

В **пятой главе** рассматриваются столкновения лития с водородом. Помимо рассчитанных модельным методом токов вероятности сечений и констант скорости для неупругих процессов возбуждения, девозбуждения и перезарядки в столкновениях лития с водородом, автор также исследовал вопрос влияния замены изотопов как лития, так и водорода на величины сечений и констант скорости. Автор показал, что замена изотопов лития (⁶Li ↔ ⁷Li) влияет слабо на величины сечений и констант скорости, в то время как замена изотопов водорода (¹H ↔ ²H ↔ ³H) может оказывать существенное влияние на эти величины, в отдельных случаях вплоть до нескольких порядков величины. Также автор показал, что замена изотопов слабо влияет на величины констант скорости, которые попадают в так называемое оптимальное окно упрощённой модели.

В **Заключении** сформулированы основные результаты, полученные в диссертационной работе.

К представленной работе можно сделать следующие замечания:

- 1) Во второй главе автор приводит вывод обобщения асимптотического модельного метода учёта тонкой структуры на случай столкновений с водородом атомов и ионов с двумя валентными электронами на примере столкновений нейтрального кальция с водородом. Однако, по моему мнению, главу стоило бы дополнить апробацией этого метода для столкновений того же нейтрального кальция с водородом, к тому же автор уделил довольно много внимания исследованию столкновений кальция с водородом в четвёртой главе.
- 2) Следует отметить, что диссертация довольно объёмная. Можно было бы не выделять вторую главу диссертации в отдельную главу, а включить ее сокращенный вариант в четвертую главу, в которой проводятся исследования с учетом тонкой структуры, ограничившись главами 1, 3-5, диссертация при этом не потеряла бы целостности, а наоборот, получила бы более законченный вид.

Сделанные замечания, тем не менее, не снижают общей положительной оценки диссертационной работы 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 диссертации опубликованы в 9 статьях в ведущих международных высокорейтинговых рецензируемых научных журналах, индексируемых базами данных Web of Science, Scopus, а также представленных на ряде международных конференций.

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

доктор физико-математических наук,
заведующий кафедрой высшей математики и физики федерального
государственного бюджетного учреждения высшего
образования и науки «Санкт-Петербургский национальный
исследовательский Академический университет имени
Ж. И. Алфёрова Российской академии наук»,
улица Хлопина, 8, к. 3, лит. А, Санкт-Петербург, 194021
тел.: +79119551892

e-mail: polozkov@spbau.ru

дата 20.05.2024

М

Полозков Роман Григорьевич

