

## ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Руднева Владимира Александровича 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

Диссертация Я.В. Воронова посвящена исследованию неупругих процессов, происходящих при медленных столкновениях различных атомов и ионов с водородом. В диссертации – и это является, несомненно, одной из её сильных сторон – автор уделяет серьёзное внимание астрофизическим приложениям проводимых им исследований, демонстрируя глубокое понимание важности проводимого исследования не только в рамках поставленных конкретных задач, но и в более широком контексте. Данные о неупругих столкновительных процессах востребованы в различных астрофизических приложениях, в частности, для моделирования как фотосфер звезд, так и межзвездных сред в условиях отклонения от локального термодинамического равновесия. Отличительной особенностью моделирования газовых и плазменных сред является необходимость знать константы скорости для большого числа неупругих парциальных процессов, которое доходит до сотен, тысяч и даже миллионов. Исследование такого большого числа каналов полностью квантовыми методами нереализуемо даже с использованием наиболее мощных современных компьютеров. Потому, несомненно, развитие и применение реализованных и исследованных в диссертации модельных подходов являются **актуальным**.

В частности, в диссертации развит асимптотический подход учета тонкой структуры квазимолекул, а также квантовый метод токов вероятности. Метод токов вероятностей с использованием точных квантово-химических данных применен к исследованиям медленных столкновений атомов и ионов кислорода, кальция и лития с атомами и ионами водорода, в то время как асимптотический подход учета тонкой структуры применен в исследованиях столкновительной системы  $\text{CaH}^+$ . Исследование важных для астрофизики, сложных для моделирования неупругих бинарных процессов определяют **теоретическую и практическую значимость работы**. Теоретическая значимость диссертационного исследования Я. В. Воронова определяется развитием модельных подходов для расчетов сечений и констант скорости неупругих процессов, происходящих при медленных атомных столкновениях. Практическая значимость исследования обоснована тем, что рассчитаны сечения и константы скорости различных физически значимых неупругих процессов, необходимые для астрофизических приложений. Следует отметить, что подавляющее большинство парциальных процессов исследовано впервые, что определяет **научную новизну** данного исследования.

**Достоверность и научная обоснованность** представленных результатов подтверждаются анализом их согласия с имеющимися редкими результатами прямых квантовых расчетов. В редких случаях для отдельных исследованных процессов

имеются экспериментальные данные, в частности, для процесса нейтрализации при столкновениях положительных ионов лития с отрицательными ионами дейтерия, при этом полученное согласие экспериментальных и теоретических данных также косвенно подтверждает достоверность полученных результатов и научную обоснованность выводов.

Рецензируемая диссертация Я. В. Воронова написана хорошим языком, имеющиеся опечатки немногочисленны и незначительны. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы (151 источник). Представленные результаты хорошо проиллюстрированы (48 рисунков и 11 таблиц).

Во **введении** обоснованы выбор темы, актуальность исследования, теоретическая и практическая значимость, научная новизна, достоверность и научная обоснованность результатов и выводов диссертации. Там же приведены основные положения, выносимые на защиту и связь проведенного исследования с планом научных работ Российского государственного педагогического университета им. А. И. Герцена.

**Первая глава** диссертации посвящена формализму теории медленных атомных столкновений, в частности, наиболее широко используемого адиабатического подхода Борна-Оппенгеймера, в рамках которого проведено диссертационное исследование. Значительное внимание уделено описанию модели Ландау-Зинера и методов расчёта неадиабатической ядерной динамики, применяемых в последующих главах, построенных на этой модели.

**Вторая глава** содержит описание развитого в диссертации асимптотического многоканального подхода для учета тонкой структуры квазимолекул, образующихся при столкновениях щелочноземельных атомов с водородом, что является обобщением указанного метода, предложенного первоначально для учета тонкой структуры энергетических уровней в столкновениях с водородом щелочных металлов. Получены явные значения коэффициентов, связывающих радиальные матричные элементы неадиабатической связи в представлении LS-связи и JJ-связи. Все выкладки представлены на примере столкновений нейтрального кальция с водородом.

В **главах 3-5** автор приводит результаты, полученные им в рамках данного исследования для столкновений кислорода, кальция и лития с водородом. Автор получил полные вероятности неадиабатических переходов, а также рассчитал сечения и константы скорости неупругих процессов возбуждения, девозбуждения, образования ионных пар и нейтрализации. В качестве решений электронной задачи автор использовал известные из литературы потенциальные энергии столкновительных квазимолекул  $\text{OH}$ ,  $\text{CaH}$ ,  $\text{LiH}$ ,  $\text{CaH}^+$ , полученные надежными квантово-химическими методами, например MRCI. Неадиабатическая ядерная динамика исследовалась методом токов вероятности, а также многоканальной формулой. Автор, где это было возможно, проводил сравнительный анализ полученных им результатов с известными редкими экспериментальными и теоретическими результатами, и получил хорошее для исследуемой предметной области согласие.

К диссертации имеются следующие замечания:

1. В главе 1 при описании метода токов вероятности обойдены вниманием несколько существенных для реализации метода моментов. Во-первых, не

раскрыт вопрос об идентификации и локализации областей неадиабатических переходов между термами. Кроме того, не обсуждается вопрос об учете фазовых факторов, возникающих при неадиабатических переходах.

2. В главе 2 рассмотрен вопрос об учете тонкой структуры в столкновительных процессах. Здесь же было бы уместно привести ссылку на прямое сравнение сечений либо констант скорости, полученных с учетом и без учета тонкой структуры (глава 4).
3. Возможно, несколько большего внимания заслуживает пояснение применимости метода токов вероятности к экзотермическим процессам и необходимости использования уравнения баланса для эндотермических процессов. Трудности, возникающие при исследовании эндотермических процессов с помощью метода токов вероятности, остались не вполне проясненными.
4. Для рассчитанных в диссертации констант скорости проводится сравнение с предсказаниями упрощенной модели, однако описания самой модели в диссертации не приводится. Было бы полезно в теоретической главе привести основные идеи, на которых базируется эта модель.

Отмеченные замечания не снижают высокой оценки диссертации в целом.

Диссертация представляет собой законченное научное исследование, направленное на решение важной и актуальной задачи. Результаты исследования опубликованы в 9 статьях в рецензируемых научных физических журналах: *Physical Review A* (2 статьи), *Monthly Notices of Royal Astronomical Society* (3 статьи), *The Astrophysical Journal* (3 статьи), *Journal of Chemical Physics*, а также докладывались на международных конференциях. Тема исследования соответствует заявленной научной специальности.

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, безусловно, 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, профессор  
кафедры вычислительной физики СПбГУ

дата



В. А. Руднев

22.05.2024