

ОТЗЫВ

члена диссертационного совета Шабаяева Владимира Моисеевича 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 исследованию неупругих процессов возбуждения, тушения и перезарядки, происходящих при столкновениях атомов и ионов кислорода, кальция и лития с атомами и ионами водорода, а также расчётам количественных характеристик этих процессов. Учёт этих столкновительных процессов важен для моделирования плазмы звёздных фотосфер для звёзд спектральных классов F, G, K с низким содержанием металлов, поскольку эти процессы могут значительно влиять на форму спектральных линий поглощения, анализ которых, в свою очередь, позволяет определять количественный состав фотосфер. Это позволяет лучше понять процессы эволюции звёздного вещества, что представляет фундаментальный научный интерес. Расчёт констант скорости указанных неупругих процессов квантовыми методами – единственный надёжный источник этих данных, поскольку экспериментально на сегодняшний день можно получить только данные о столкновениях ионов, но не нейтральных атомов, а широко применяемая астрофизиками для расчёта констант скорости неупругих процессов в столкновениях с водородом формула Дравина даёт весьма ненадёжные данные. Данное диссертационное исследование, целью которого является как раз расчёт констант скорости неупругих процессов в столкновениях с водородом для важных с точки зрения астрофизики элементов, представляет большой интерес. Поэтому **актуальность и значимость** обозначенной темы сомнений не вызывает.

Научная новизна данной диссертационной работы состоит в том, что автор впервые квантовыми методами получил сечения и константы скорости неупругих процессов возбуждения, тушения и перезарядки для столкновений значимых для астрофизических исследований элементов, а именно кислорода, кальция и лития, с водородом, всего для 1432 неупругих процессов. Эти данные уже используются для моделирования спектров кислорода и могут быть использованы в дальнейшем для более точного астрофизического моделирования спектральных линий кислорода, кальция и лития в условиях отклонения от локального термодинамического равновесия, что обуславливает **практическую ценность** исследования.

Обоснованность полученных результатов обусловлена применением надёжных и физически обоснованных методов решения задачи о неадиабатической ядерной динамике. **Достоверность** полученных результатов сомнений не вызывает. Необходимо отметить, что **личный вклад** Воронова Я. В. в исследованиях, отражённых в диссертации, был определяющим.

Диссертация состоит из введения, пяти содержательных глав, заключения, списка литературы (151 наименование), включает 48 рисунков и 11 таблиц.

Во **введении** обосновывается актуальность работы, обозначены объект и предмет исследования, сформулированы цель и задачи исследования, положения, выносимые на защиту, обозначены научная новизна, теоретическая и практическая значимости результатов, достоверность и обоснованность выводов, указан личный вклад автора.

В **первой главе** автор описывает теоретические методы исследования медленных атомных столкновений. Довольно подробно описан стандартный адиабатический подход Борна-Оппенгеймера, в рамках которого задача об атомных столкновениях разделяется на два этапа: 1) электронная задача; 2) неадиабатическая ядерная динамика. Автор описывает методы решения обоих этапов, рассматривая как квантовые методы из первых принципов, так и ряд модельных методов.

Во **второй главе** автор описывает метод учёта тонкой структуры энергетических уровней в столкновениях с водородом атомов и ионов с двумя валентными электронами на примере столкновений кальция с водородом. Эти результаты являются развитием предложенного ранее метода учёта тонкой структуры энергетических уровней для атомов и ионов с одним валентным электроном в столкновениях с водородом.

В **главах 3-5** автор рассматривает неупругие процессы, происходящие при столкновениях кислорода, кальция и лития с водородом соответственно. Неадиабатическая ядерная динамика исследована автором различными модельными методами, в основе которых лежит модель Ландау-Зинера. Автор получил полные вероятности неадиабатических переходов суммарно для 1432 процессов возбуждения, тушения и перезарядки. Автором рассчитаны сечения и константы скорости этих процессов, проведён анализ и сравнение полученных результатов с известными в литературе данными, полученными другими квантовыми методами. Показано хорошее согласие результатов, полученных автором в данной работе, с результатами других исследовательских коллективов, полученных в том числе наиболее точным квантовым методом перепроецирования. Также для столкновений лития с водородом проведено сравнение с известными экспериментальными данными и показано достаточно хорошее для дальнейшего использования в астрофизических приложениях согласие теории и эксперимента.

В **заключении** сформулированы основные результаты данного диссертационного исследования.

К представленной работе, тем не менее, можно сделать следующие замечания:

- 1) В параграфе 1.2 автор пишет, что точное аналитическое решение в квантовой механике имеют только задача о квантовом гармоническом осцилляторе и об атоме водорода, что, конечно же, не совсем корректно. В литературе, в том числе учебной, известно множество задач квантовой механики, имеющих аналитическое решение из первых принципов.
- 2) В четвёртой и пятой главах автор делает вывод о том, что метод токов вероятности обладает достаточно хорошей точностью на основании сравнения величин сечений и констант скорости, полученных методом токов вероятности и квантовым методом

перепроецирования. Столь глобальные выводы не представляются в полной мере убедительными, т.к. сравнения на двух наборах данных недостаточно для выводов о точности метода в общем случае.

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. Основные результаты диссертации опубликованы в 9 статьях в ведущих международных высокорейтинговых рецензируемых научных журналах, таких как Physical Review A, Monthly Notices of the Royal Astronomical Society, Astrophysical Journal, Journal of Chemical Physics, которые индексируются базами данных Web of Science, Scopus. Полученные результаты были также представлены автором на международных конференциях и профильных семинарах по теоретической физике.

Диссертация 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

д. ф.-м. н., профессор, профессор СПбГУ

Шабает Владимир Моисеевич

14.05.2024



14.05.2024