

ОТЗЫВ

председателя диссертационного совета Яковлева Сергея Леонидовича 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

Теоретические расчёты на сегодняшний день являются практически единственным источником атомных данных о низкоэнергетических неупругих столкновениях различных атомов и ионов друг с другом. Несмотря на то, что в последние годы имеется заметный прогресс в экспериментальном исследовании столкновений разноимённо заряженных ионов при энергиях порядка сотых и десятых долей эВ, столкновения нейтральных атомов всё ещё остаются за границей современных экспериментальных методов. В то же время для моделирования спектров относительно холодных звёзд атомные данные о столкновениях с водородом могут быть крайне важны для более корректного определения количественного содержания того или иного элемента в звезде, что в свою очередь позволит лучше понимать эволюцию звёздного вещества. Диссертация Я. В. Воронова посвящена теоретическим расчётам сечений и констант скорости неупругих процессов, происходящих при столкновениях атомов и ионов химических элементов, важных с точки зрения астрофизического моделирования, а именно кислорода, кальция и лития, с водородом. В этой связи **актуальность и значимость** темы диссертационной работы сомнений не вызывает.

Научная новизна и практическая значимость диссертационного исследования состоит в том, что автором впервые надёжными квантовыми методами рассчитаны сечения и константы скорости неупругих процессов возбуждения, девозбуждения, перезарядки для столкновений кислорода, кальция и лития с водородом. Эти данные необходимы для моделирования спектров звёзд с температурами фотосфер от одной тысячи кельвинов до десяти тысяч кельвинов.

Обоснованность полученных результатов определяется использованием надёжных квантовых методов для исследования ядерной динамики, а также непротиворечивостью логических построений и согласием с имеющимися экспериментальными данными, там, где они доступны. **Достоверность** полученных результатов сомнений не вызывает. **Личный вклад** Воронова Я. В. в исследованиях, отражённых в диссертации, является определяющим.

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

Во **Введении** автор обосновывает актуальность работы, формулирует цель и задачи диссертационного исследования, положения, выносимые на защиту, теоретическую и практическую значимости полученных им результатов, научную новизну, достоверность и

обоснованность выводов, а также указывает личный вклад в получение результатов диссертационного исследования.

В **первой главе** диссертации описаны теоретические методы исследования неупругих процессов, происходящих при медленных атомных столкновениях. Описан стандартный подход Борна-Оппенгеймера и методы решения электронной задачи при фиксированных ядрах и задачи неадиабатической ядерной динамики. Приведён обзор как строгих методов из первых принципов, так и модельных методов. Большое внимание автор уделяет модели Ландау-Зинера и базирующимся на ней методам исследования неадиабатической ядерной динамики.

Во **второй главе** представлен вывод метода учёта тонкого структуры квазимолекул, образующихся в процессе столкновений атомов и ионов с двумя валентными электронами с водородом. Указанный метод является развитием метода учёта тонкого расщепления в асимптотической модели построения молекулярных термов при столкновениях водорода с атомами и ионами, имеющими один валентный электрон. Вывод полученных результатов, а именно, коэффициентов связи радиальных матричных элементов в представлениях LS-связи и JJ-связи, довольно подробно расписаны на примере столкновений нейтрального кальция с водородом.

В **главах 3-5** автор приводит результаты исследования неупругих процессов возбуждения, девозбуждения и перезарядки, происходящих при столкновениях кислорода, кальция и лития с водородом соответственно. Для исследования неадиабатической ядерной динамики диссертантом были использованы потенциальные энергии квазимолекул OH, CaH, LiH и квазимолекулярного иона CaH⁺, полученные квантово-химическими методами из первых принципов (например, методами MRCI и full CI для валентных электронов с использованием псевдопотенциала остова). В этих главах анализируются как полные вероятности неадиабатических переходов, так и сечения и константы скорости, характеризующие эти процессы. Суммарно автором исследовано 1432 процесса, для каждого из которых получены сечения и константы скорости. Довольно подробно автор анализирует некоторые процессы, важные с точки зрения астрофизических исследований, например, резонансный процесс $\text{Li}(2p) + \text{H} \rightarrow \text{Li}(2s) + \text{H}$. Заметим, что для столкновений лития с водородом Воронов Я. В. проанализировал изотопический эффект на сечения и константы скорости, и, в частности, получил, что при низких энергиях столкновений для указанного резонансного процесса существенное влияние (вплоть до четырёх порядков) на величины сечений оказывает замена лёгкого водорода на тяжёлые дейтерий и тритий, в то время как замена изотопов лития ${}^6\text{Li} \leftrightarrow {}^7\text{Li}$ оказывает значительно меньшее влияние на величины сечений и констант скорости. Также автор уделил внимание сравнениям полученных им результатов с данными, полученными другими исследовательскими группами различными теоретическими и экспериментальными методами. Так, например, для столкновений $\text{Li}^+ + \text{H}^-$ при энергиях столкновения порядка сотых и десятых долей эВ автор получил хорошее согласие своих данных с малочисленными известными экспериментальными данными. Для системы CaH также имеется хорошее согласие рассчитанных им квантовыми модельными методами констант скорости с результатами применения наиболее точного квантового метода перепроецирования, полученных позднее. В целом, автор провёл большой анализ полученных в данном диссертационном

исследовании результатов, и смог выявить некоторые важные закономерности, которые были вынесены автором в защищаемые положения.

В **Заключении** автор формулирует основные результаты диссертационного исследования.

Диссертационная работа всё же не лишена недостатков.

1. В параграфе 1.2 для решения стационарного уравнения Шрёдингера, описывающего процесс столкновений, соискатель использует разложение полной волновой функции по парциальным волнам, при этом разложение проводит по собственным функциям полного углового момента, формула (1.5). Альтернативно, можно было бы использовать разложение по собственным функциям орбитального момента ядер. Учитывая, что в дальнейшем рассматривается оператор кинетической энергии движения ядер (1.11), то следовало бы пояснить сделанный выбор в тексте диссертации.
2. В диссертации в основном рассматривается ядерная динамика для молекулярных состояний Сигма, хотя у рассматриваемых молекул имеются и другие молекулярные состояния. Остается открытым вопрос о погрешности в связи с отбрасыванием других состояний квазимолекул.

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, индексируемых базами данных Web of Science, Scopus, представлены на ряде международных конференций и профильных семинарах.

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.

Председатель диссертационного совета

доктор физико-математических наук,
профессор кафедры вычислительной
физики СПбГУ

С. Л. Яковлев

20.05.2024

