

**«УТВЕРЖДАЮ»**

Проректор по научной работе  
Санкт-Петербургского  
Государственного Университета

профессор С.П. Туник



«01» 06 2015 г.

## **ОТЗЫВ ВЕДУЩЕЙ ОРГАНИЗАЦИИ**

на диссертацию **Яковлевой Светланы Анатольевны**

**«Модельные подходы в исследованиях неупругих процессов**

**при медленных атомных столкновениях»,**

представленную на соискание ученой степени кандидата

физико-математических наук по специальности

01.04.02 – теоретическая физика

Кандидатская диссертация С.А. Яковлевой посвящена развитию и применению модельных подходов для исследований неупругих процессов, происходящих при медленных столкновениях различных атомов и ионов. Конечной целью исследований является расчет атомных и молекулярных данных, таких как сечения и константы скоростей неупругих столкновительных процессов, знание которых необходимо для моделирования атмосфер звезд в условиях отклонения от локального термодинамического равновесия, для определения относительных и абсолютных распространенностей химических элементов, понимания многих явлений в межзвездной среде и других фундаментальных аспектов современной физики. В диссертации исследованы два класса неупругих процессов. (1) Процессы столкновений атомов различных химических элементов и их положительных ионов с атомами и отрицательными ионами водорода, в частности, процессы возбуждения, девозбуждения, образования ионных пар и взаимной нейтрализации. Указанные процессы важны для моделирования фотосфер звезд в условиях отклонения от локального термодинамического равновесия. (2) Процессы, представляющие интерес для исследований межзвездной среды и Бозе-Эйнштейновских конденсатов. В первую очередь указанными процессами являются процессы перезарядки,

происходящие при медленных, а также холодных и ультрахолодных столкновениях.

Следует отметить, что для многих практически важных приложений необходимо знание сечений и констант скоростей большого числа (порядка тысяч) парциальных процессов, что делает проблематичным использование подходов *ab initio*. Поэтому развитие и применение модельных подходов для расчетов сечений и констант скоростей **является актуальным**.

В представленной кандидатской диссертации С.А. Яковлевой на основе модельных подходов исследован ряд физически значимых процессов, происходящих при медленных столкновениях атомов и ионов, таких как возбуждение, девозбуждение, образование ионной пары, взаимная нейтрализация, перезарядка. Современное состояние рассматриваемой проблемы указывает на необходимость проведения систематических надежных расчетов сечений ряда неупругих процессов, представляющих интерес в различных аспектах физики, в частности, для моделирования атмосфер звезд и межзвездной среды и для изучения свойств ультрахолодных сред, что определяет **научную новизну данного исследования**.

В общем случае сечения неупругих процессов при атомных и ион-атомных столкновениях, можно определить как экспериментальными, так и теоретическими методами. Однако экспериментальные данные для многих практически важных парциальных процессов отсутствуют, что связано со сложностью создания и регистрации пучков нейтральных атомов, в связи с чем теоретические исследования являются практически единственным источником информации. **Теоретическая значимость** исследовательской работы С.А. Яковлевой заключается в развитии и применении различных модельных подходов для расчетов сечений неупругих процессов, происходящих при низкоэнергетических столкновениях.

**Практическая значимость исследования обоснована** тем, что рассчитаны сечения и константы скоростей различных неупругих процессов, происходящих при медленных столкновениях атомов и положительных ионов магния и кремния с атомами и отрицательными ионами водорода, необходимые для моделирования фотосфер звезд в условиях отклонения от локального термодинамического равновесия. Рассчитанные константы скоростей процессов перезарядки при столкновениях атомов кремния с положительными ионами гелия уже использованы при моделировании уменьшения заселенности кремния в межзвездной среде.

Кандидатская диссертация С.А. Яковлевой состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы.

**Во «Введении»** обоснованы выбор темы, а также обоснованы актуальность исследования, практическая и теоретическая значимость, научная новизна, основные положения, выносимые на защиту, достоверность и научная обоснованность результатов и выводов диссертации. Отмечена связь темы диссертации с планом научных работ Российского

государственного педагогического университета им. А.И. Герцена, в котором проходила обучение и работает С.А. Яковлева.

**В первой главе** описан стандартный адиабатический подход Борна-Оппенгеймера, в рамках которого проводится исследование неупругих процессов, происходящих при медленных атомных столкновениях, а также различные приближенные подходы, используемые для исследования ядерной динамики, такие как теория возмущений и модель Ландау-Зинера.

**Во второй главе** развит модельный многоканальный подход для расчетов вероятностей неадиабатических переходов, происходящих при столкновениях атомов и положительных ионов различных химических элементов с атомами и отрицательными ионами водорода. Данный подход объединяет в себе асимптотический метод для расчетов электронной структуры и многоканальную модель Ландау-Зинера для исследования неадиабатической ядерной динамики, обобщенную на случай осцилляций токов вероятностей в закрытом канале. Развитый подход использован для расчетов сечений и констант скоростей неупругих процессов при столкновениях атомов и ионов магния с атомами и ионами водорода, системы, частично ранее исследованной точными квантовыми методами. Показано, что константы скоростей процессов, которые имеют наибольшее значение для астрофизических приложений, хорошо согласуются с результатами имеющихся квантовых расчетов. С другой стороны развитый модельный многоканальный подход позволяет рассчитать сечения и константы скоростей для большего числа каналов, чем строгие квантовые расчеты по методу сильной связи, что и продемонстрировано во второй главе на примере столкновений магния с водородом.

**В третьей главе** развитый многоканальный подход применен для расчетов сечений и констант скоростей неупругих процессов, происходящих при столкновениях атомов и ионов кремния с атомами и ионами водорода. Необходимо отметить, что для столкновений кремния с водородом расчеты проведены для 702(!) парциальных неупругих процессов, причем для исследований подавляющего большинства процессов учтены неадиабатические переходы, имеющие место в Сигма и Пи молекулярных симметриях. Расчеты сечений и констант скоростей для такого большого числа парциальных процессов позволили выделить процессы, которые наиболее важны для астрофизических приложений. Также в рамках модельного подхода проведены расчеты сечений и констант скоростей процесса перезарядки при столкновениях атомов кремния с положительными ионами гелия.

**В четвертой главе** описано применение теории возмущений для расчета сечений процессов перезарядки, происходящих при столкновениях положительных ионов кальция и иттербия с атомами рубидия. Показано, что для процесса перезарядки ионов кальция на атомах рубидия при сверхнизких энергиях столкновений нарушается закон Вигнера. В случае столкновений ионов иттербия с атомами рубидия проведено сравнение сечений

радиационной и безызлучательной перезарядки. Показано, что при низких энергиях столкновений радиационная перезарядка доминирует над безызлучательной.

При несомненной общей высокой положительной оценке диссертационной работы необходимо сделать следующие замечания:

1. При расчетах вероятностей неадиабатических переходов в многоканальном случае используется подход Демкова-Ошерова для изолированных областей неадиабатичности, при этом в диссертации не проведен анализ ширин областей неадиабатичности.
2. Вопрос об учете многократных отражений в закрытом канале рассматривался и в работе А.З. Девдариани, А.Л. Загребина ЖЭТФ 86 1969 (1984), было бы интересно сравнить результаты обоих подходов.
3. К сожалению, приходится отметить характерное для аспирантов небрежное отношение к научному языку (новый оценочный термин «маленький» встречается на с.17, 29, 77, «упругие волновые функции» на с.71, 77, «притягивательный терм», с.75).

Отмеченные замечания не снижают высокой оценки диссертации.

Диссертация представляет собой законченное научное исследование, направленное на решение важной и актуальной задачи. Результаты исследования отражены в 6 публикациях в профильных рецензируемых журналах, докладывались на всероссийских и международных конференциях. Несомненным достоинством диссертационного исследования являются публикации в ведущих международных рецензируемых физических журналах, таких как *Physical Review A* (2 статьи), *Astronomy & Astrophysics*, *Monthly Notices of Royal Astronomical Society*, *Journal of Physics: Conference Series*. Автореферат правильно отражает основное содержание диссертации. Тема исследования соответствует заявленной научной специальности. Полученные лично автором сечения и константы скоростей неупругих процессов, происходящих при столкновениях кремния и водорода, кремния и гелия, кальция и рубидия, иттербия и рубидия, являются **новыми**. **Достоверность полученных результатов** обеспечивается четкой формулировкой поставленных задач, использованием физически правильных модельных подходов, апробированных на исследованных ранее точными методами столкновительных системах, и согласием рассчитанных констант скорости с имеющимися результатами экспериментальных исследований.

Результаты исследования могут быть использованы в научной работе профильных учреждений, таких как: Санкт-Петербургский государственный университет, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Институт химической физики им. Н.Н.Семенова Российской академии наук, Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова, Институт проблем химической физики Российской академии

наук, Институт астрономии Российской академии наук, Физико-технический институт имени А.Ф.Иоффе Российской академии наук, Воронежский государственный университет.

Оценивая работу в целом можно заключить, что диссертация С.А. Яковлевой «Модельные подходы в исследованиях неупругих процессов при медленных атомных столкновениях» представляет собой законченную научно-квалификационную работу, которая соответствует всем требованиям и критериям, предъявленным к диссертационным работам на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук, установленным в пункте 9 «Положения о порядке присуждения ученых степеней», утвержденным постановлением Правительством Российской Федерации от 24 сентября 2013 г. № 842, а автор, Яковлева Светлана Анатольевна, заслуживает присуждения искомой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика.

Отзыв обсужден и одобрен на научном семинаре кафедры оптики СПбГУ, протокол № 25 от 15 мая 2015 г.

Отзыв составил доктор физ.-мат. наук,  
профессор, зав. кафедрой оптики



Н.А. Тимофеев

Сведения о ведущей организации:

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Санкт-Петербургский государственный университет»,  
199034, г. Санкт-Петербург, Университетская наб. д.7-9  
Телефон: +7 (812) 328-20-00  
e-mail: spbu@spbu.ru

*Н.А. Тимофеев*  
*20.05.15* 5