



Студенттер мен жас ғалымдардың
«ҒЫЛЫМ ЖӘНЕ БІЛІМ - 2018»
XIII Халықаралық ғылыми конференциясы

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ

XIII Международная научная конференция
студентов и молодых ученых
«НАУКА И ОБРАЗОВАНИЕ - 2018»

The XIII International Scientific Conference
for Students and Young Scientists
«SCIENCE AND EDUCATION - 2018»



12th April 2018, Astana

**ҚАЗАҚСТАН РЕСПУБЛИКАСЫ БІЛІМ ЖӘНЕ ҒЫЛЫМ МИНИСТРЛІГІ
Л.Н. ГУМИЛЕВ АТЫНДАҒЫ ЕУРАЗИЯ ҰЛТТЫҚ УНИВЕРСИТЕТІ**

**Студенттер мен жас ғалымдардың
«Ғылым және білім - 2018»
атты XIII Халықаралық ғылыми конференциясының
БАЯНДАМАЛАР ЖИНАҒЫ**

**СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ
XIII Международной научной конференции
студентов и молодых ученых
«Наука и образование - 2018»**

**PROCEEDINGS
of the XIII International Scientific Conference
for students and young scholars
«Science and education - 2018»**

2018 жыл 12 сәуір

Астана

УДК 378

ББК 74.58

Ғ 96

Ғ 96

«Ғылым және білім – 2018» атты студенттер мен жас ғалымдардың XIII Халықаралық ғылыми конференциясы = XIII Международная научная конференция студентов и молодых ученых «Наука и образование - 2018» = The XIII International Scientific Conference for students and young scholars «Science and education - 2018». – Астана: <http://www.enu.kz/ru/nauka/nauka-i-obrazovanie/>, 2018. – 7513 стр. (қазақша, орысша, ағылшынша).

ISBN 978-9965-31-997-6

Жинаққа студенттердің, магистранттардың, докторанттардың және жас ғалымдардың жаратылыстану-техникалық және гуманитарлық ғылымдардың өзекті мәселелері бойынша баяндамалары енгізілген.

The proceedings are the papers of students, undergraduates, doctoral students and young researchers on topical issues of natural and technical sciences and humanities.

В сборник вошли доклады студентов, магистрантов, докторантов и молодых ученых по актуальным вопросам естественно-технических и гуманитарных наук.

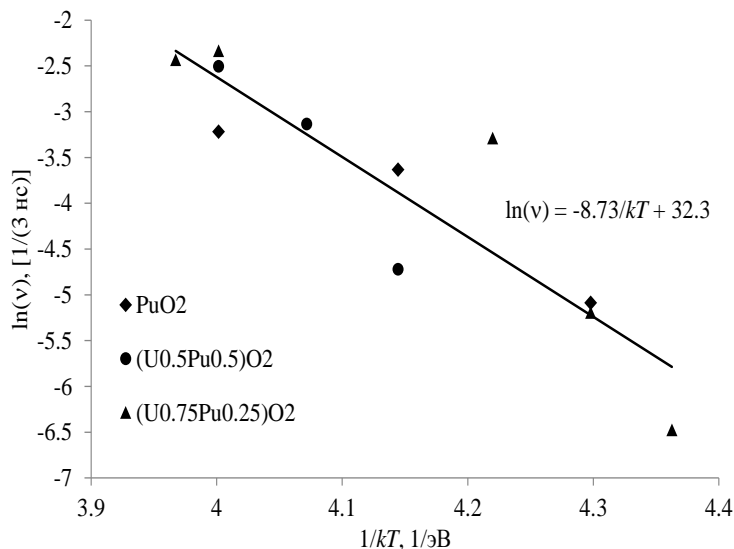
УДК 378

ББК 74.58

ISBN 978-9965-31-997-6

©Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия
ұлттық университеті, 2018

Отметим, что статический расчёт энергии образования дефекта Шоттки в кристалле UO_2 для потенциалов МОХ-07 даёт значение 9.8 эВ [6], тогда как экспериментальная рекомендация составляет (6.5 ± 0.5) эВ [1]. Результат настоящей работы не противоречит статическому расчёту, однако завышен по сравнению с экспериментом (что характерно практически для всех расчётных работ, см. обзор в [6]).



Заключение

Реализованная в работе методика обнаружения вакансий при длительном молекулярно-динамическом моделировании позволила определить частоты появления катионных вакансий в объёме нанокристаллов $(\text{U,Pu})\text{O}_2$ при температурах от 2660 до 2950 К, а также подтвердить вакансионный механизм диффузии объёмных катионов. Полученная из температурной зависимости частот оценка энергии образования дефекта Шоттки составила $E_{\text{Sh}}=(9\pm 1)$ эВ.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта №16-52-48008 ИНД_оми.

Список использованных источников

1. Matzke H.J. Atomic Transport Properties in UO_2 and Mixed Oxides $(\text{U,Pu})\text{O}_2$ // J. Chem. Soc. Farad. Trans, 1987.– V. 2 (83).– P. 1121–42.
2. Sabioni A.C.S. Ferra W.B., Millot F. First study of uranium self-diffusion in UO_2 by SIMS // J. Nucl. Mater, 1998.– V. 257.– P. 180–184.
3. Поташников С.И., Боярченко А.С., Некрасов К.А., Купряжкин А.Я. Молекулярно-динамическое восстановление межчастичных потенциалов в диоксиде урана по тепловому расширению // Альтернативная энергетика и экология, 2007.– № 8.– С. 43–52.
4. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц, Мир (1987).
5. Nelder J.A., Mead R. A Simplex Method for Function Minimization // Computer Journal, 1965.– V. 7.– P. 308–313.
6. Boyarchenkov A.S., Potashnikov S.I., Nekrasov K.A., Kupryazhkin A.Ya. Investigation of cation self-diffusion mechanisms in $\text{UO}_{2\pm x}$ using molecular dynamics // J. Nucl. Mater, 2013.– V. 442.– P. 148–161.

УДК 539.171

ЗАДАЧА РАССЕЯНИЯ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ В КОМПЛЕКСНОМ ГАУССОВОМ БАЗИСЕ

Сайлаубек Дінмұхамед Ахмет-Кәрімұлы

Преподаватель Международной кафедры ядерной физики,
новых материалов и технологий ЕНУ им. Л. Н. Гумилева, Астана, Казахстан
Научные руководители – В. И. Кукулин, О. А. Рубцова
НИИ ядерной физики им. Д. В. Скобельцына, МГУ, Москва, Россия

I. Введение

Существенная часть реакций и процессов в молекулярной, атомной и ядерной физике происходит при участии заряженных частиц. Однако теоретическое описание таких задач является более сложным, чем описание рассеяния нейтральных частиц из-за присутствия дальнедействующего кулоновского взаимодействия, приводящего к наличию других граничных условий [1]. В случае нескольких заряженных частиц задачу рассеяния в целом можно считать еще нерешенной, несмотря на то, что до настоящего времени был разработан формализм Меркурьева-Фаддеева [2]. Он редко используется в практических расчетах.

В то же время существует множество приближенных методов решения подобных задач. Среди них можно выделить наиболее часто используемый метод экранировки, который позволяет использовать обычные фаддеевские подходы [3,4], а также различные методы, основанные на разложении волновых функций рассеяния по L_2 -базисам (L_2 -дискретизация) [5]. Не так давно авторы данной работы предложили формализм стационарных волновых пакетов, позволяющий формулировать задачи рассеяния на основе дискретизации континуума в терминах нормированных состояний в континууме [8,9]. Для рассеяния заряженных частиц был предложен специальный формализм кулоновских волновых пакетов [8]. Следует отметить, что ортонормированные состояния континуума использовались для постановки задач рассеяния еще в ранних работах по квантовой механике. В частности, описание таких состояний для задачи кулоновского рассеяния можно найти в первом издании справочника Бете [10].

Одним из основных преимуществ формализма кулоновских волновых пакетов является возможность изменять сетку дискретизации под потребности рассматриваемой задачи, в частности, можно делать ее более плотной в интересующей области энергий и импульсов. В последнее время прямое использование базиса кулоновских волновых пакетов позволило воспроизвести низкоэнергетическое поведение сечения антипротонной ударной ионизации атома водорода [6], в то время как традиционный здесь базис лагранжевских полиномов не позволял продвинуться в область низких энергий.

В настоящей работе мы предлагаем специальное удобное представление для кулоновских волновых пакетов – так называемый комплексный гауссовый базис (CRGB – complex-range Gaussian basis) [11-13]. Функции такого базиса вещественные, однако они строятся из двух наборов гауссиан с комплексно-сопряженными параметрами. В результате функции такого базиса сильно осциллируют и позволяют воспроизвести волновые функции высоковозбужденных состояний, а также состояний континуума. Использование такого базиса в задаче нескольких тел позволило бы существенно упростить расчеты, поскольку матричные элементы оператора перестановок вычисляются в таком базисе аналитически.

CRGB уже успешно применялся для описания высоковозбужденных связанных состояний [11], для резонансных состояний трех тел в тройной альфа-системе [12], а также для промежуточных дискретизованных состояний континуума [13]. Таким образом, можно ожидать, что применение такого базиса в задачах рассеяния нескольких тел приведет к достаточному упрощению практических расчетов.

В качестве метода решения задачи рассеяния в этой работе мы будем использовать технику диагонализации матрицы полного гамильтониана и спектральное разложение для полной резольвенты [9, 14], которые мы обобщим здесь для случая учета кулоновского взаимодействия.

Структура работы следующая. В разделе II исследуются свойства комплексных гауссоид. В разделе III приводится заключение к работе.

II. Комплексный гауссовый базис

A. Определение и основные свойства

В работах [11-13] была предложена модификация гауссова базиса введением дополнительного осциллирующего множителя. Этот базис называют комплексным гауссовым базисом (CRGB – complex-range Gaussian basis). Этот базис ранее успешно применялся для аппроксимации сильно осциллирующих высоковозбужденных волновых функций электрона в атоме водорода, а также для состояний дискретизованного континуума в подходе CDCC.

Функции CRGB строятся из набора гауссианов с *комплексными параметрами*:

$$\psi_{nl}(r) = r^l e^{-(1+ib)\alpha_n r^2}, \quad n=1, 2, \dots, N,$$

где b и α_n – свободные параметры. Комбинируя комплексные гауссианы с их комплексным сопряжением, можно построить вещественные базисные функции в виде:

$$\varphi_{nl}(r) \equiv N_{nl} \frac{1}{2} [\psi_{nl}^*(r) + \psi_{nl}(r)] = N_{nl} r^l e^{-\alpha_n r^2} \cos(b\alpha_n r^2), \quad (1)$$

где N_{nl} – нормировочный множитель:

$$N_{nl} = \frac{2 \left[\left(2\alpha_n \sqrt{1+b^2} \right)^{l+3/2} / \Gamma(l+3/2) \right]}{\left[\left(\sqrt{1+b^2} \right)^{l+3/2} + \cos \left[(l+3/2) \arctan b \right] \right]^{1/2}}.$$

Масштабные параметры α_n можно определить, например, с помощью квадратурной сетки Чебышева [9]:

$$\alpha_n = \alpha_0 \left[\tan \left(\frac{2n-1}{4N} \pi \right) \right]^t, \quad (2)$$

где α_0, t – свободные параметры.

Оценим, какими должны быть значения параметра b , исходя из того условия, чтобы поведение каждой базисной функции исходного гауссова базиса не сильно менялась на ее характерном радиальном масштабе за счет осциллирующего множителя при построении функции $\varphi_{nl}(r)$ комплексного базиса. Характерный радиальный масштаб каждой гауссовой функции определяется как $r_0 = 1/\alpha_n$ при $l=0$ и $r_l = \sqrt{2l/\alpha_n}$ при $l \neq 0$. В то же время первый нуль функции $\varphi_{nl}(r)$ расположен на расстоянии $R = \sqrt{\pi/(2b\alpha_n)}$. Приравнивая $R = r_l$, получаем предельные значения для параметра b :

$$b_0 \geq \frac{\pi}{2}, \quad b_l \geq \frac{\pi}{4l},$$

ниже которых влияние осциллирующих множителей на исходные гауссианы будет очень слабым. При увеличении b выше указанных предельных значений функций комплексного базиса будут все более заметно отличаться от чистых гауссиан.

Для наглядности на Рис. 1 приведены волновые функции CRGB

$$\varphi_l(r) = r^l e^{-\alpha r^2} \cos(b\alpha r^2)$$

в сравнении с исходными функциями вещественного гауссова базиса ($b=0$) при разных значениях b для разных парциальных волн.

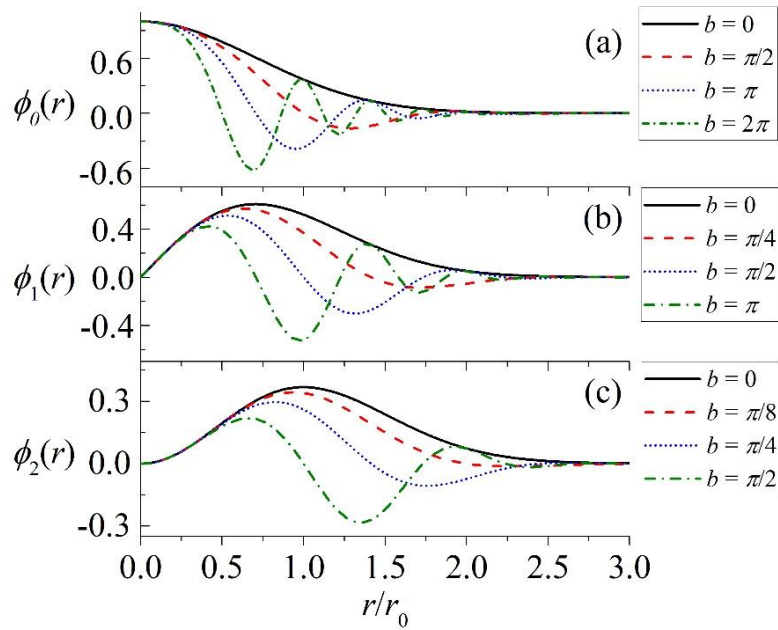


Рисунок 1-: Функции комплексного гауссова базиса при разных значениях параметра b в сравнении с функциями гауссова базиса ($b = 0$) для различных парциальных волн: $l = 0$ (а),

$l = 1$ (б) и $l = 2$ (с): $r_0 = 1/\sqrt{\alpha}$ – характерный масштаб гауссовых функций.

Одной из особенностей гауссова базиса является то, что его функции не ортогональны друг другу. Это приводит к тому, что численно они перестают быть линейно-независимыми при достаточно малой размерности N . Базис же комплексных гауссоид, благодаря наличию дополнительного осциллирующего множителя, оказывается гораздо меньше “перекрытым”. Таким образом, размерность базиса N может быть взята достаточно большой, чтобы аппроксимировать волновые пакеты в широком диапазоне энергий.

В. Псевдосостояния как приближение для волновых пакетов

В работах [8, 9] было показано, что дискретные псевдосостояния, представляющие собой собственные состояния матрицы гамильтониана в некотором L_2 -базисе, являются хорошим приближением для волновых пакетов. В частности, псевдосостояния будут практически совпадать с волновыми пакетами в ограниченной области $r < r_{\max}$, граница которой определяется параметрами базисных функций. Кроме того, функции из этих двух наборов нормализованы и матрицы гамильтониана в обоих наборах являются диагональными. В данной работе в качестве L_2 -базиса рассматриваются гауссов базис и комплексный гауссов базис.

Таким образом, мы строим волновые пакеты, отвечающие как кулоновскому гамильтониану, так и полному, на основе диагонализации матриц этих гамильтонианов в вещественном и комплексном гауссовых базисах.

На Рис. 2 показано сравнение координатного поведения точных кулоновских волновых пакетов и соответствующих псевдосостояний, построенных в гауссовом базисе с параметрами $\alpha_0 = 0.01 \text{ fm}^{-2}$, $N = 50$, $t = 4$ (а и с) и комплексном гауссовом базисе с параметрами $\alpha_0 = 0.01 \text{ fm}^{-2}$, $N = 100$, $t = 4$ (б и д).

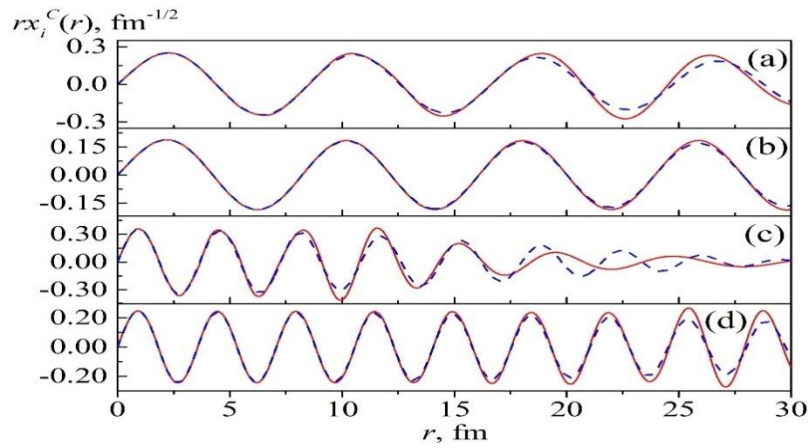


Рисунок 2- Координатное поведение точных КВП (сплошные линии) и их аппроксимаций (пунктирные линии) в гауссовом базисе (а и с) и комплексном гауссовом базисе (b и d) для разных энергетических интервалов: $\varepsilon_k^* = 9.5$ МэВ (a); $\varepsilon_k^* = 10.15$ МэВ (b); $\varepsilon_k^* = 48.12$ МэВ (c); $\varepsilon_k^* = 50.6$ МэВ (d).

Как видно из рисунка, совпадение очень хорошее. Малое различие в величинах максимумов между точными волновыми пакетами и соответствующими псевдосостояниями объясняется тем, что точные ВП, нормированные на единицу, убывают степенным образом с увеличением r , тогда как псевдосостояния, которые также нормированы на единицу, спадают к нулю экспоненциально. Поэтому амплитуда осцилляций для точных ВП будет всегда несколько выше, чем соответствующая амплитуда для более быстро убывающих функций псевдосостояний. Но если это различие проявляется вне области действия короткодействующего ядерного потенциала, то оно не должно играть никакой роли.

Вместе с тем, функции комплексного гауссова базиса позволяют аппроксимировать точные кулоновские волновые пакеты на более широком интервале (т.е. для больших значений r_{\max}). Таким образом, с помощью псевдосостояний, построенных с использованием комплексного гауссова базиса, можно получить лучшее приближение для волновых пакетов, чем с псевдосостояниями, полученными в гауссовом базисе.

Таким образом, совпадение псевдосостояний с ВП позволяет строить конечномерные аппроксимации для оператора рассеяния и операторов резольвент. Поэтому для построения ВП с использованием гауссова базиса (вещественного или комплексного) в задаче рассеяния нескольких частиц матричные элементы многочастичного оператора рассеяния могут быть вычислены аналитически с использованием известных формул преобразования к другим наборам координат Якоби. Стоит отметить, что в других известных методах решения задач рассеяния заряженных частиц в дискретном базисе в основном используется специальный L_2 -базис, построенный из функций Штурма-Кулона [5], который в задаче нескольких частиц имеет более сложное преобразование к другим наборам координат Якоби, чем квадратичный гауссов базис.

III. Заключение

В данной работе представлен новый подход к вычислениям квантового рассеяния с дальнедействующим кулоновским взаимодействием и короткодействующей ядерной силой. Данный подход сочетает в себе очень удобный и универсальный комплексный гауссовый базис и метод диагонализации гамильтониана с использованием дискретных состояний в континууме для построения off- и on-shell t -матрицы.

В качестве иллюстрации были вычислены парциальные фазовые сдвиги упругого рассеяния в системах $N-\alpha$ и $d-\alpha$, которые хорошо согласуются с результатами других подходов и с экспериментальными данными. Было показано, что CRGB превосходит обычный вещественный гауссовый базис в нескольких ключевых аспектах:

- i. базисные функции CRGB гораздо меньше перекрываются друг с другом, чем вещественные гауссианы, так что расчеты с этими функциями более устойчивы;
- ii. благодаря этому свойству можно увеличить размерность базиса без потери численной устойчивости и, следовательно, получить более высокую точность результатов;
- iii. за счет дополнительной осцилляции комплексных гауссиан можно описать точные волновые функции рассеяния на больших расстояниях и более высоких энергиях, чем вещественными гауссианами.

Разработанная методика, применяемая на рассеяние нескольких тел, может привести к некоторым дополнительным важным признакам, таким как полностью аналитическая форма для всех матричных элементов полного гамильтониана и удобный способ преобразований между различными наборами координат, например, между координатами Якоби при различных перестановках частиц и т. д.

Таким образом, все эти особенности могут сделать сложные вычисления рассеяния нескольких и многих тел не более сложными, чем аналогичные вычисления связанного состояния, поскольку мы применяем тот же метод (диагонализация гамильтониана в конечном гауссовом базисе) для обоих типов квантовых расчетов.

Список использованных источников

1. Newton R.G., *Scattering theory of waves and particles*, Mc Grow-Hill, New-York, 1966.
2. Merkuriev S.P., *Annals of Physics* **130**, 395 1980.
3. Alt E.O., Mukhamedzhanov A. M., Nishonov M. M. and Sattarov A. I., *Phys. Rev. C* **65**, 064613 2002.
4. Deltuva A., *Phys. Rev. C* **88**, 011601 (R) 2013.
5. Papp Z., Hu C.-Y., Hlousek Z.T., K'onya B., Yakovlev S.L., *Phys. Rev. A* **63** 2001, 062721; P. Doleschall, Z. Papp, *Phys. Rev. C* **72** 2005, 044003.
6. Abdurakhmanov I. B., Kadyrov A. S., Bray I., *Phys. Rev. A* **94**, 022703 (2016).
7. Quaglioni S., Leidemann W., Orlandini G., Barnea N., Efros V.D., *Phys. Rev. C* **69** 2004 044002.
8. Kukulin V.I. and Rubtsova O.A., *Theor. Math. Phys.* **145**, 1711 , 2005.
9. Rubtsova O.A., Kukulin V.I., Pomerantsev V.N., *Annals of Physics* 316, 613, 2015.
10. Bethe H., *Quantenmechanik der Einund Zwei-Electronenprobleme*, Handbuch der Physik, Zweite Auflage, XXIV, Erster Teil, 1933.
11. Hiyama E. et al., *Prog. Theor. Exp. Phys.* 01A204 (2012).
12. Ohtsubo Sh.I., Fukushima Y., Kamimura M., Hiyama E., *Prog. Theor. Exp. Phys.* 2013.073D02
13. Egami T. et al., *Phys. Rev. C* **70**, 047604 (2004).
14. M'uther H., Rubtsova O.A., Kukulin V.I., Pomerantsev V.N., *Phys. Rev C* **94**, 2016.024328

УДК 539.171.016

ИССЛЕДОВАНИЕ УПРУГОГО РАССЕЯНИЯ ^{13}C НА ^{27}Al ПРИ 19.5 МэВ ЭНЕРГИИ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОДОВ FRESCO

Сайлауханов Нуржан Аскарулы

Магистрант 1 курса Международной кафедры ядерной физики, новых материалов и
технологии ЕНУ им.Л.Н.Гумилева, Астана, Қазақстан
Научный руководитель – Морзабаев А.К.

Исследование процессов взаимодействия легких частиц с ядрами является основным источником информационных данных о свойствах атомных ядер. Это предоставляет нам возможность получения обширных ядерно-физических данных, как механизм ядерно-