



58-я Зимняя Школа

Петербургский Институт Ядерной Физики
НИЦ «Курчатовский Институт»

Сборник тезисов докладов

16–21 марта 2026 г.

«Зеленый Бор ЦБ России», Луга

В данном выпуске представлены аннотации докладов LVII Зимней Школы НИЦ КИ – ПИЯФ, 16–21 марта 2026 года, «Зеленый Бор ЦБ России», Луга.

Проведению школы оказал поддержку



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ЦЕНТР «КУРЧАТОВСКИЙ ИНСТИТУТ»

Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова
Национального исследовательского центра «Курчатовский институт»



Спонсорами мероприятия стали: ООО «Эко-Вектор», «Зеленый Бор ЦБ России».

Сборник подготовили: Румянцев А.С., Шахова В.М., Рябоконт И.С., Хадеева П.А.

Примечание: материалы представлены в авторской редакции.

© НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, 2026

Организационный комитет Зимней школы ПИЯФ:

Воронин Владимир Владимирович	председатель оргкомитета
Аристов Дмитрий Николаевич	сопредседатель оргкомитета, руководи- тель направления ТФ
Ким Виктор Тимофеевич	сопредседатель оргкомитета, руководи- тель направления ФЭЧАЯ
Максимов Владимир Исаакович	сопредседатель оргкомитета, руководи- тель направления ЯМФУ
Смольский Сергей Лаврович	сопредседатель оргкомитета, руководи- тель направления ФТР
Титов Анатолий Владимирович	сопредседатель оргкомитета, руководи- тель направления АФ
Гусева Руслана Станиславовна	секретарь оргкомитета
Амерканов Дмитрий Александрович	общие вопросы
Воронина Татьяна Викторовна	общие вопросы
Егоров Анатолий Юрьевич	общие вопросы
Мурзин Виктор Александрович	WWW-сервер
Никитина Наталья Владимировна	приём иностранных граждан
Потапова Татьяна Александровна	фотоработы
Орешкин Вадим Анатольевич	общие вопросы
Семенихин Сергей Юрьевич	техническое обеспечение
Семенова Алла Николаевна	общие вопросы
Соснов Дмитрий Евгеньевич	техническое обеспечение, транспорт
Степанова Галина Валентиновна	подготовка публикации
Сутырина Татьяна Михайловна	общие вопросы
Травина Ольга Александровна	экономические вопросы
Хадеева Полина Андреевна	общие вопросы
Шахова Вера Михайловна	общие вопросы
Якимов Павел Владимирович	техническое обеспечение

Программный комитет Зимней школы ПИЯФ:

Егорычев Виктор Юрьевич	д-р. физ.-мат. наук, сопредседатель программного комитета
Ким Виктор Тимофеевич	д-р. физ.-мат. наук, сопредседатель программного комитета
Артамонов Станислав Александрович	канд. физ.-мат. наук
Грошева Наталья Анатольевна	науч. сотр.
Максимов Владимир Исаакович	канд. техн. наук
Матвеев Максим Александрович	канд. физ.-мат. наук
Титов Анатолий Владимирович	д-р. физ.-мат. наук
Федоров Валерий Васильевич	д-р. физ.-мат. наук
Фридман Сергей Рувинович	канд. техн. наук

Содержание

1	Межэлектронное взаимодействие, обусловленное обменом экзотическим бозоном, и спектральная чувствительность атомных систем с малым числом электронов	7
2	Interelectronic interaction effects in the quadratic Zeeman splitting	8
3	Аналитический расчет вкладов ядерной деформации и поляризации в многозарядных ионах	9
4	Изучение возможности регистрации выбивания электронами протонов и кластеров из ядер	10
5	Экспериментальные исследования тяжёлых аварий на АЭС	11
6	Голографическая термодинамика для физических масс конституэнтных кварков в приложениях к численному моделированию релятивистских столкновений тяжелых ионов	12
7	Исследование кластерной структуры ядер с помощью активной мишени	13
8	Вакуумное рождение электрон-позитронных пар в электрических полях круговой поляризации и спиновые эффекты	14
9	Квантовые кинетические уравнения и вакуумное рождение пар в сильных электрических полях	15
10	Конверсия закрученности от фотона к атому.	16
11	CP-нарушение в Стандартной Модели	17
12	Application of the amplitude analysis method to the study of mass and angular spectra of heavy tetraquarks in $di-J/\psi$ and $J/\psi-\psi(2S)$ decay channels.	18
13	Уточнение нейтронно-физических характеристик ИР РБТ-10/2 после его перевода на топливо с повышенным содержанием урана	19
14	Комплексная параметризация и верификация вычислительной модели диоксида рутения (RuO_2) для исследования альтермагнитных свойств	20
15	Расчеты и практические исследования для создания входного трека протонов для экспериментальной установки по изучению кластерной структуры ядер с использованием активных мишеней на СЦ-1000 в ПИЯФ (Гатчина)	21
16	Распределённый алгоритм двухкомпонентного релятивистского крамерс-неограниченного метода Хартри-Фока в приближении разложения единицы	22
17	КЭД расчеты g-фактора водородоподобных ионов: сравнение точного и приближенного выражений для однопотенциального вклада	23
18	Построение фрагмента кристалла с СТЕР для периодической структуры на основе актинида (Th)	24
19	Расчет матричных элементов спин-орбитального взаимодействия в методе связанных кластеров с многодетерминантным вакуумом (ic-MRCC)	25

20 Статус проектов группы радиационного модифицирования материалов НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ	26
21 Антиоксидантная активность как целевой показатель радиационной стойкости фуллеренолов в условиях электронного облучения	27
22 Опыт разработки ОТЦ блока №5 НВРАЭС для снижения радиационного нагружения КР	28
23 Исследование влияния сверхтонкого взаимодействия на изменение поляризации при рассеянии мюона на голом ядре	29
24 Анализ релятивистских эффектов в межэлектронном взаимодействии в многозарядных ионах	30
25 Релятивистские методы связанных кластеров для высокоточного моделирования электронной структуры соединений тяжёлых элементов	31
26 Радиационные процессы второго порядка в КЭД с нестабильным вакуумом	32
27 Дозиметрическое планирование экспериментов по бор-нейтронозахватной терапии	33
28 Релятивистский метод связанных кластеров с пониженным рангом: трехкратные возбуждения	34
29 Заметки об алгоритме Дирака-Бергманна для гамильтонового формализма калибровочных теорий	35
30 Исследование основного состояния молекулы СО в широком интервале межатомных расстояний	36
31 Дальнодействующее взаимодействие в рамках формализма квантовой электродинамики	37
32 КЭД расчеты g-фактора водородоподобных ионов: приближенный учет двухпотенциального вклада.	38
33 Аналитические градиенты энергии по координатам ядер в рамках двухкомпонентного квазирелятивистского метода Хартри-Фока в приближении разложения единицы	39
34 Квантовые кинетические уравнения и функция Вигнера	40
35 Подготовка к исследованию кумулятивных эффектов на коллайдере NICA с использованием детекторов на микроканальных пластинах	41
36 Полуэмпирические методы учета КЭД поправок в расчетах электронной структуры атомов и многозарядных ионов	42
37 Approximation of potential energy curves of the SiO^+ cation by the Expanded Morse Oscillator: analysis of numerical error	43
38 Квантово-химические расчеты димеров оганесона и его гомологов	44

39 Исследование электронной структуры и свойств фрагментов кристаллов с СТЕР дибромидов и диiodидов иттербия	45
40 Влияние выгорания урана-235 в топливных подвесках компенсирующих органов реактора СМ на физические характеристики активной зоны	46
41 Поправка на собственную энергию к сверхтонкой структуре водородоподобных ионов: фейнмановская и кулоновская калибровки	47
42 Нетривиальная тривиальность $2+1$ -мерной гравитации	48
43 Сто лет квантовой механики	49

УДК 539.1.01

Межэлектронное взаимодействие, обусловленное обменом экзотическим бозоном, и спектральная чувствительность атомных систем с малым числом электронов

Абдуллин Р.Р.^{1,2,3}.

abdullin_rr@pnpi.nrcki.ru

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия² Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия³ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Во многих сценариях физики за пределами Стандартной модели естественным образом возникают экзотические лёгкие бозоны, способные индуцировать дополнительные взаимодействия между частицами [1]. Существенный прогресс, достигнутый в последние годы в теории и эксперименте прецизионной атомной физики, делает атомную спектроскопию чувствительным инструментом проверки Стандартной модели и поиска эффектов новой физики. Особый интерес в этом контексте представляют многозарядные ионы, в которых вклад соответствующих эффектов может быть существенно усилен.

В докладе рассматриваются три задачи. В первой части исследуются водородоподобные ионы и изотопические сдвиги g -фактора связанного электрона; показано [2], что чувствительность таких систем существенно ограничивается ядерными эффектами, определяющими теоретическую погрешность. Во второй части рассматриваются литиеподобные ионы, для которых построен релятивистский формализм бозон-опосредованного межэлектронного взаимодействия и получены новые ограничения на параметры аксионоподобных частиц. Также рассматривается атом гелия, в котором наблюдаемое расхождение между теоретическими и экспериментальными значениями энергий переходов допускает описание в рамках новой физики, связанной со скалярным межэлектронным взаимодействием. [3].

Работа выполнена при поддержке: РНФ в рамках научного проекта № 24-72-10060, Фондом развития теоретической физики и математики “БАЗИС”.

Список литературы

- [1] L. Cong, W. Ji, P. Fadeev, F. Ficek, M. Jiang, V.V. Flambaum, H. Guan, D.F. Jackson Kimball, M.G. Kozlov, Y.V. Stadnik, D. Budker. Spin-dependent exotic interactions // Rev. Mod. Phys. 2025. V. 97(2). p. 025005.
- [2] D.S. Akulov, R.R. Abdullin, D.V. Chubukov, D.A. Glazov, A.V. Volotka. g -Factor Isotopic Shifts: Theoretical Limits on New Physics Search // Atoms. 2025. V. 13(6). p. 52.
- [3] L. Cong, F. Ficek, R.R. Abdullin, M.G. Kozlov, D. Budker. Testing Exotic Electron-Electron Interactions with the Helium Ionization-Energy Anomaly // arXiv. 2026. arXiv:2602.09743. DOI: 10.48550/arXiv.2602.09743.

УДК

Interelectronic interaction effects in the quadratic Zeeman splitting

Agababae V. A.¹

v.agababae@yandex.ru

¹ ITMO University — Kronverksky pr. 49, 197101 St. Petersburg, Russia

High-precision measurements of the g -factor in highly charged ions have advanced rapidly over the past two decades, reaching relative accuracies below one part per billion for hydrogen-, lithium-, and boron-like ions up to tin [1]. These studies have enabled the most accurate determination of the electron mass, provided stringent tests of bound-state QED in magnetic fields, and are expected to yield an independent determination of the fine-structure constant α and nuclear properties (see, e.g., [2–4] and references therein).

Recent experiments by the ALPHATRAP collaboration measured the ground-state g factor in boron-like argon $^{40}\text{Ar}^{13+}$ [5] and tin $^{118}\text{Sn}^{45+}$ [1]. The g factor of the excited $^2P_{3/2}$ state has also been measured in $^{40}\text{Ar}^{13+}$ [6–8]. The quadratic Zeeman effect becomes observable in g factor measurements of excited P states due to the strong mixing of the fine-structure levels [9]. The estimates of the quadratic and cubic Zeeman effect were essential for interpreting g -factor measurements in $^{40}\text{Ar}^{13+}$ [5, 6].

Our group has previously studied the nonlinear Zeeman effect, including the quadratic contribution, one-photon exchange, and QED corrections in low- Z . In the present work, we extend our calculations to the $^2P_{1/2}$ and $^2P_{3/2}$ states of boron-like ions to the nuclear-charge range $Z = 10$ –92. We calculated the quadratic Zeeman effect contribution to the binding energy of the valence $2p$ electron, including one-photon exchange and radiative QED corrections. The results are important not only for high-precision laboratory experiments but also for observations of astrophysical spectra [10].

Список литературы

- [1] J. Morgner *et al.* g Factor of Boronlike Tin // Phys. Rev. Lett. 2025. V. 134. p. 123201.
- [2] S. Sturm *et al.* High-precision measurement of the atomic mass of the electron // Nature. 2014. V. 506. p. 467.
- [3] V. M. Shabaev *et al.* Theory of Bound-Electron g factor in Highly Charged Ions // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2015. V. 44. p. 031205.
- [4] D. A. Glazov *et al.* g Factor of Few-Electron Highly Charged Ions // Atoms. 2023. V. 11. N. 9.
- [5] I. Arapoglou *et al.* g Factor of Boronlike Argon $^{40}\text{Ar}^{13+}$ // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 122 p. 253001.
- [6] A. Egl *et al.* Application of the Continuous Stern-Gerlach Effect for Laser Spectroscopy of the $^{40}\text{Ar}^{13+}$ Fine Structure in a Penning Trap // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 123. p. 123001.
- [7] P. Micke *et al.* Coherent laser spectroscopy of highly charged ions using quantum logic // Nature. 2020. V. 578. p. 60.
- [8] S. A. King *et al.* An optical atomic clock based on a highly charged ion // Nature. 2022. V. 611. p. 43.
- [9] D. von Lindenfels *et al.* Experimental access to higher-order Zeeman effects by precision spectroscopy of highly charged ions in a Penning trap // Phys. Rev. A. 2013. V. 87. p. 023412.
- [10] S. P. Järvinen *et al.* Testing pulsation diagnostics in the rapidly oscillating magnetic Ap star using near-infrared CRIRES+ observations // A&A. 2024. V. 683. p. A66.

УДК 539.14

Аналитический расчет вкладов ядерной деформации и поляризации в многозарядных ионах

Акулов Д.С.¹, Волотка А.В.¹, Абдуллин Р.Р.^{1, 2}, Глазов Д.А.^{1, 2}
dmitriy.akulov@metalab.ifmo.ru

¹ Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

² НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

В статье представлен вывод аналитических формул для двух типов поправок к энергии связи электронов в тяжелых многозарядных ионах: поправки за счет поляризации ядра и поправки за счет деформации ядра. Актуальность работы обусловлена необходимостью повышения точности теоретических расчетов лэмбовского сдвига и анализа изотопических сдвигов, где данные эффекты, несмотря на относительную малость, могут вносить значительный вклад в нелинейности King plot.

В первой части работы исправлена ошибка в ранее опубликованных выводах аналитических выражений для поляризации ядра. Корректный вывод выполнен в рамках релятивистской теории возмущений с использованием редуцированной кулоновской функции Грина и разложений волновых функций Дирака вблизи ядра. Получено новое аналитическое выражение для поправки на ядерную поляризацию, которое, в отличие от предыдущих работ, учитывает вклады от перекрестных слагаемых [1]. На основе полученной общей формулы выведены удобные для практических расчетов выражения для $1S$, $2S$ и $2p$ состояний через параметр деформации ядра β_2 .

Во второй части работы предложен новый аналитический подход для расчета поправки на статическую деформацию ядра. Поправка от ядерной деформации определяется как разность поправок на конечный размер ядра для деформированного и сферического ядра, описываемых распределением Ферми. Деформация учитывается через параметры β_2 и β_4 .

Практическая значимость работы заключается в простоте полученных выражений, позволяющих исследовать поведение поправок в широком диапазоне параметров. В статье проведен анализ отношения величин ΔE_{NR} и ΔE_{ND} поправок в зависимости от заряда ядра Z и параметра деформации β_2 . Показано, что для всех рассмотренных значений знаки поправок совпадают, а отношение их величин находится в диапазоне от 1.2 до 2.

Работа выполнена при поддержке: Российского научного фонда, проект 25-12-00213

Список литературы

- [1] L. Labzowsky and A. Nefiodov, Analytic evaluation of the nuclear polarization contribution to the energy shift in heavy ions, Phys. Lett. A 188, 371 (1994).

УДК 53.08

Изучение возможности регистрации выбивания электронами протонов и кластеров из ядер

А. Аламури^{1,2}, А.А. Дзюба^{1, 2}, А.В. Добровольский^{1,2}, А.Д. Чубыкин^{1,2}
st123089@student.spbu.ru

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Россия, 199034, г. Санкт-Петербург,
Университетская наб., д. 7–9

² Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ “Курчатовский институт”,
г. Гатчина, Россия

В настоящее время в НИЦ “Курчатовский институт” – ПИЯФ сформирован существенный научный потенциал для проведения исследований с использованием метода активной мишени [1-2]. Данный подход основан на том, что время-проекционная камера (ВПК) совмещает две функции: она является одновременно газовой мишенью и детектором, фиксирующим частицы отдачи. В рамках запланированного цикла работ предполагается провести измерения дифференциальных сечений для процессов выбивания протонов, а также кластерных частиц (дейтронов и ядер гелия) из набора газовых сред (He, CH₄, N₂, Ar). Эксперименты охватят широкий спектр энергий электронного пучка.

Важнейшей задачей подготовительного этапа является компьютерное моделирование установки в среде GEANT4, анализ воздействия электронных шумов и наводок от пучка на точность угловых и энергетических измерений [3], а также разработка методики идентификации типов частиц отдачи на основе модельных данных и критерия хи-квадрат [4]. Качество регистрации событий в значительной степени зависит от явлений, сопровождающих дрейф ионизационных электронов. Ключевыми факторами здесь выступают: рекомбинация зарядов, потеря электронов из-за захвата примесями, продольная диффузия, негативно сказывающаяся на временных параметрах, поперечная диффузия и неоднородности электрического поля, влияющие на точность определения координат, а также прозрачность сетки. В настоящей работе представлены результаты расчетов, количественно описывающих вклад перечисленных эффектов в выходные сигналы ВПК.

Список литературы

- [1] J. P. Burq et al., Nuclear Physics, B 217, 285-335 (1983), "Soft πp and pp Elastic Scattering in the Energy Range 30-GeV to 345-GeV".
- [2] Г.Д. Алхазов и др., Физика элементарных частиц и атомного ядра, Т. 53, вып. 3, стр. 661-691 (2022), "Исследование структуры экзотических ядер на установке с активной мишенью ИКАР методом упругого рассеяния протонов в инверсной кинематике".
- [3] А. Аламури, А.А. Дзюба, Изучение возможности регистрации выбивания электронами протонов и кластеров из ядер // Сборник тезисов XI Всероссийского молодежного научного форума с международным участием “Open Science 2024”. – Гатчина: НИЦ “Курчатовский институт” - ПИЯФ, 2024. – 159 с.
- [4] А. Аламури, А.А. Дзюба, Разработка метода идентификации типа частиц отдачи в ионизационной камере // Труды LXXV Международной конференции “ЯДРО-2025. Физика атомного ядра и элементарных частиц. Ядерно-физические технологии” (направлена для публикации).

УДК 621.039.586

Экспериментальные исследования тяжёлых аварий на АЭС

Альмяшев В.И.^{1,2,3}, Шуваева Е.Б.^{1,2}, Тимчук А.В.^{1,2}.
vac@mail.ru

¹ ФГУП «НИТИ им. А.П. Александрова», Сосновый Бор, ЛО, Россия

² СПбГЭТУ «ЛЭТИ», Санкт-Петербург, Россия

³ НИЦ «Курчатовский Институт» – ПИЯФ – ИХС, Санкт-Петербург, Россия

В докладе обсуждается проблематика тяжёлых аварий на атомных электростанциях, приводится обзор исследований, выполненных в обоснование безопасности реакторов с водным теплоносителем. Рассматриваются способы и технологии управления тяжёлыми авариями, а также перспективы их совершенствования.

Аварии на ЧАЭС и на АЭС Фукусима-1 привели к катастрофическим последствиям для окружающей среды и местного населения. В мировом масштабе атомная энергетика стала восприниматься как одна из самых опасных отраслей. Для преодоления этой проблемы в мире были развёрнуты расчётно-экспериментальные исследования, которые позволили на несколько порядков уменьшить вероятность тяжёлых аварий за счёт обнаружения наиболее опасных эффектов и процессов, а также разработки мер предотвращения и/или смягчения их последствий [1, 2].

Фундаментально значимой для понижения неопределённостей прогнозирования и, следовательно, уменьшения вероятности тяжёлых аварий является информация о фазовых равновесиях. Немаловажным является то обстоятельство, что расплав в корпусе аварийного реактора находится не в термодинамически равновесном, а в стационарном состоянии, приводящем к перераспределению компонентов между сосуществующими фазами. Это состояние не имеет общепринятой модели, что сильно усложняет расчётные оценки его влияния на сценарий тяжёлой аварии. В докладе рассмотрены методы и результаты исследований фазовых равновесий и предложены пути решения проблемы учёта стационарного состояния.

В условиях тяжёлой аварии возможно появление жидко-твёрдых интерфейсов между жидкими фазами, идут окислительно-восстановительные процессы, которые носят комплексный характер и приводят к различного рода эффектам, могущим оказать серьёзное влияние на сценарий протекания аварии. Кинетику данных процессов тоже необходимо исследовать на систематической основе для получения адекватных оценок сценариев. В докладе рассмотрены несколько примеров таких исследований.

Также в докладе рассматриваются технологии и материалы, обеспечивающие минимизацию последствий на внекорпусной стадии тяжёлых аварий, в частности, устройства локализации расплава и их функциональные наполнители.

Авторы благодарят Инжиниринговый центр СПбГТИ(ТУ) и его куратора Д.П. Даниловича, а также лабораторию электронной микроскопии СПбГЭТУ «ЛЭТИ» и зав. кафедрой ЭПУ Н.Н. Потрахова за помощь в проведении физико-химических исследований.

Список литературы

- [1] В.И. Альмяшев и др. Экспериментальные исследования тяжёлых аварий на АЭС // Атомная энергия. 2022. Т. 132, Вып. 2. С. 110–116.
- [2] В.Б. Хабенский и др. Расчётно-теоретические исследования теплофизических и физико-химических процессов при тяжёлых авариях на АЭС с ВВЭР // Атомная энергия. 2022. Т. 132, Вып. 2. С. 116–121.

УДК 539.172.17

Голографическая термодинамика для физических масс конституэнтных кварков в приложениях к численному моделированию релятивистских столкновений тяжелых ионов

Ануфриев А.В.¹ Коваленко В.Н.¹

anton.anufriev@spbu.ru

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В рамках представленного доклада, продолжающего наши предыдущие работы [1], [2], [3], предлагается метод калибровки голографического уравнения состояния, разработанного теоретической группой И. Я. Арефьевой [4], для исследования эволюции КГП с применением релятивистской гидродинамики. Особое внимание уделяется вопросу подбора деформационного фактора начальной геометрии AdS5-пространства, вид которого неизвестен для величин масс кварков, соответствующих экспериментально подтвержденным массам легких мезонов. Для решения задачи с широким набором неизвестных параметров в рамках символьной регрессии применяется алгоритм обучения с подкреплением, вдохновленный работой [5], где данный способ машинного обучения апробирован на экспериментальной проблеме с большим количеством варьируемых переменных.

Для получения окончательных адронных спектров проводится численное моделирование с использованием фреймворков iEBE-MUSIC [6] и SMASH-vHLLC [7], где на этапе релятивистской гидродинамики применяется предварительно внедрённое голографическое уравнение состояния для физических кварковых масс.

Работа выполнена при поддержке: СПбГУ, шифр проекта 103821868

Список литературы

- [1] A. V. Anufriev, V. N. Kovalenko, Application of the Holographic Equation of State for Numerical Modeling of the Evolution of Quark-Gluon Plasma // Phys. Atom. Nuclei, V.89, N.1 (2026) (Принято к печати), arXiv:2504.20207 [nucl-th] (2025)
- [2] A. V. Anufriev, V. N. Kovalenko, Application of the holographic equations of state for modeling experiments on heavy ion collisions // Int. J. Mod. Phys. E 35, 2641032 (2026)
- [3] A. V. Anufriev, V. N. Kovalenko, Holographic equation of state matched with hadron gas equation as a tool for the study of the quark-gluon plasma evolution // Phys. Part. Nuclei, V. 57, N.5 (2026) (Принято к печати), arXiv:2510.27541 [nucl-th] (2025)
- [4] I. Aref'eva, K. Rannu, P. Slepov, Holographic anisotropic model for light quarks with confinement-deconfinement phase transition // J. High Energ. Phys. 2021, 90 (2021).
- [5] A. Ibrahim et al., Optimisation of the Accelerator Control by Reinforcement Learning: A Simulation-Based Approach // Physics of Particles and Nuclei 56, 6 (2025)
- [6] B. Schenke, C. Shen, P. Tribedy, Running the gamut of high energy nuclear collisions // Phys. Rev. C 102, 044905 (2020)
- [7] A. Schafer et al., Particle production in a hybrid approach for a beam energy scan of Au+Au/Pb+Pb collisions between $\sqrt{s_{NN}} = 4.3$ GeV and $\sqrt{s_{NN}} = 58.11$ // Eur. Phys. J. A 58, 230 (2022)

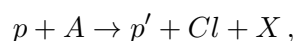
УДК 53.08

Исследование кластерной структуры ядер с помощью активной мишениАрутюнова А.Ю.¹, Дзюба А.А.^{1,2}, Маев Е.М.¹

E-mail: arutiunova_ai@npni.nrcki.ru

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Кластерная структура ядер – это образование в ядре малонуклонных систем (в основном дейтронов и альфа-частиц). При неупругом взаимодействии частиц пучка с ядрами мишени возможен процесс выбивания кластеров. Изучение этого процесса важно для определения механизма их образования и для получения новой информации о строении ядра, в том числе о его кластерной структуре [1]. Трудность экспериментального исследования этого процесса связана с высоким уровнем ошибок. Например, в работе [2] неточность определения интенсивности протонного пучка и неопределенность вычисления светосилы спектрометра составляют 10%. При этом экспериментальные данные об образовании фрагментов быстрыми частицами, полученные ранее [3, 4], показывают высокие сечения вылета кластеров. Эксперимент, предложенный в ПИЯФ с использованием активных мишеней, предполагает значительное уменьшение как статистических так и систематических ошибок. Планируется исследование кластерной структуры большого набора ядер от гелия до ксенона. Активная мишень – ионизационная камера, которая является одновременно мишенью и детектором частиц отдачи. Предполагается изучить процесс вида:



где Cl – различные кластеры, например, d , t , ^3He и ^4He .

Подтверждением эффективности этого метода являются обнаруженные в результате тестового эксперимента, выполненного на электронном пучке с энергией 720 МэВ на ускорителе МАМИ (Майнц, Германия), характерные корреляции энергий между соседними анодными кольцами для различных типов кластеров. В настоящий момент идет подготовка к проведению эксперимента. С помощью корреляций пробег-энергия были вычислены характерные потери энергии на соседних анодах с различными наполнениями для возможных кластеров, которые в дальнейшем будут использоваться для их идентификации. Также были разработаны необходимые программы для обработки данных с камеры: программа отображения сигналов и анализа их характеристик: собранной энергии и времени, по которым будут определены точка взаимодействия, угол вылета и, соответственно, тип частицы. Для проверки характеристик камер и разработанных программ набираются и анализируются данные, получаемые от двух альфа-источников (Am-241), которые были размещены на катоде и сетке камеры АСТАМ.

Список литературы

- [1] В.С. Барашенков, В.Д. Тонеев. Взаимодействия высокоэнергетических частиц и атомных ядер с ядрами // М.: Атомиздат. 1972.
- [2] Л.М. Барков, М.С. Золоторев // Препринт ИЯФ СО АН СССР. 1985. с. 85-129.
- [3] Е.Н. Вольнин, А.А. Воробьев, В.Т. Грачев // Препринт ПИЯФ-101. 1974
- [4] А.М. Poskanzer, G.W. Butler, E.K. Hyde // Phys. Rev., C3, 882. 1971

УДК 53.043

Вакуумное рождение электрон-позитронных пар в электрических полях круговой поляризации и спиновые эффекты

Бакшеев А.И.¹, Бохан В.А.¹, Александров И.А.¹
st108269@student.spbu.ru

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Рассматривается процесс рождения электрон-позитронных пар из вакуума в сильных электромагнитных полях. В постоянном электрическом поле это явление было описано в рамках квантовой электродинамики в классической работе [1]. В нашем исследовании рассматриваются однородные электрические поля, зависящие от времени как по величине, так и по направлению. Такая постановка задачи приближенно описывает рождение пар в комбинации встречных лазерных импульсов заданной поляризации. Перспективы экспериментального исследования механизма Швингера в лазерных полях связывают с появлением все более мощных лазерных установок [4].

Для описания непертурбативного эффекта рождения пар мы опирались на систему квантовых кинетических уравнений (ККУ) [3], которая позволяет описывать процесс рождения пар с учетом внешнего поля сразу во всех порядках. Численная реализация системы ККУ была использована для получения спектров рождаемых частиц.

Особый интерес представляет исследование спиновых эффектов, возникающих в полях круговой поляризации [4]. Нами был проведен анализ спектров рождаемых частиц для сильного медленно изменяющегося и для слабого быстро осциллирующего полей, а также для их комбинации. В последнем сценарии рождение пар может быть усилено на несколько порядков в терминах полного числа частиц [5]. Найденные спектры сравнивались с результатами, полученными в приближении локально-постоянного поля (LCFA). Было показано, что распределения частиц по импульсам для разных спиральностей пропорциональны друг другу и коэффициент пропорциональности зависит только от угла между направлением импульса частицы и направлением распространения лазерных пучков. Было получено качественное объяснение этого эффекта с использованием закона сохранения момента количества движения.

Работа выполнена при поддержке: РНФ №24-72-10060.

Список литературы

- [1] J. Schwinger. On gauge invariance and vacuum polarization // Phys. Rev. 1951. V. 82. p. 664.
- [2] A. Fedotov, A. Ilderton, F. Karbstein, B. King, D. Seipt, H. Taya, and G. Torgrimsson. Advances in QED with intense background fields // Phys. Rep. 2023. V. 1010. p. 1.
- [3] I.A. Aleksandrov, A. Kudlis, and A.I. Klochai. Kinetic theory of vacuum pair production in uniform electric fields revisited // Phys. Rev. Res. 2024. V. 6. p. 043009.
- [4] I.A. Aleksandrov and A. Kudlis. Pair production in rotating electric fields via quantum kinetic equations: Resolving helicity states // Phys. Rev. D. 2024. V. 110. p. L011901.
- [5] R. Schützhold, H. Gies, and G. Dunne. Dynamically assisted Schwinger mechanism // Phys. Rev. Lett. 2008. V. 101. p. 130404.

УДК 53.043

Квантовые кинетические уравнения и вакуумное рождение пар в сильных электрических полях

Бохан В.А.¹, Бакшеев А.И.¹, Александров И.А.¹
st106867@student.spbu.ru

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В докладе обсуждается фундаментальный эффект квантовой электродинамики (КЭД), связанный с рождением электрон-позитронных пар из вакуума в сильном внешнем электромагнитном поле [1,1,2]. Поскольку для наблюдения данного эффекта требуется создание полей, близких по величине напряженности к критическому значению $E_c = m^2 c^3 / |e \hbar| \sim 10^{16}$ В/см² (e и m — соответственно заряд и масса электрона), этот эффект еще не исследовался в непертурбативном режиме сильного поля. Тем не менее, ожидается, что в недалеком будущем подобные эксперименты станут возможны (см., например, обзор [4]).

В данной работе мы проводим анализ системы квантовых кинетических уравнений (ККУ) [5] для описания процесса рождения пар и эффектов вакуумной поляризации во внешнем электрическом поле, зависящем от времени. Осуществляется вывод системы независимым методом, основанным на использовании адиабатического базиса и получении уравнений движения для корреляционных функций, включающих адиабатические операторы рождения и уничтожения. Такой подход дает возможность получить ККУ из работы [5] несколько более удобным способом. Также обсуждается построение рядов теории возмущений и расчет некоторых наблюдаемых величин: ток, тензор энергии-импульса, угловой момент. Для получения этих наблюдаемых производится перенормировка заряда в схеме регуляризации Паули–Вилларса.

Теоретические результаты, полученные в настоящей работе существенным образом способствуют дальнейшему развитию метода ККУ для описания нелинейных эффектов КЭД в переменных электрических полях произвольной поляризации.

Работа выполнена при поддержке: РНФ №24-72-10060

Список литературы

- [1] F. Sauter. Über das Verhalten eines Elektrons im homogenen elektrischen Feld nach der relativistischen Theorie Diracs // Z. Phys. 1931. V. 69. p. 742.
- [2] W. Heisenberg and H. Euler. Folgerungen aus der Diracschen Theorie des Positrons // Z. Phys. 1936. V. 98. p. 714.
- [3] J. Schwinger. On gauge invariance and vacuum polarization // Phys. Rev. 1951. V. 82. p. 664.
- [4] A. Fedotov, A. Ilderton, F. Karbstein, B. King, D. Seipt, H. Taya, and G. Torgrimsson. Advances in QED with intense background fields // Phys. Rep. 2023. V. 1010. p. 1.
- [5] I.A. Aleksandrov, A. Kudlis, and A.I. Klochai. Kinetic theory of vacuum pair production in uniform electric fields revisited // Phys. Rev. Res. 2024. V. 6. p. 043009.

УДК 539.192

Конверсия закрученности от фотона к атому.

Волотка А.В., Батурин С.С.

avolotka@gmail.com

Физический факультет, университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

Появление структурированных волн в квантовой механике сначала было главным образом связано с фотонами, однако, впоследствии эта концепция была распространена и на массивные частицы. Это привело к введению понятия “закрученного атома” — составной системы, у которой движение центра масс имеет спиральную фазовую структуру и определённую проекцию орбитального момента импульса (ОАМ). Теоретическое описание этой системы подробно изложены в работах [1, 2]. В них сначала формулируется модель закрученного атома, а затем предлагается реалистичный механизм его создания за счёт поглощения закрученного света. В рамках нерелятивистского описания строится гамильтониан, в котором координаты центра масс и относительные координаты электрона разделяются. При таком подходе состояние атома можно представить как произведение волновой функции связанного электрона и волновой функции центра масс.

Важный результат подобного описания состоит в том, что начальная закрученность центра масс заметно влияет на характеристики излучения, возникающего при электронном переходе, даже в первом порядке по малому параметру — отношению массы электрона к массе ядра [1]. При больших углах раскрытия $\theta_a = \arctan \kappa_a / P_{z,a}$ появляются заметные отличия. Расчёты показывают, что угловое распределение фотонов распадается на два пика, симметрично смещённых относительно угла излучения плоской волны на величину $\pm \theta_a$. Наблюдение такого расщепления может служить прямым экспериментальным признаком того, что атом изначально находился в закрученном состоянии.

Эти результаты также показывают важную роль движения центра масс в передаче углового момента. Если ядро считать бесконечно тяжёлым, то центр масс фактически неподвижен. В таком случае весь орбитальный момент фотона должен передаваться электрону, что приводит к модифицированному правилу отбора $m_\gamma = m_b - m_a$, что согласуется с экспериментами на ионах в ловушке. Если же центр масс может свободно двигаться, как в атомном пучке, то угловой момент распределяется между различными степенями свободы системы. Закрученность фотона изменяет амплитуду электронного перехода, а конечное состояние центра масс становится закрученным с ОАМ, равным разности между орбитальным моментом фотона и изменением углового момента электрона [2]. Такой механизм передачи углового момента является достаточно общим и позволяет переносить на атомную волну различные сложные поперечные структуры световых пучков, например моды Эрмита–Гаусса или Эйри.

Работа выполнена при поддержке: РНФ 25-12-00261

Список литературы

- [1] P. K. Maslennikov, A. V. Volotka, and S. S. Baturin, Theoretical consideration of a twisted atom // Physical Review A. 2024. V. 109. p. 052805.
- [2] S. S. Baturin and A. V. Volotka. Conversion of twistedness from light to atoms // Physical Review A. 2024. V. 110. p. L020801.

УДК 547.68

CP-нарушение в Стандартной Модели

А.А. Дзюба^{1, 2}

dzyuba_aa@npri.nrcki.ru

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Россия, 199034, г. Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7–9² Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова НИЦ "Курчатовский институт", г. Гатчина, Россия

Поиски новых источников нарушения комбинированной (CP) четности важны для понимания эволюции Вселенной в первые секунды после Большого взрыва. Отличие частиц от античастиц, проявляющееся в нарушении CP инвариантности, является одним из условий, сформулированных А.Д. Сахаровым, необходимых для объяснения образования барионной асимметрии Вселенной [1]. В Стандартной модели физики частиц (СМ) инвариантность относительно операции CP нарушается в кварковом секторе. Этот эффект связан с присутствием ненулевой комплексной фазы в матрице кваркового смешивания (матрице Кабиббо-Кобаяши-Маскавы, ККМ). Элементы этой матрицы входят в амплитуду слабого взаимодействия для кварков, а соответствующие комплексно-сопряженные величины входят в амплитуды для антикварков, что приводит к появлению асимметрий распадов адронов, позволяющих однозначно отличить материю от антиматерии.

Помимо кваркового сектора СМ, CP-четность принципиально может быть нарушена: при смешивании нейтрино, если комплексная фаза в матрице смешивания (матрице Понтекорво-Маки-Накагава-Сакаты, ПМНС) отлична от 0 или π ; в сильном взаимодействии на счет так называемого θ -члена в лагранжиане квантовой-хромодинамики. Однако проявление этих эффектов пока экспериментально не обнаружено.

В докладе будут рассмотрены обозначенные выше источники CP-нарушения в СМ (см. обзор в [2]). Основной упор будет сделан на кварковый сектор СМ. Будут рассмотрены результаты экспериментов с K-мезонами [3], а также новейшие работы эксперимента LHCb, включая обнаружение CP нарушения в распадах барионов [4]

Список литературы

- [1] A.D. Sakharov, Violation of CP invariance, C asymmetry, and baryon asymmetry of the Universe // Pisma Zh. Eksp. Teor. Fiz., 1967, V.5, P.24.
- [2] Particle Data Group, Review of particle physics // Phys. Rev. D, 2024, V.110, P.03000.
- [3] CPLEAR Collaboration, Physics at CPLEAR // Physics Reports, 2005, V.374, P. 165–270.
- [4] LHCb Collaboration, Observation of charge-parity symmetry breaking in baryon decays // Nature, 2025, V.643, P. 1223.

УДК 539.126.4

Application of the amplitude analysis method to the study of mass and angular spectra of heavy tetraquarks in di- J/ψ and J/ψ - $\psi(2S)$ decay channels.

A. Didenko¹, I. Yeletskikh¹

alisadidenko@jinr.ru

¹ Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, 141980, Russia

Three resonant structures with masses around 6.5–6.6, 6.8–6.9, and 7.1–7.2 GeV have been observed by the LHCb, CMS, and ATLAS collaborations in the di- J/ψ invariant-mass spectra with four muons in the final state [1–3]. The latest ATLAS and CMS analysis of the J/ψ - $\psi(2S)$ invariant-mass spectra confirmed a signal at 6.9 GeV [4, 7]. An accurate analysis of resonances in the 7.2–7.3 mass region requires new data. The CMS Collaboration has also presented first indications of the allowed quantum numbers under the hypothesis of identical spin–parity assignments ($J^P = 2^+$ and 0^+ is preferred) [5].

We derived analytical expressions for the decay amplitudes for three decay channels $X \rightarrow \psi\psi \rightarrow 4\mu$, $X \rightarrow \psi\psi(2S) \rightarrow 4\mu$, and $X \rightarrow \psi\psi(2S) \rightarrow 4\mu + 2\pi$ within the helicity formalism [6]. Using these matrix elements, signal resonances, including mass and angular spectra, were simulated. This method demonstrated the possibility of measuring the spin and parity of the observed signals. The most discriminating variables are the decay angles in the rest frames of the parent particles. Among the considered spin–parity hypotheses, the model with $J^P = 0^-$ exhibits the most pronounced deviation from the other assignments, consistent with the behavior observed in the CMS analysis [5].

Список литературы

- [1] LHCb Collaboration. Observation of structure in the J/ψ -pair mass spectrum // Science Bulletin. 2020. V. 65(23). p. 1983–1993.
- [2] ATLAS Collaboration. Observation of an Excess of Dicharmonium Events in the Four-Muon Final State with the ATLAS Detector // Phys. Rev. Lett. 2023. V. 131. p. 151902.
- [3] CMS Collaboration. New Structures in the $J/\psi J/\psi$ Mass Spectrum in Proton-Proton Collisions at $\sqrt{s} = 13 \text{ TeV}$ // Phys. Rev. Lett. 2023. V. 132. p. 111901.
- [4] ATLAS Collaboration. Observation of structures in the $J/\psi + \psi(2S)$ mass spectrum with the ATLAS detector // CERN Document Server. CERN-EP-2025-182. DOI: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2509.13101>. 2025.
- [5] CMS Collaboration. Determination of the spin and parity of all-charm tetraquarks // Nature. 2025. V. 648. p. 58–63
- [6] A.R. Didenko, L.K. Gladilin, and I.V. Yeletskikh. Application of the Amplitude Analysis Method to the Study of Mass and Angular Spectra of Heavy Tetraquarks in di- J/ψ and J/ψ - $\psi(2S)$ Decay Channels // Phys. Part. Nuclei Lett. 2025. V. 22. p. 1115–1118.
- [7] CMS Collaboration. Observation of $X(6900)$ and evidence of $X(7100)$ in the $\psi(2S)J/\psi$ to 4μ mass spectrum in pp collisions at CMS // CERN Document Server. CMS-PAS-BPH-22-004.

УДК 621.039.51

Уточнение нейтронно-физических характеристик ИР РБТ-10/2 после его перевода на топливо с повышенным содержанием урана

Ефимов Е.И., Пименов В.В., Малков А.П., Хохлин А.А.

E-mail: EIEfimov@niiar.ru

АО «ГНЦ НИИАР», Дмитровград, Россия

Исследовательский реактор бассейнового типа РБТ-10/2 [1] в качестве топлива использует отработавшие штатные тепловыделяющие сборки (ТВС) реактора СМ-3 со средним выгоранием 30% по ^{235}U . В 2005 году после перевода реактора СМ-3 на топливо с увеличенной загрузкой ^{235}U в твэлах (масса урана увеличилась с 5 на 6 грамм) осталось ограниченное количество штатных ТВС, которых не хватило бы до окончания срока эксплуатации реакторов РБТ-6 и РБТ-10/2. В связи с этим было принято решение об использовании в активных зонах данных реакторов отработавших ТВС реактора СМ-3 с повышенной загрузкой ^{235}U в твэлах.

За период с 2017 по 2021 год реактор РБТ-10/2 был полностью переведён на ТВС с повышенной загрузкой ^{235}U . Однако, осталось без изменений ограничение на допустимую глубину среднего выгорания топлива (убыли ^{235}U) в ТВС, составляющее 53%. Это привело к существенному увеличению массы топлива и значительному изменению его распределения по сечению активной зоны реактора.

В результате нейтронно-физические характеристики активной зоны также изменились, что потребовало повышения точности расчетно-экспериментальных методов контроля для подтверждения соответствия проектным пределам характеристик, важных для безопасности, и других параметров, необходимых для анализа аварийных ситуаций. Поэтому в процессе перевода реактора на новое топливо для контроля и обоснования нейтронно-физических характеристик активной зоны реактора была разработана и протестирована полномасштабная гетерогенная расчётная модель активной зоны реактора в коде MCU [2, 3].

Целью работы являлось: уточнение нейтронно-физических характеристик реактора РБТ-10/2 после его перевода на новый тип топлива с применением разработанной расчётной модели в коде MCU для актуализации информации, содержащейся в отчёте по обоснованию безопасности.

Список литературы

- [1] Исследовательские ядерные установки России [Текст] / под ред. Н. В. Архангельского, И. Т. Третьякова, В. Н. Федулина. - Москва: НИКИЭТ, 2012. - 326 с. Режим доступа в открытом доступе. — https://elib.biblioatom.ru/text/issledovatelskie-yadernye-ustanovki_2012/p105/ (дата обращения: 10.02.2026).
- [2] Гуревич М.И., Калугин М.А, Олейник Д.С., Шкаровский Д.А. Характерные особенности MCU-FR. Вопросы атомной науки и техники. Серия: Физика ядерных реакторов, 2016, № 5, с. 17–21. EDN: XEGPY
- [3] Ефимов Е.И., Пименов В.В. Разработка и тестирование расчётной модели реактора РБТ-10/2 для определения нейтронно-физических характеристик активной зоны. — Сборник трудов АО «ГНЦ НИИАР» (сборник научных статей). — Дмитровград: АО «ГНЦ НИИАР», 2020. Вып. 3. С. 37–45. EDN: MHBWPN.

УДК 544.18

Комплексная параметризация и верификация вычислительной модели диоксида рутения (RuO_2) для исследования альтермагнитных свойств

Жосан И.А.^{1,2}, Ломачук Ю.В.^{1,2}, Андреев О.Ю.^{2,1}

iigorezhosan@gmail.com

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В рамках данного исследования проведена комплексная параметризация вычислительной модели диоксида рутения (RuO_2), кристаллизующегося в структуре рутила, с целью последующего изучения его нетривиальных магнитных свойств, в частности, предполагаемого альтермагнитного состояния [1]. Работа включала два взаимодополняющих подхода: моделирование периодической структуры кристалла в программах CRYSTAL и кластерное моделирование с использованием методов DFT и CASSCF в программе ORCA.

Для корректного описания магнитных свойств в периодических расчетах была выполнена редукция симметрии кристаллической решетки, позволяющая моделировать различное магнитное упорядочение. Проведено сравнение эффективности ряда обменно-корреляционных функционалов, включая PBE0, PBE, r^2SCAN и M06, с целью выбора оптимального подхода для описания электронной структуры и энергетики различных магнитных фаз: антиферромагнитной (AFM), ферромагнитной (FM) и немагнитной (NM). Возможности программы CRYSTAL23 позволили провести моделирование неколлинейных спиновых конфигураций, что открывает перспективы для более детального описания сложной магнитной структуры RuO_2 , включая учет спин-орбитального взаимодействия [2].

На основе геометрии, полученной в периодических расчетах, были сконструированы молекулярные кластеры для расчета в программе ORCA. Для учета влияния кристаллического окружения в малоцентровых кластерах применен метод СТЕР. Из анализа волновых функций, полученных методом CASSCF, определены основные спектроскопические и магнитные характеристики: компоненты g -тензора, энергии $d-d$ переходов и параметры расщепления кристаллическим полем. На основе подхода нарушенной симметрии (broken symmetry) из разности полных энергий кластерных моделей рассчитаны константы магнитного обменного взаимодействия для модели Гейзенберга–Дирака–ван Флека (HDvV).

Полученные значения J_{ij} и параметры анизотропии формируют основу для построения спиновой модели и верификации альтермагнитного состояния в RuO_2 .

Работа выполнена при поддержке: Российского научного фонда (проект № 25-23-20046)

Список литературы

- [1] Chu R. Y. et al. Third-order nonlinear Hall effect in altermagnet RuO_2 //Physical review letters. – 2025. – Т. 135. – №. 21. – С. 216703.
- [2] Song J. et al. Spin-Orbit Coupling Driven Magnetic Response in Altermagnetic RuO_2 //Small. – 2025. – Т. 21. – №. 3. – С. 2407722.

УДК 53.08

Расчеты и практические исследования для создания входного трекера протонов для экспериментальной установки по изучению кластерной структуры ядер с использованием активных мишеней на СЦ-1000 в ПИЯФ (Гатчина)

Карпухина П.И.^{1, 2}, Маев О.Е.², Гаврилов Г.Е.²
karpukhina_pi@pnpi.nrcki.ru

¹ Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург, Россия

² НИЦ "Курчатовский институт" – ПИЯФ, г. Гатчина, Россия

Изучение кластерной структуры ядер является одной из фундаментальных задач в ядерной физике, тем не менее не потерявшей свою актуальность на настоящий момент. В ПИЯФ разработана методика экспериментального изучения данного процесса прямым наблюдением развала ядра с использованием активной мишени. Ранее этот процесс изучался только косвенными методами.

Целью предлагаемого эксперимента является изучение выбивания кластеров в неупругом рассеянии протонов на ядрах, используя газовую время-проекционную (ВПК) камеру в качестве активной мишени, где ВПК является одновременно мишенью и детектором частиц отдачи. Также с помощью пропорциональных камер будет измеряться угол рассеянного на мишени протона, это позволит впервые выполнить корреляционные измерения между параметрами частиц отдачи (кластеров) и углами рассеянных протонов.

В докладе будет представлен один из вариантов экспериментальной установки для изучения данного процесса в целом, а также конкретные работы по расчетам и исследованию трекера протонного пучка, состоящего из набора пропорциональных камер.

Список литературы

- [1] J. P. Burq et al. Nuclear Physics. 1983. B217. с. 285–335
- [2] Г.Д. Алхазов и др. Физика элементарных частиц и атомного ядра. 2022. Т. 53. вып. 3. с. 661
- [3] S. F. Biagi. "Magboltz 11". <http://magboltz.web.cern.ch/magboltz/>
- [4] O. Buneman, T. E. Cranshaw, J. A. Harvey, Canad. J. Res. A. Garfield. 1949. 27. 191.
- [5] Е. Н. Вольнин и др. Препринт ЛИЯФ-101. 1974.
- [6] E.N. Volnin et al. Phys. Lett. 1975. 55B. p. 409.
- [7] A.M. Poskanzer et al. Phys. Rev. 1971. C12. p. 527.
- [8] A.S. Hirsch et al. Phys. Rev. 1984. 29. p. 508.

УДК 544.183.2

Распределённый алгоритм двухкомпонентного релятивистского крамерс-неограниченного метода Хартри-Фока в приближении разложения единицы

Кашпурович Ю.В.^{1,2}, Олейниченко А.В.^{3,2}, Стегайлов В.В.^{1,2}

kashpurovich.iuv@phystech.edu

¹ МФТИ, Москва, Россия² ОИВТ РАН, Москва, Россия³ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

Работа посвящена реализации высокоэффективного масштабируемого алгоритма двухкомпонентного метода Хартри-Фока (ХФ) в приближении разложения единицы. Реализованный алгоритм может служить основой для развития DFT-кода, а также для получения начального приближения в рамках методов расчёта электронной структуры, учитывающих динамические корреляции. Приближение разложения единицы позволяет существенно ускорить самосогласованное решение уравнений Фока благодаря использованию трёхцентровых двухэлектронных кулоновских интегралов [1]. Разработанная реализация учитывает перестановочную симметрию этих интегралов, предполагает их полное хранение в оперативной памяти компьютера и опирается на эффективное использование библиотек интерфейса BLAS, а также библиотек `libcint` [2] и `libgrpp` [3].

В работе обсуждается применение предложенных ранее оптимизаций ограниченного метода ХФ [4] к двухкомпонентной версии, в которой с помощью гатчинских псевдопотенциалов [5] учитывается спин-орбитальное взаимодействие, приводящее к смешиванию α - и β -компонент спиновой части молекулярных орбиталей. Кулоновский вклад остаётся вещественным, тогда как обменная часть требует вычисления четырёх комплексных матриц плотности. Раздельная обработка вещественной и мнимой частей и повторное использование промежуточных массивов позволяют существенно оптимизировать алгоритм.

Двухкомпонентная версия метода уже была протестирована для кластера золота Au₂₀, однако необходимы дополнительные проверки и оптимизации.

Список литературы

- [1] I.O. Glebov, V.V. Poddubnyi. An effective algorithm of the Hartree–Fock approach with the storing of two-electron integrals in the resolution of identity approximation // Russian Journal of Physical Chemistry A. 2024. V. 98(4). p. 617–625.
- [2] Q. Sun. Libcint: An efficient general integral library for Gaussian basis functions // Journal of Computational Chemistry. 2015. V. 36(22). p. 1664–1671.
- [3] A. Oleynichenko *et al.* LIBGRPP: A library for the evaluation of molecular integrals of the generalized relativistic pseudopotential operator over Gaussian functions // Symmetry. 2023. V. 15(1). p. 197
- [4] I.V. Kashpurovich, A.V. Oleynichenko, V.V. Stegailov. MPI+OpenMP Implementation of Resolution-of-the-Identity Hartree-Fock Method Exploiting Permutational Symmetry of Three-Center Electron Repulsion Integrals // Supercomputing Frontiers and Innovations. 2026. In press.
- [5] A.V. Titov, N.S. Mosyagin. Generalized relativistic effective core potential: Theoretical grounds // International journal of quantum chemistry. 1999. V. 71(5). p. 359–401

УДК 539-184-28

КЭД расчеты g-фактора водородоподобных ионов: сравнение точного и приближенного выражений для однопотенциального вклада

Кочнев А.Н.¹, Сычков Д.В. В.В.¹, Малышев А.В. В.В.¹
st123526@student.spbu.ru

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В настоящей работе предложен оригинальный подход к вычислению вклада собственно-энергетических диаграмм в величину g-фактора связанного электрона для многозарядных водородоподобных ионов. Актуальность подобных исследований продиктована необходимостью достижения точности теоретических предсказаний, сопоставимой с прецизионными экспериментальными данными. Показательным примером здесь выступает определение массы электрона, успех которого был обеспечен сочетанием передовых теоретических и экспериментальных методов.

При рассмотрении диаграмм собственной энергии имеет место проблема наличия в них ультрафиолетовых расходимостей. Общепринятая процедура их устранения предполагает разложение электронных пропагаторов по числу взаимодействий с потенциалом ядра с последующим выделением расходящихся вкладов. Эти вклады анализируются в импульсном пространстве, где проводится их регуляризация и перенормировка. Оставшиеся конечные вклады рассчитываются в координатном пространстве с привлечением парциальных разложений, причем скорость сходимости последних, как правило выступает основным фактором, ограничивающим получаемую точность. В работе [1] была предпринята попытка перенести вычисление УФ-конечного однопотенциального вклада в импульсное представление, однако предложенные выражения отличались значительной сложностью и трудоемкостью практической реализации. Нами предложен ряд приближенных схем для данного вклада, развивающих методологию, первоначально примененную для расчета лэмбовского сдвига в одноэлектронных диаграммах [2] и впоследствии распространенную, например, на двухэлектронные системы [3]. Разработанные подходы позволяют достигать прецизионных значений на собственную энергию поправки к g-фактору для обширного диапазона атомных номеров ($Z = 5-79$) и различных состояний (1s, 2s, 2p_{1/2} и др.). Достигнутая точность на уровне 10^{-12} полностью удовлетворяет современным требованиям к вычислениям g-фактора в рамках квантовой электродинамики связанных состояний.

Суть предложенного приближения для однопотенциального вклада состоит в переносе потенциала ядра с электронной линии в вершины диаграммы, где примыкает фотонная линия. Разработанная техника может быть в дальнейшем востребована при анализе более сложных диаграмм высших порядков.

Список литературы

- [1] V.A. Yerokhin, P. Indelicato, V.M. Shabaev. Evaluation of the self-energy correction to the g factor of S states in H-like ions // Phys. Rev. A. 2004. V. 69. P. 052503.
- [2] J. Sapirstein, K.T. Cheng. Simplified partial wave expansion of the lamb shift // Physical Review A. 2023. V. 108. P. 042804.
- [3] A.V. Malyshev, E.A. Prokhorchuk, V.M. Shabaev. Convergence-acceleration approach to partial wave expansion of two-electron self-energy contributions to the Lamb shift // Phys. Rev. A. 2024. V. 109. P. 062802.

УДК 538.915

Построение фрагмента кристалла с СТЕР для периодической структуры на основе актинида (Th)

Красникова А.Э.¹, Хадеева П.А.¹, Титов А.В.¹

krasnikova-2004@inbox.ru

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

В настоящее время активно ведутся работы по созданию прецизионных часов на основе изомерного ядерного перехода [1]. Продвижение в этой области позволит не только решать практически важные задачи, но и поможет установить более жесткие ограничения на вариации фундаментальных констант: постоянной тонкой структуры, отношения массы протона к массе электрона.

Основным кандидатом для создания ядерных часов является низколежащий изомерный переход тория-229 с энергией 8.4 эВ. Одним из способов измерения этого перехода является внедрение ионов с ядром ^{229}Th в твердотельный кристалл. Кристалл должен иметь достаточно широкую запрещенную зону: как минимум 8.5 эВ. В работе [1] показано, что тонкие пленки на основе кристалла ThF_4 могут быть использованы для создания интегрированной и универсальной версии таких часов.

Моделирование электронной структуры кристаллического соединения и последующий расчет свойств, сконцентрированных вблизи ядра тяжелого атома, связано с рядом теоретических и практических трудностей. Для актинидов необходимо одновременно и с высокой точностью учитывать релятивистские и корреляционные эффекты. В отделе квантовой физики и химии НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ разработан метод «подстраиваемого-подсоединения» потенциала внедрения (compound-tunable embedding potential, СТЕР) [2,3], который позволяет свести анализ периодической структуры к изучению относительно небольшого фрагмента кристалла (кластера). Окружение кластера моделируется так, чтобы с высокой точностью воспроизводить электронную плотность в области вокруг центрального атома до его ближайшего окружения.

В данной работе проведено исследование электронной структуры кристалла тетрафторида тория. Для ThF_4 построены внедренные кластеры с СТЕР и проведен анализ спектроскопических параметров методом DFT-PBE0. В работе показана необходимость выполнения более точных расчетов фрагментов кристалла с использованием методов теории волновой функции и прецизионных вариантов псевдопотенциалов, поэтому в настоящее время проводятся пилотные расчеты методом связанных кластеров.

Список литературы

- [1] Zhang, Chuankun, Ooi, Tian. Frequency ratio of the Th nuclear isomeric transition and the Sr atomic clock // Nature. 2024. 09. V. 633. PP. 63–70.
- [2] Lomachuk Y. V., Maltsev D. A., Mosyagin N. S., Skripnikov L. V., Bogdanov R. V., Titov A. V. Compound-tunable embedding potential: which oxidation state of uranium and thorium as point defects in xenotime is favorable? // Phys. Chem. Chem. Phys. 2020. V. 22. PP. 17922–17931.
- [3] Maltsev D. A., Lomachuk Y. V., Shakhova V. M., Mosyagin N. S., Skripnikov L. V., Titov A. V. Compound-tunable embedding potential method and its application to calcium niobate crystal CaNb_2O_6 with point defects containing tantalum and uranium // Phys. Rev. B. 2021. May. V. 103. p. 205105.

УДК 539.19

Расчет матричных элементов спин-орбитального взаимодействия в методе связанных кластеров с многодетерминантным вакуумом (ic-MRCC)

Лосев М.И.^{1,3}, Олейниченко А.В.^{1,3}, Зайцевский А.В.^{1,3}

E-mail: losev.mi@phystech.su

¹ НИЦ «Курчатовский институт» — ПИЯФ, Гатчина, Россия² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет), Долгопрудный, Россия³ Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Одним из наиболее перспективных методов для соединений с несколькими открытыми электронными оболочками (неспаренным электронами) относится метод связанных кластеров с многодетерминантным вакуумным состоянием (ic-MRCC, internally contracted multireference coupled cluster). Поскольку ранее метод ic-MRCC использовался только для нерелятивистских задач, возможность расчёта матричных элементов спин-орбитального взаимодействия (COB) в рамках ic-MRCC актуальна и потенциально позволит расширить возможности метода, в том числе для расчётов тонкой структуры, описания смешивания состояний и спин-запрещённых переходов, интерпретации высокоточных спектроскопических данных, анализа изотопических сдвигов для извлечения свойств ядер из данных атомной спектроскопии и моделирования систем с выраженными релятивистскими эффектами. В настоящей работе спин-орбитальное взаимодействие описывалось в приближении прямого взаимодействия скалярных состояний.

Таблица 1 — Рассчитанные и экспериментальные значения спин-орбитального расщепления для основных состояний атома Si и молекулы SeH, см⁻¹.

Система		Si, состояние ³ P	SeH, состояние 2Π
Базис		cc-pCVTZ	cc-pCVQZ
(число электронов, число орбиталей)		(4, 4)	(3, 2)
Порядок разложения по амплитудам	0	64,6	1729,1
	1	69,6	1806,5
	2	68,4	1802,4
	3	68,4	1802,5
ic-MRCC [1]		72,5	1672,3
ic-MRCI [1]		76,2	1709,0
Mk-MRCC [2]		–	1707,9
Эксперимент		73,7	1764,4

По вычислительной стоимости реализованный вариант существенно выгоднее точных аналитических выражений для COB в ic-MRCC [1], и для изученных модельных систем отличия определяются выбором конкретного эффективного оператора спин-орбитального взаимодействия. Ограничения предложенной приближенной схемы обусловлены учетом лишь членов первого порядка по ТВ. Эта проблема принципиально может быть решена включением поправок второго и более высоких порядков, или, что более перспективно, переходом к полностью релятивистскому гамильтониану на всех этапах расчета.

Список литературы

- [1] Köhn A. [et al.]. Treatment of spin-orbit coupling with internally contracted multireference coupled cluster theory // Phys. Chem. Chem. Phys. 2025. V. 27(26). P. 13861-13869.
- [2] Mück L. A. [et al.]. Communication: Spin-orbit splittings in degenerate open-shell states via Mukherjee's multireference coupled-cluster theory: A measure for the coupling contribution // J. Chem. Phys. 2012. V. 136(11): 111103.

УДК 544.54:678.01

Статус проектов группы радиационного модифицирования материалов НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ

Лютова Ж.Б.^{1,2}.

zhanna.lutova@gmail.com

¹ Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет),
кафедра радиационной технологии, Санкт-Петербург, Россия

² НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

Деятельность группы радиационного модифицирования материалов отдела наноструктурированных материалов отделения перспективных разработок НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ базируется на комплексном использовании ионизирующего излучения для решения фундаментальных и прикладных задач в области медицинской химии, биотехнологии и материаловедения. Основным научным подходом является конвергенция радиационной химии, радиационного материаловедения, медицинской химии и компьютерного моделирования с целью решения междисциплинарных задач, обеспечивающих полный цикл разработки — от прогнозирования свойств вещества с помощью компьютерного моделирования до создания опытных образцов материалов с принципиально новыми характеристиками.

В области радиационного материаловедения ведутся работы по созданию биоразлагаемых полимерных мембран на основе полилактида для челюстно-лицевой хирургии [1]. Варьирование состава наполнителей и поглощенных доз электронно-лучевой обработки направлено на достижение контролируемого времени биodeградации и требуемых механических характеристик имплантатов. Разрабатываемые подходы к радиационной модификации биополимеров позволяют решать проблему их водорастворимости и биодоступности, что открывает перспективы их использования в качестве носителей для адресной доставки лекарственных средств и компонентов медицинских изделий, применяемых для локального лечения ран. Отдельное направление исследований посвящено изучению возможности применения радиационной обработки для стерилизации углеродных наночастиц при сохранении их функциональных свойств. Такие материалы перспективны для создания препаратов, нейтрализующих активные формы кислорода, а также в качестве компонентов полимерных композитов с улучшенными биологическими свойствами [2]. Значительные результаты получены в области модификации полиакрилонитрильных волокон: за счет радиационно-индуцированной сшивки удалось повысить выход остаточного угля на 10% и увеличить предел прочности в четыре раза, что существенно оптимизирует производство углеродных волокон.

Таким образом, применение радиационно-химических методов в сочетании с компьютерным моделированием позволяет создавать материалы с принципиально новыми свойствами для медицины и промышленности. Полученные результаты демонстрируют перспективность разработанных подходов для дальнейшего внедрения в клиническую практику и производство функциональных материалов.

Список литературы

- [1] Zernitckaia E. A. et al. In Vitro Analysis of Biodegradation Properties and Sterilization Stability of PLA Membranes for Bone Regeneration // Journal of Maxillofacial and Oral Surgery. – 2025. – С. 1-14.
- [2] Israpilova A. I. et al. Highly hydroxylated fullerenols C60 (OH) 36 as potential environmental pollutants: Evaluation of antioxidant activity in liver // South of Russia-Ecology Development. – 2025. – Т. 20. – №. 3. – С. 103-114.

УДК 544.541

Антиоксидантная активность как целевой показатель радиационной стойкости фуллеренолов в условиях электронного облучения

Маркова М.А.^{1,2}, Лютова Ж.Б.^{1,2}.
markovam50@gmail.com

¹ Санкт-Петербургский государственный технологический институт (технический университет),
кафедра радиационной технологии, Санкт-Петербург, Россия

² НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

Разработка новых эффективных подходов к защите биологических объектов от повреждающего действия ионизирующего излучения (ИИ) является важнейшей задачей радиационной биологии и медицины. Одним из наиболее перспективных направлений выступает создание радиопротекторов на основе наноматериалов, способных эффективно нейтрализовать активные формы кислорода (АФК) — ключевые медиаторы окислительного стресса, обусловленного радикальным повреждением клеточных структур.

Особое место в ряду радиопротекторных наноматериалов занимают полигидроксильрованные фуллерены - фуллеренолы. Благодаря уникальной молекулярной структуре с развитой системой сопряженных связей и наличием гидроксильных групп, они демонстрируют выраженную антиоксидантную активность, эффективно ингибируя радиационно-индуцированное окисление биомолекул [1].

Однако, для практического применения фуллеренолов в качестве ингибиторов радикальных процессов необходимо понимать их структурно-функциональную устойчивость по отношению к ионизирующему излучению в характерном для конкретных условий использования диапазоне доз. В рамках данной работы мы оценивали антиоксидантную активность фуллеренолов как ключевой потребительский показатель их радиационной стойкости при использовании в медицинских целях.

Исследуемый фуллеренол был получен методом двухстадийного гидроксильирования с высоким выходом конечного продукта (~ 80%). Структура синтезированного фуллеренола и количество присоединенных гидроксильных групп были подтверждены комплексом физико-химических методов (ИК-, ЯМР-спектроскопия, РФЭС, ТГА и элементный анализ)

Облучение кристаллов и водных растворов (в диапазоне концентраций 25-500 мкг/мл) фуллеренола было проведено на линейном импульсном ускорителе электронов (E=5 МэВ) дозами до 25 кГр.

Антирадикальные свойства фуллеренолов оценивались спектрофотометрическим методом в экспериментах с модельными стабильными свободными радикалами DPPH и ABTS. В качестве репрезентативных окислителей, соответствующих ключевым типам АФК in vivo были выбраны: гидроксильный радикал, супероксидный анион-радикал и синглетный кислород.

Экспериментально установлено, что синтезированные фуллеренолы сохраняют структурную целостность и способность к ингибированию образования широкого спектра свободных радикалов как до, так и после радиационного воздействия. Полученные данные свидетельствуют о выраженной радиационной стабильности данных соединений и подтверждают перспективность их применения в качестве основы для разработки эффективных радиопротекторных препаратов.

Список литературы

- [1] Kazmierska-Grebowska P. et al. Nanotechnology meets radiobiology: Fullerenols and Metallofullerenols as nano-shields in radiotherapy //Biomedicine & Pharmacotherapy. – 2025. – Т. 184. – С. 117915.

УДК 621.456.2

Опыт разработки ОТЦ блока №5 НВРАЭС для снижения радиационного нагружения КР

Медведева В.В.¹, Спиркин Е.И.¹, Гагаринский А.А.¹, Калинин Ю.П.¹, Осипова Е.С.¹.

Medvedeva_VV@nrcki.ru

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Большая часть парка энергетических реакторов в РФ сейчас, а в обозримом будущем доминирующая - реакторы ВВЭР. Важным аспектом при определении сроков безопасной эксплуатации реактора типа ВВЭР является гарантированная механическая целостность корпуса реактора (КР) в течение всего срока службы. Цель работы – выбор вариантов оптимизированного топливного цикла (ОТЦ), в части сокращения флюенса нейтронов высоких энергий КР, 5-го энергоблока НВРАЭС для повторного продления срока эксплуатации КР.

Ключевое направление снижения радиационного нагружения металла КР и внутрикорпусных элементов реактора является снижение радиальной утечки нейтронов высоких энергий. Образование и накопление радиационных дефектов в элементах конструкции реактора вследствие воздействия потоков быстрых нейтронов определяется, в основном, дозой облучения. Известный и эффективный способ снижения потока быстрых нейтронов КР обеспечивается уменьшением мощности источника нейтронов благодаря размещению в периферийном ряду активной зоны ТВС с наиболее выгоранием топливом, иными словами посредством выбора компоновочных решений топливных загрузок.

В поисках компоновок активной зоны ОТЦ рассматривались различные, экономически приемлемые по условиям эксплуатации, варианты размещения ТВС с наибольшим выгорания топлива в периферийном ряду активной зоны. Для достижения заметного эффекта рассматривались отработанные изменения конструкции твэл и ТВС, в целом, внедрённые на серийных реакторах ВВЭР. Основной задача - поиск конструкций твэл и ТВС, которые обеспечивая необходимую ураноёмкость загрузки и требуемую энерговыработку, позволяли бы во всех ячейках периферийного ряда активной зоны реактора размещать ТВС с наибольшим выгоранием топлива. Для этого рассматривались варианты с различным количеством и средним обогащением свежих загружаемых ТВС различных конструкций (изменение геометрии топливной таблетки и оболочки твэл, высота топливного столба, число твэл в ТВС, сдвиг топливного столба по высоте и др.).

Разработаны и предложены базовый и альтернативный варианты ОТЦ на основе существующей конструкции твэл и ТВС. Их реализация позволяет дополнительно продлить срок службы КР по условиям достижения предельного расчётного флюенса нейтронов быстрых энергий до 6 кал. лет. Изменение геометрии топливной таблетки и повышение максимального обогащения топлива до 5%мас. позволяют реализовать модернизированный и перспективный ОТЦ, которые, при своевременном внедрении, продлят срок службы КР до 8 лет.

Нейтронно-физические расчёты по выбору компоновок топливных загрузок, анализу влияния изменений конструкции твэл и ТВС выполнены с использованием программ БИПР-7А (паспорт аттестации № 468 от 30.05.19), ПЕРМАК-А (паспорт аттестации № 469 от 30.05.19). Комплекс расчётов по оценке пространственного распределения флюенса быстрых нейтронов КР выполнен по программе Катрин-2.5 (паспорт аттестации ПС № 357 от 17.04.14) коллективом авторов: Б.А.Гурович, Д.Ю.Ерак, В.Н.Кочкин, А.М.Тимофеев, П.П.Панфёров, А.А.Решетников, Д.Ю.Махотин и Л.В.Кравчук (НИЦ «Курчатовский институт»).

Список литературы

- [1] Номенклатура эксплуатационных нейтронно-физических расчётов и измерений для топливных загрузок реакторов ВВЭР-1000 и ВВЭР-1200. Требования. ВНИИАЭС, СТО 1.1.1.06.003.1941-2022 М., 2022

УДК 539.1

Исследование влияния сверхтонкого взаимодействия на изменение поляризации при рассеянии мюона на голом ядре

Моисеев И.А.^{1,2}, Андреев О.Ю.^{1,2}, Васильева Д.М.¹,
st095785@student.spbu.ru

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Задача рассеяния электронов и мюонов в атомных системах остаётся значимой по сей день. Она представляет важность для астрономических исследований, изучения материалов или элементарных частиц. Обычно в таких исследованиях пренебрегают сверхтонкими взаимодействиями, однако подобный подход не может быть применим всегда.

Первое описание релятивистского рассеяния электронов кулоновским центром было представлено в работах [1, 2]. Первый численный расчёт параметров, описывающих изменение поляризации рассеянным электроном при возможности обмена спином с рассеивающим центром [3], был проведён нашей командой в работе [4].

В текущем исследовании было рассмотрено упругое рассеяние пучка частиц, а именно мюонов и анти-мюонов, на голом ядре таких элементов как: $^{17}_8\text{O}$, $^{35}_{17}\text{Cl}$, $^{113}_{49}\text{In}$, $^{151}_{63}\text{Eu}$, $^{209}_{83}\text{Bi}$, $^{235}_{92}\text{U}$, для нескольких характерных скоростей (энергий) налетающих частиц. Распределение заряда ядра было учтено в модели распределения Ферми, в качестве сверхтонкого взаимодействия выступало дипольное магнитное взаимодействие. Распределение заряда ядра учитывалось во всех порядках теории возмущения, когда как магнитное дипольное взаимодействие – только в первом порядке. Влияние поправок проверялось на изменении поляризации частиц, представленных в зависимости от угла рассеяния.

В результате расчётов было выявлено, что поправки имеют существенное значение, поэтому ими нельзя пренебрегать. Учёт распределения заряда ядра становится важным уже для малых скоростей. Магнитное дипольное взаимодействие же проявляет себя в случае высоких энергий для ядер с большим магнитным моментом и спином. Наибольшее влияние сверхтонкое взаимодействие оказывает на проекцию поляризации вдоль начального импульса частицы.

Было выявлено, что ядро может приобрести значительную поляризацию после рассеяния. Данный результат даёт понимание механизмов экспериментального определения поляризации ядра.

Список литературы

- [1] Nevill Francis Mott. The scattering of fast electrons by atomic nuclei // Proc. R. Soc. Lond. 1929. V. A124. P. 425-442.
- [2] Nevill Francis Mott. The polarisation of electrons by double scattering // Proc. R. Soc. Lond. 1932. V. A135. P. 429-458.
- [3] P. G. Burke and J. F. B. Mitchell. Spin-polarization in the elastic scattering of electrons by one-electron atoms // Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics. 1974. V. 7. No. 2. P. 214–228.
- [4] Vasileva, D. M. and Lyashchenko, K. N. and Voitkiv, A. B. and Yu, D. and Andreev, O. Yu. Resonant elastic scattering of polarized electrons on H-like ions // Phys. Rev. A. 2021. V. 104. Is. 5. P. 052808.

УДК 530.145.7, 539.183.4, 539.184.28

Анализ релятивистских эффектов в межэлектронном взаимодействии в многозарядных ионах

Мошкин А.Д.^{1,2}, Волотка А.В.², Глазов Д.А.^{2,3}, Зиненко Д.В.¹, Малышев А.В.^{1,3}
a.d.moshkin@gmail.com

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

² Университет ИТМО, Санкт-Петербург, Россия

³ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

Многозарядные ионы служат исключительной платформой для тестирования квантовой электродинамики в связанных состояниях [1]. Ярким примером является исследование лэмбовского сдвига в литиеподобном уране [2]. Кроме того, за последние годы экспериментальная точность измерения g -фактора многозарядных ионов достигла уровня $10^{-9} - 10^{-11}$ [3–5]. Эти исследования, в комбинации с прецизионными теоретическими расчётами, позволили получить наиболее точное значение массы электрона [6]. Дальнейший прогресс теории и эксперимента позволит проводить независимое определение постоянной тонкой структуры [7].

В данной работе исследуются корреляционные эффекты для гелие-, литие- и бороподобных ионов. Рассматривается сходимость рядов теории возмущений для поправки к энергии в зависимости от потенциала нулевого приближения. Также проведён анализ релятивистского разложения для поправки на межэлектронное взаимодействие к g -фактору. Для расчёта поправок высшего порядка использовалась рекурсивная формулировка теории возмущений [8].

Работа выполнена при поддержке: РНФ грант №23-62-10026

Список литературы

- [1] Volotka A.V. et al. Progress in quantum electrodynamics theory of highly charged ions // Ann. Phys. 2013. V. 525. P. 636.
- [2] Shabaev V.M. Progress in quantum electrodynamics theory of highly charged ions // Phys.-Usp. 2008. V. 51. P. 1175.
- [3] Sturm S. et al. g Factor of Hydrogenlike $^{20}\text{Si}^{13+}$ // Phys. Rev. Lett. 2011. V. 107. P. 023002.
- [4] Arapoglou I. et al. The g -factor of Boronlike Argon $^{40}\text{Ar}^{13+}$ // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 122. P. 253001.
- [5] Glazov D.A. et al. g Factor of Lithiumlike Silicon: New Challenge to Bound-State QED // Phys. Rev. Lett. 2019. V. 123. P. 173001.
- [6] Sturm S. et al. High-precision measurement of the atomic mass of the electron // Nature. 2014. V. 506. P. 467.
- [7] Yerokhin V.A. et al. g Factor of Light Ions for an Improved Determination of the Fine-Structure Constant // Phys. Rev. Lett. 2016. V. 116. P. 100801.
- [8] Glazov D.A., Malyshev A.V., Volotka A.V. et al. Higher-Order Perturbative Relativistic Calculations for Few-Electron Atoms and Ions // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 2017. V. 408. P. 46–49.

УДК 539.19

Релятивистские методы связанных кластеров для высокоточного моделирования электронной структуры соединений тяжёлых элементов

Олейниченко А.В.^{1,2}, Зайцевский А.В.^{1,3}

oleynichenko_av@npipi.nrcki.ru

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия² Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет),
Долгопрудный, Россия³ Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Одним из наиболее перспективных средств неэмпирического моделирования обширных классов низколежащих электронных состояний систем, включающих атомы нижней части периодической таблицы, является релятивистский метод связанных кластеров. В частности, версия метода в формулировке для пространства Фока показала себя высокоэффективным средством получения информации об энергетических характеристиках и, с недавних пор, вероятностях электронных переходов, что позволяет уверенно использовать этот метод как инструмент решения задач теоретической спектроскопии.

Кратко рассмотрены современные направления развития методов связанных кластеров для моделирования электронных состояний и свойств систем с открытыми оболочками. Излагаются подходы, направленные на увеличение точности моделирования малых молекул посредством учёта вкладов трёхкратных возбуждений в кластерный оператор [1], а также обобщения метода на случай электронных состояний с тремя неспаренными электронами. В качестве примера приложения разработанных теоретических моделей и прикладных пакетов программ в ходе выступления будут представлены недавние расчёты релятивистским методом связанных кластеров систем электронных состояний малых молекул HI^+ , HI^{2+} , KCs , AcF , AcOH^+ и вероятностей $E1$ -переходов между ними. Также будут представлены результаты пилотного приложения метода связанных кластеров к моделированию локальных возбуждений на примесных центрах Ce^{3+} и Th^{3+} в кристаллической матрице минерала ксенотима YPO_4 .

В завершение планируется рассмотреть дальнейшие пути развития метода связанных кластеров для многомерных модельных пространств, которые представляются наиболее перспективными с точки зрения повышения его вычислительной эффективности, расширения области применимости и круга доступных для моделирования типов электронных состояний. Особое внимание уделяется версии релятивистского метода связанных кластеров с понижением ранга тензоров [2], открывающей возможности прецизионного релятивистского моделирования систем, включающих десятки атомов.

Работа выполнена при поддержке: гранта Российского научного фонда № 24-73-00076, <https://rscf.ru/project/24-73-00076/>.

Список литературы

- [1] A.V. Oleynichenko, A. Zaitsevskii. Relativistic Fock-space multireference coupled cluster theory with full iterative triples for the one-, two-, and three-hole sectors // J. Chem. Phys. 2025. V. 163. p. 224123.
- [2] A.V. Oleynichenko, A.S. Rumiantsev, A. Zaitsevskii, E. Eliav. On the rank-reduced relativistic coupled cluster method // J. Chem. Phys. 2025. V. 163. p. 044113.

УДК 53.043

Радиационные процессы второго порядка в КЭД с нестабильным вакуумом

Перельгин Е.В.¹, Александров И.А.¹
st117433@student.spbu.ru

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Доклад посвящен процессам излучения фотонов из вакуума в сильном электромагнитном поле. Это явление возникает в том случае, когда сильное внешнее поле нарушает стабильность вакуума, то есть приводит к рождению электрон-позитронных пар [1, 2]. Хотя в первом порядке по постоянной тонкой структуры α данный эффект исследовался неоднократно (см. работу [3] и ссылки в ней), во втором порядке по α излучение фотонов, насколько нам известно, в литературе подробно не обсуждалось. С другой стороны, анализ эффектов второго порядка чрезвычайно важен для развития самосогласованного теоретического описания явления вакуумного двулучепреломления в сильных полях [4].

В первом порядке вакуумное излучение фотонов описывается двумя вкладками [3]: диаграмма типа “головастик”, в которой фотоны генерируются электронным током во внешнем поле, и диаграмма типа “вершина” с участием реальных фермионов.

В этой работе мы определили все возможные каналы излучения фотонов во втором порядке по α . Для этого вычислялось среднее значение оператора плотности числа фотонов в конечном состоянии посредством неравновесной теории возмущений, развитой в работе [5] (см. также [2]). Вычисления производились на языке неравновесной диаграммной техники, а результаты были также представлены в терминах фейнмановских функций Грина и решений уравнения Дирака во внешнем поле. Кроме того, были описаны все вклады в среднее электромагнитное поле в первом и третьем порядке по заряду электрона.

Полученные результаты существенно расширяют теоретические представления о радиационных эффектах в сильном поле, нарушающем стабильность вакуумного состояния. Мы ожидаем, что развитие теории в этом направлении будет иметь важное значение для экспериментальных исследований нелинейных эффектов квантовой электродинамики в сильных полях.

Список литературы

- [1] J. Schwinger. On gauge invariance and vacuum polarization // Phys. Rev. 1951. V. 82. p. 664.
- [2] Д.М. Гитман, Е.С. Фрадкин, Ш.М. Шварцман. Квантовая электродинамика с нестабильным вакуумом. М.: Наука, 1991. 293 с.
- [3] I.A. Aleksandrov, G. Plunien, and V.M. Shabaev. Photon emission in strong fields beyond the locally-constant field approximation // Phys. Rev. D. 2019. V. 100. p. 116003.
- [4] S. Bragin, S. Meuren, C.H. Keitel, and A. Di Piazza. High-energy vacuum birefringence and dichroism in an ultrastrong laser field // Phys. Rev. Lett. 2017. V. 119. p. 250403.
- [5] E.S. Fradkin and D.M. Gitman. Furry picture for quantum electrodynamics with pair creating external field // Fortschr. Phys. 1981. V. 29. p. 381.

УДК 539.1.04

Дозиметрическое планирование экспериментов по бор-нейтронозахватной терапии

Петруня Д.С.^{1,2}, Азаркин М.Ю.², Киракосян М.Р.², Раздрогова Я.В.², Касатов Д.А.³,
Таскаев С.Ю.^{1,3,4}, Завестовская И.Н.^{1,2}.

d.petrunya@lebedev.ru

¹ НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

² Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук, Москва, Россия

³ Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН, Новосибирск, Россия

⁴ Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

Бор-нейтронозахватная терапия (БНЗТ) – форма бинарной радиотерапии, обеспечивающая избирательное уничтожение клеток злокачественных опухолей путем накопления в них стабильного изотопа ^{10}B и последующего облучения низкоэнергетическими нейтронами. В основе технологии БНЗТ лежит ядерная реакция радиационного захвата теплового нейтрона ядром изотопа бора-10 ^{10}B (n, α) ^7Li с выделением энергии 2.79 МэВ. Сечение данной реакции на тепловых нейтронах составляет величину $\sigma = 3837$ барн. Продукты ядерной реакции – ядро лития и α -частица – обладают высоким темпом торможения и суммарным пробегом в биологической ткани около 12 мкм. Таким образом, при селективном накоплении изотопа ^{10}B внутри клеток опухоли, БНЗТ обеспечивает избирательность воздействия на клеточном уровне и высокую относительную биологическую эффективность, позволяя проводить лечение агрессивных и радиорезистентных форм рака.

В работе представлены результаты расчета пространственных распределений компонент поглощенной дозы для различных сценариев экспериментальных исследований на ускорительном источнике нейтронов VITA (Институт ядерной физики им. Г.И. Будкера СО РАН, г. Новосибирск). Для проведения расчётных исследований в программной среде Geant4 (версия 11.2.1) была создана модель нейтроногенирующей системы установки VITA [1], получены расчётные пространственные и энергетические распределения интенсивности потока нейтронов. Модель была верифицирована путем сравнения результатов расчета с экспериментальными измерениями с помощью компактных нейтронных счетчиков.

Для расчета дозовых нагрузок на клетки и животных были разработаны программные фантомы различных биологических объектов [2]. Получены пространственные распределения компонент поглощенной дозы, проведена оптимизация конфигурации нейтронного поля и режимов облучения. С целью подтверждения эффективности БНЗТ при лечении домашних животных для фантома головы кошки построены дозовые карты поглощенных и эквивалентных компонент доз, определен терапевтический коэффициент БНЗТ. Разработанные программные фантомы и верифицированная модель нейтроногенирующей системы установки VITA создают основу для прецизионного дозиметрического планирования и последующей оптимизации экспериментальных протоколов БНЗТ.

Работа выполнена при поддержке: гранта Российского научного фонда № 24-62-00018.

Список литературы

- [1] Азаркин М.Ю., Завестовская И.Н., Киракосян М.Р., Петруня Д.С., Касатов Д.А., Коновалова В.Д., Таскаев С.Ю. Оценка параметров нейтронного поля на установке VITA с помощью моделирования в Geant4 // Краткие сообщения по физике ФИАН. 2025. Т. 52. С. 10.
- [2] Петруня Д.С., Азаркин М.Ю., Завестовская И.Н., Касатов Д.А., Киракосян М.Р., Раздрогова Я.В., Таскаев С.Ю. Письма в ЖТФ. 2026. Т. 52. С. 16.

УДК 539.194

Релятивистский метод связанных кластеров с пониженным рангом: трехкратные возбуждения

Румянцев А.С.^{1,2}, Олейниченко А.В.^{1,3}, Зайцевский А.В.^{1,4}
attoatom@gmail.com

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

³ Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет, Долгопрудный, Россия)

⁴ Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Высокоточное моделирование электронной структуры материалов с f-элементами (лантаноидами и актиноидами) требует одновременного учета релятивистских и корреляционных эффектов. Наиболее эффективными инструментами в этой области выступают подходы, базирующиеся на теории волновой функции, такие как релятивистские методы связанных кластеров (СС). Тем не менее, применение этих методов к подобным системам связано с высокой ресурсоемкостью вычислений. Снизить вычислительные затраты позволяют тензорные разложения для компактного хранения данных и оптимизация алгоритмов моделирования.

Уравнения релятивистского метода связанных кластеров в приближении одно- и двукратных возбуждений с учетом трехкратных возбуждений на пертурбативном уровне (CCSD(T)) были сформулированы в терминах диаграмм Голдстоуна. Как и в нерелятивистском случае [1, 2], разложение Таккера тензора трехкратных кластерных амплитуд имеет вид:

$$t_{ijk}^{abc} \approx \sum_{XYZ} T_{XYZ} U_{ai}^X U^Y b_j U^Z c_k, \quad (1)$$

где U_{ai}^X — проектор на подпространство сжатых трехкратных амплитуд, а T_{XYZ} — тензор сжатых трехкратных амплитуд. Благодаря новому подходу сложность алгоритма получения проекторов удалось снизить с $O(N^6)$ до $O(N^5)$.

С использованием полученных проекторов пертурбативная поправка, учитывающая трехкратные возбуждения, была переформулирована в терминах тензора сжатых амплитуд и разложения двухэлектронных интегралов. Это позволило снизить вычислительную сложность релятивистского метода CCSD(T) с $O(N^7)$ до $O(N^6)$, где N — количество молекулярных спинов. Выполнена программная реализация уравнений методов RR-RCCSD(T) и RR-CCSDT-1b, с помощью которой проведены пилотные расчеты различных соединений.

Работа выполнена при поддержке: Российского научного фонда (грант № 24-73-00076, <https://rscf.ru/project/24-73-00076/>).

Список литературы

- [1] Lesiuk M. Efficient singular-value decomposition of the coupled-cluster triple excitation amplitudes // J. Comput. Chem. 2019. Т. 40, № 12. с. 1319–1332.
- [2] Lesiuk M. Implementation of the coupled-cluster method with single, double, and triple excitations using tensor decompositions // J. Chem. Theory Comput. 2019. V. 16, n. 1. p. 453–467.

УДК 53

Заметки об алгоритме Дирака-Бергманна для гамильтонового формализма калибровочных теорий

Руссков К.А.^{1,2}

E-mail: kerill.russ42alex@gmail.com

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Основная цель данной работы — методологический анализ алгоритма Дирака—Бергманна [1–4], процедуры, используемой для построения гамильтоновой формулировки систем со связями. Несмотря на важность этого алгоритма, некоторые ключевые аспекты его применения к калибровочным системам зачастую упускаются из виду в литературе

В настоящей работе показывается, что при переходе от полного гамильтониана к расширенному физическая информация, соответствующая связанным модам, теряется, если не произвести корректное переопределение калибровочно-инвариантных величин. Характерным примером является электродинамика, в которой закон Гаусса, записанный в терминах исходных переменных, в таком случае становится нефизическим [5, 6].

Кроме того, мы изучаем справедливость стандартной формулировки гипотезы Дирака, согласно которой все связи первого рода являются независимыми генераторами калибровочных преобразований. В контексте теории поля такая формулировка может вводить в заблуждение. Мы показываем, что на уровне полного гамильтониана генератор калибровочных преобразований в действительности строится как определенная комбинация первичных и вторичных связей первого рода, в то время как гипотеза Дирака в общем случае справедлива только для расширенного гамильтониана. Наконец, мы устанавливаем, что необходимое переопределение инвариантов в подходе с расширенным гамильтонианом эквивалентно репараметризации переменных, являющихся величинами второго рода по отношению к первичным связям, посредством новых произвольных переменных.

Список литературы

- [1] Dirac, P.A.M., Generalized Hamiltonian Dynamics. // Canadian Journal of Mathematics 1950. 2. 132.
- [2] Dirac, P.A.M., Generalized Hamiltonian Dynamics. // Proceedings of the Royal Society A. 1958. 2. 132.
- [3] Bergmann, P. G. and Brunings, J. H. M., Non-Linear Field Theories II. Canonical Equations and Quantization // Reviews of Modern Physics. 21. 480. 1949.
- [4] Dirac, P.A.M., Lectures on Quantum Mechanics // Dover Publications, Inc, New York 2001, Originally published: Belfer Graduate School of Science, Yeshiva University, New York, 1964.
- [5] Golovnev, A., On the role of constraints and degrees of freedom in the Hamiltonian formalism. // Universe 9. 2003. 101.
- [6] Golovnev, A. On the degrees of freedom count on singular phase space submanifolds. // International Journal of Theoretical Physics. 2024 V. 63. No. 212.

УДК 544.18

Исследование основного состояния молекулы СО в широком интервале межатомных расстояний

И.М. Савельев¹, А.В. Олейниченко^{2,3}, М.И. Лосев^{2,3}, А.В. Зайцевский^{2,4}, А.В. Столяров⁴,
В.В. Мешков⁴, В.М. Шабаев^{1,2}

i.savelev@spbu.ru

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

² НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

³ Московский физико-технический институт, Долгопрудный, Россия

⁴ МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия

Монооксид углерода (СО) является одной из наиболее распространенных двухатомных молекул во Вселенной и ключевым загрязнителем атмосферы Земли, что делает точное знание его спектральных характеристик критически важным для астрофизики и экологического мониторинга. Особую сложность представляет основное электронное состояние $X^1\Sigma^+$, которое уже при умеренных межатомных расстояниях (R) плохо описывается в рамках одной конфигурации. Это создает трудности для построения точных кривой потенциальной энергии (КПЭ) и функции дипольного момента (ФДМ) в широком интервале R , необходимых для предсказания спектров высоковозбужденных колебательных уровней.

В нашей работе [1] выполнено систематическое исследование КПЭ и ФДМ основного состояния СО в интервале $R \in [0.7; 3.0]$ Å с использованием передового многоссылочного метода связанных кластеров (ic-MRCC). Разработанная схема расчетов позволила воспроизвести все экспериментально известные колебательные уровни ($v = 0-41$) с рекордной для теоретических подходов точностью — отклонения не превышают 15 см^{-1} . Полученная ФДМ хорошо согласуется с полуэмпирическими данными [2, 3] вблизи равновесного расстояния (≈ 1.128 Å), однако демонстрирует систематическое расхождение с ними вплоть до 0.1 D при $R > 1.8$ Å, где отсутствуют надежные экспериментальные данные. В работе показано, что это расхождение не связано с недостаточным учетом электронной корреляции или неполнотой базисных наборов, что указывает на возможную неточность существующих полуэмпирических экстраполяций и необходимость новых прецизионных экспериментов для переходов с $v > 7$.

Работа представляет собой всестороннюю проверку и демонстрацию возможностей метода ic-MRCC, подтверждающую, что данный подход является мощным и надежным инструментом для высокоточного расчета не только энергий, но и других свойств молекул со сложной электронной структурой. Полученные в ходе исследования КПЭ и ФДМ задают новый стандарт точности и могут служить основой для создания улучшенных полуэмпирических моделей и предсказания полных списков спектральных линий для высоковозбужденных колебательных состояний молекулы СО.

Работа выполнена при поддержке: Гранта №22-62-00004 Российского научного фонда.

Список литературы

- [1] I.M. Savelyev et al. // J. Chem. Phys. 2025. V. 163. No. 19.
- [2] V.V. Meshkov et al. // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 2022. V. 280. P. 108090.
- [3] V.V. Meshkov, E.A. Pazyuk, A.V. Stolyarov // Mol. Phys. 2024. P. e2429740.

УДК 530.1

Дальнодействующее взаимодействие в рамках формализма квантовой электродинамики

Соловьев Д.А.^{1,2}

d.solovyev@spbu.ru

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия² НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

В настоящей работе повторно анализируется дальнодействующее взаимодействие между двумя атомами. В рамках строгого квантовоэлектродинамического подхода обсуждается механизм возникновения дисперсионных сил [1–3]. Хорошо известно, что описание дальнодействующего дисперсионного взаимодействия может быть сведено к рассмотрению фейнмановских диаграмм двухфотонного обмена. Именно этот подход лежит в основе многих исследований двухчастичных взаимодействий для систем, не обладающих собственным дипольным моментом.

Помимо учёта внутриатомной структуры при изучении дальнодействующих сил, следующим шагом является обобщение на случай взаимодействий, индуцированных тепловым окружением. Как правило, при этом используется феноменологический подход [4]. Однако, применяя формализм квантовой электродинамики при конечных температурах, мы пересмотрели дальнодействующие потенциалы взаимодействия, индуцированные тепловым излучением. Исследованы различные асимптотические режимы как для основного, так и для высоковозбуждённых состояний атома водорода. Проведённый анализ показал, что выражения, полученные ранее в рамках феноменологической экстраполяции от случая нулевой температуры к случаю конечной температуры, демонстрируют иное асимптотическое поведение и приводят к завышенным результатам по сравнению с данными строгого квантовоэлектродинамического подхода при конечных температурах [5].

Кроме того, в рамках квантовой электродинамики при конечных температурах раскрыта природа возникновения магнитодипольного дисперсионного взаимодействия и обсуждаются индуцированные тепловым окружением дальнодействующие магнитные взаимодействия.

Работа выполнена при поддержке: грант РНФ №25-22-00625.

Список литературы

- [1] H.B.G. Casimir, D. Polder. The Influence of Retardation on the London-van der Waals Forces // Phys. Rev. 1948. V. 73. p. 360.
- [2] И.Е. Дзялошинский, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, Л. П. Общая теория ван-дер-ваальсовых сил // Успехи физических наук. 1961. V. 73. Р. 381.
- [3] В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. Квантовая электродинамика // Физматлит. Наука, 2002
- [4] Е.М. Лифшиц. Теория молекулярных сил притяжения между твердыми телами // ЖЭТФ. 1955. Т. 29. с. 94.
- [5] T. Zaliutdinov, D. Solovyev. Long-range interaction of hydrogen atoms at finite temperatures // Phys. Rev. A. 2024. V. 109. p. 012816.

УДК 539-184-28

КЭД расчеты g -фактора водородоподобных ионов: приближенный учет двух-потенциального вклада.

Сычков Д.В.¹, Кочнев А.Н.¹, Малышев А.В.¹
st106890@student.spbu.ru

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Исключительная точность квантовой электродинамики (КЭД) наиболее ярко проявляется в расчётах аномального магнитного момента электрона, где теоретические предсказания и результаты экспериментов совпадают с точностью, недостижимой ни в одной другой области физики, что делает КЭД эталоном предсказательной силы. Методы квантовой электродинамики, позволяющие рассчитать поправку на собственную энергию, сталкиваются с проблемой медленной сходимости парциальных разложений для вкладов, вычисляемых в координатном представлении. Для решения этой проблемы необходимо развивать методы, ускоряющие сходимость парциального разложения.

В данной работе рассматривается вершинная диаграмма Фейнмана, которая описывает поправку на собственную энергию к g -фактору связанного электрона в многозарядных ионах. В таких системах константа связи $\alpha Z \sim 1$, поэтому необходимо производить расчет непертурбативно по этому параметру. При анализе этой диаграммы используется разложение пропагатора связанного электрона по числу взаимодействий с кулоновским полем ядра, при этом отдельные слагаемые исследуются как в координатном пространстве, так и в импульсном [1]. Это позволяет избежать ультрафиолетовой расходимости данной диаграммы.

В импульсном представлении вычисление отдельных слагаемых, начиная с двух-потенциального вклада, сталкивается с отсутствием замкнутых аналитических выражений, что требует перехода к приближенному представлению таких слагаемых с использованием вкладов более низкого порядка. Основная идея нового метода состоит в выделении двух-потенциального вклада, отвечающего за медленную сходимость, и аппроксимация его с помощью нуль-потенциального и одно-потенциального вклада. Приближенные слагаемые вычисляются в замкнутом виде в импульсном пространстве. При этом оставшаяся, неучтенная часть демонстрирует значительно лучшую сходимость.

Применение схожего подхода ранее было продемонстрировано при вычислении вклада диаграммы собственной энергии в лэмбовский сдвиг [2]. Подобные методы также с успехом применялись к расчету вкладов двухэлектронных [3] и двухпетлевых [4,5] диаграмм собственной энергии. В работе предложен общий аналитический вывод импульсных и угловых интегралов, что позволяет вычислять поправку на собственную энергию к g -фактору водородоподобных ионов в произвольных состояниях.

Список литературы

- [1] V. A. Yerokhin et al., Phys. Rev. A 69, 052503 (2004).
- [2] J. Sapirstein, K. T. Cheng, Phys. Rev. A 108, 042804 (2023).
- [3] V. Malyshev et al., Phys. Rev. A 109, 062802 (2024)
- [4] V. A. Yerokhin et al., Phys. Rev. A 133 251803 (2024).
- [5] V. A. Yerokhin et al., Phys. Rev. A 111, 042820 (2025).

УДК 539.194

Аналитические градиенты энергии по координатам ядер в рамках двухкомпонентного квазирелятивистского метода Хартри-Фока в приближении разложения единицы

Титаренко Д. И.¹, Олейниченко А. В.^{2,1}
titarenko.di@phystech.edu

¹ Московский физико-технический институт (НИУ), Москва, Россия

² НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

Для успешного решения задач оптимизации геометрий молекул и расчёта частот нормальных колебаний, а также в методе неэмпирической молекулярной динамики для вычисления сил, действующих на атомы, необходимы эффективные методы расчёта градиентов электронной энергии по координатам ядер. Кроме того, требуются высокоточные и эффективные двухкомпонентные квазирелятивистские методы в приближении разложения единицы, основанные на обобщённых псевдопотенциалах. Ранее в работах [1, 3] были получены аналогичные выражения для градиентов, однако лишь для нерелятивистского случая.

Дифференцирование выведенного в [3] выражения для электронной энергии в рамках двухкомпонентного квазирелятивистского метода Хартри-Фока, даёт искомый градиент:

$$E^a := \frac{\partial E}{\partial X_a} = V_{nn}^a + \sum_{\mu\nu} \left[\left(\sum_{\gamma}^{\{0,x,y,z\}} D_{\mu\nu}^{(\gamma)} \frac{\partial h_{\mu\nu}^{(\gamma)}}{\partial X_a} \right) - S_{\mu\nu}^a \left(R_{\mu\nu}^{(0)} + R_{\mu\nu}^{(x)} \right) \right] + \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu\lambda\sigma} \left[D_{\mu\nu}^{(0)} D_{\lambda\sigma}^{(0)} - \frac{1}{2} \sum_{\gamma}^{\{0,x,y,z\}} D_{\mu\sigma}^{(\gamma)} D_{\lambda\nu}^{(\gamma)} \right] (\mu\nu|\lambda\sigma)^a \quad (2)$$

где $S_{\mu\nu} = \langle \phi_\mu | \phi_\nu \rangle$, ϕ_μ – базисные функции, V_{nn} – энергия ядер-ядерного отталкивания, $h_{\mu\nu}^{(\gamma)}$ обозначают компоненты гамильтониана $h_{\mu\nu}$ при его разложении по матрицам Паули, N_e – количество электронных спиноров; $R_{\mu\nu}^{(0)}$, $R_{\mu\nu}^{(x)}$, $D_{\mu\nu}^{(\gamma)}$ имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} R_{\mu\nu}^{(0)} &= \sum_i^{N_e} \epsilon_i \left\{ \left(C_{\mu i}^{(\alpha)} \right)^\dagger C_{\nu i}^{(\alpha)} + \left(C_{\mu i}^{(\beta)} \right)^\dagger C_{\nu i}^{(\beta)} \right\} & R_{\mu\nu}^{(x)} &= \sum_i^{N_e} \epsilon_i \left\{ \left(C_{\mu i}^{(\alpha)} \right)^\dagger C_{\nu i}^{(\beta)} + \left(C_{\mu i}^{(\beta)} \right)^\dagger C_{\nu i}^{(\alpha)} \right\} \\ D_{\mu\nu}^{(0)} &= \sum_i \left\{ \left(C_{\mu i}^{(\alpha)} \right)^\dagger C_{\nu i}^{(\alpha)} + \left(C_{\mu i}^{(\beta)} \right)^\dagger C_{\nu i}^{(\beta)} \right\} & D_{\mu\nu}^{(x)} &= \sum_i \left\{ \left(C_{\mu i}^{(\alpha)} \right)^\dagger C_{\nu i}^{(\beta)} + \left(C_{\mu i}^{(\beta)} \right)^\dagger C_{\nu i}^{(\alpha)} \right\} \\ D_{\mu\nu}^{(y)} &= -i \sum_i \left\{ \left(C_{\mu i}^{(\alpha)} \right)^\dagger C_{\nu i}^{(\beta)} - \left(C_{\mu i}^{(\beta)} \right)^\dagger C_{\nu i}^{(\alpha)} \right\} & D_{\mu\nu}^{(z)} &= \sum_i \left\{ \left(C_{\mu i}^{(\alpha)} \right)^\dagger C_{\nu i}^{(\alpha)} - \left(C_{\mu i}^{(\beta)} \right)^\dagger C_{\nu i}^{(\beta)} \right\} \end{aligned} \quad (3)$$

Список литературы

- [1] P. Pulay. Direct use of the gradient for investigating molecular energy surfaces // Appl. Electron. Struct. Theory. 1977. V. 4. p. 153–185.
- [2] C. van Wüllen. A quasirelativistic two-component density functional and Hartree–Fock program // Z. Phys. Chem. 2010. V. 224. p. 413–426.
- [3] R. Stocks, E. Palethorpe, G. M. J. Barca. Multi-GPU RI-HF energies and analytic gradients — toward high-throughput ab initio molecular dynamics // J. Chem. Theory Comput. 2024. V. 20. p. 7503–7515.

УДК 53.043

Квантовые кинетические уравнения и функция Вигнера

Ткачев А.Г.¹, Александров И.А.¹

E-mail: tagph@mail.ru

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Одно из самых фундаментальных явлений в квантовой электродинамике (КЭД) – рождение пар в сильном внешнем электромагнитном поле. Данный эффект пока еще не наблюдался экспериментально, так как для его исследования требуется создание очень мощных лазерных пучков [1]. Существуют несколько методов теоретического описания этого явления. Одними из наиболее распространенных являются подход квантовых кинетических уравнений (ККУ) и формализм функции Вигнера. В данной работе мы рассматриваем «скалярную КЭД» и уравнение Клейна-Гордона-Фока (КГФ).

Метод ККУ широко применяется для описания рождения пар в однородных электрических полях, произвольным образом зависящих от времени (см., например, [2,3]). В этом исследовании применяется подход, позволяющий рассматривать комбинацию переменного электрического и постоянного магнитного полей. Это обобщает известную в литературе систему ККУ и дает возможность проанализировать роль магнитного поля в процессе рождения пар.

Однако основным методом, который рассматривается в докладе, является решение уравнений Фешбаха-Вилларса-Гейзенберга-Вигнера (ФВГВ). Эта система позволяет находить функцию Вигнера для произвольной конфигурации внешнего электромагнитного поля. В литературе известны только уравнения без магнитного поля [4]. Но системы ФВГВ, как и в предыдущем подходе, могут быть составлены и для более сложной конфигурации внешнего поля. Однако получающиеся уравнения сложны для численного анализа, поэтому были найдены преобразования, значительно упрощающие их.

Была определена связь между ККУ и уравнениями на функцию Вигнера в простейших случаях, и проведено численное исследование рождения пар. В настоящее время разрабатываются уравнения ФВГВ для произвольного угла между электрическим и магнитным полями. Полученные результаты будут иметь большое значение не только для развития теории, но и для планирования будущих экспериментов.

Работа выполнена при поддержке: грант Российского Научного Фонда RSF_MOL_RG_2024 – 2

Список литературы

- [1] Fedotov, A., Ilderton, A., Karbstein, F., King, B., Seipt, D., Taya, H., Torgrimsson, G. Advances in QED with intense background fields // Phys. Rep. 2023. V. 1010. P. 1.
- [2] Aleksandrov, I.A., Kudlis, A., Klochai, A.I. Kinetic theory of vacuum pair production in uniform electric fields revisited // Phys. Rev. Res. 2024. V. 6. No. 4. P. 043009.
- [3] Schmidt, S., Blaschke, D., Röpke, G., Smolyansky, S.A., Prozorkevich, A.V. A quantum kinetic equation for particle production in the Schwinger mechanism // Int. J. Mod. Phys. E. 1998. V. 07. P. 709.
- [4] Li, Z. L., Xie, B. S., Li, J. I., Boson pair production in arbitrarily polarized electric fields // Phys. Rev. B 2019. V.100. P. 076018

УДК 539.1.07

Подготовка к исследованию кумулятивных эффектов на коллайдере NICA с использованием детекторов на микроканальных пластинах

Толстых Ю.В.¹, Феофилов Г.А.¹, Валиев Ф.Ф.¹, Макаров Н.А.¹, Калиниченко Н.И.¹, Вечернин В.В.¹
E-mail: tolstyhiulya@yandex.ru

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В данной работе представлены результаты первого этапа подготовки к исследованию кумулятивных эффектов в ядерных столкновениях на коллайдере NICA с использованием детекторов на микроканальных пластинах (МКП).

Актуальность исследования обусловлена возможностью изучения процессов образования кумулятивных частиц в кинематически запрещённой области, что может указывать на формирование в ядре флуктонов — сгустков «холодной» ядерной материи [1]. В качестве перспективного триггерного детектора для экспериментов на фиксированной мишени предлагается малопшумящий МКП-детектор с шевронными сборками и схемой совпадений, обладающий низким уровнем шума ($< 10^{-3}$ имп/(с·см²)), что позволяет эффективно подавлять случайные срабатывания [2].

В ходе работы проведены тестирование электроники и отработка режимов счёта совпадений с использованием генератора наносекундных импульсов и системы сбора данных на базе LabVIEW.

Разрабатываемая детекторная система направлена на замену существующего детектора ВВС-МСР на установке SPD [3] и может быть использована для регистрации кумулятивных частиц в условиях высоких требований к временному разрешению и помехоустойчивости.

Работа выполнена при поддержке: СПбГУ, шифр проекта 103821868

Список литературы

- [1] В.В. Вечернин. Кумулятивные явления и дальние корреляции во взаимодействиях с ядрами при высоких энергиях, диссертация, дфм. – М., 2006.
- [2] Г.А. Феофилов, Ф.Ф.Валиев, Н.И. Калиниченко. Метод увеличения эффективности регистрации минимально ионизирующих частиц детекторами на МКП // направлена в ЭЧАЯ 31 октября 2025 г.
- [3] The SPD collaboration. Technical Design Report of the Spin Physics Detector at NICA // Natural Science Review. 2024. Vol. 1, № 1. 362 p.

УДК 539-19

Полуэмпирические методы учета КЭД поправок в расчетах электронной структуры атомов и многозарядных ионов

И.И. Тупицын¹, А.Р. Саетгараев¹

E-mail: i.tupitsyn@spbu.ru

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

За последние десятилетия точность экспериментальных и теоретических спектроскопических данных настолько повысилась, что актуальной стала задача учета радиационных квантово-электродинамических (КЭД) поправок в расчетах электронной структуры атомов и молекул.

Неэмпирические расчеты радиационных поправок, основанные на использовании КЭД теории возмущений для многоэлектронных систем являются чрезвычайно сложными и трудоемкими. К настоящему моменту, такие неэмпирические расчеты высокой точности возможны только водородоподобных ионов, а также для многозарядных ионов и легких атомов с небольшим числом электронов. В связи с этим актуальной является задача построения приближенного радиационного одночастичного потенциала, включение которого в многоэлектронный гамильтониан системы, позволило бы учесть КЭД поправки в таких методах расчета электронной структуры, как метод Дирака-Фока, метод функционала плотности, а также в более сложных методах, учитывающих электронную корреляцию таких, как многоконфигурационный метод Дирака-Фока, методы наложения конфигураций и связанных кластеров.

К настоящему моменту было предпринято большое количество попыток учесть КЭД поправки к в расчетах полных энергий и энергий переходов в атомах и многозарядных ионах путем использования различных интерполяционных схем. Кроме того, были предложены различного рода локальные радиационных потенциалы (см., например, Pais_47, Bethe_47, Fricke_72, Pak_96, Eides_01, Ryukko_03, Flambaum_05), которые могут быть добавлены в гамильтониан системы для учета КЭД поправок.

Ведущими вкладами в КЭД поправку являются вакуумная поляризация и собственная энергия. Вклад вакуумной поляризации с хорошей степенью точности может быть учтен путем добавления в гамильтониан локального потенциала Юлинга и и локального потенциала, аппроксимирующего вклад Вичмана-Кролла. Поэтому в данной работе мы ограничились рассмотрением только поправки на собственную энергию.

Цель данной работы состоит в сравнительном анализе трех наиболее известных способа (Flambaum_05, Shabaev_13 и Tupitsyn_13) построения радиационного потенциала для учета КЭД поправок в многоэлектронных системах.

Работа выполнена при поддержке: гранта Российского научного фонда No22-62-00004, <https://rscf.ru/project/22-62-00004/>.

Список литературы

- [1] V.V. Flambaum and J.S.M. Ginges, // Phys. Rev. A 72, 052115 (2005).
- [2] V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, and V. A. Yerokhin // Phys. Rev. A 88, 012513 (2013).
- [3] I. I. Tupitsyn and E. V. Berseneva // Optics and Spectroscopy 114, 682 (2013)

УДК 544.182.7

Approximation of potential energy curves of the SiO^+ cation by the Expanded Morse Oscillator: analysis of numerical error

Turchenko P.D.^{1,2}, Skripnikov L.V.^{1,2}
p.d.turchenko@ya.ru

¹ NRC “Kurchatov Institute” – PNPI, Gatchina, Russia

² Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia

Currently, an international collaboration of scientists based at the Massachusetts Institute of Technology is preparing an experiment aimed at detecting $\mathcal{P}$ -odd effects in the SiO^+ molecule [1]. Theoretical support of this experiment requires knowledge of the electronic structure of this system. In order to calculate various properties, it is necessary to construct potential energy curves (PECs). In the present work, the application of the Expanded Morse Oscillator (EMO) for approximating the electronic energy values $V(R)$ calculated using the relativistic single-reference coupled cluster method is discussed.

The EMO can be defined by the following expressions [2]:

$$V(R) = D_e [1 - \exp(-\beta(z)(R - R_e))]^2, \quad z = \frac{R - R_e}{R + R_e}, \quad \beta(z) = \sum_{j=0}^J \beta_j z^j,$$

where R and R_e are the internuclear and equilibrium distances, D_e is the dissociation limit, and β_j are real coefficients. The value of R_e is determined by approximating the energy values near the minimum using smooth functions, while D_e is calculated as the difference between the total energy of the isolated atoms forming the molecule and the energy at R_e . When fitting with the EMO potential, these parameters are fixed, and the coefficients β_j are determined using the least-squares method.

The described approach is convenient because the PEC is represented by an analytical function. Since it has a simple form and is infinitely differentiable, high-order derivatives near R_e can be calculated, which are unstable, for example, for splines or polynomial functions. These derivatives are required for calculating spectroscopic constants using the Dunham formulas [3]. The least-squares method makes it possible to estimate the numerical uncertainty of the parameters β_j , which in turn allows one to estimate the numerical uncertainty of the spectroscopic constants.

Работа выполнена при поддержке: RSF 24-12-00092, “BASIS” No. 24-1-1-36-3

Список литературы

- [1] J. Karthein, et al. Electroweak nuclear properties from single molecular ions in a Penning trap // Physical Review Letters. 2024. V. 133: 033003.
- [2] E. G. Lee, et al. FTIR emission spectra, molecular constants, and potential curve of ground state GeO // Journal of Molecular Spectroscopy. 1999. V. 194. p. 197–202.
- [3] J. L. Dunham. The energy levels of a rotating vibrator // Physical Review. 1932. V. 41. p. 721–731.

УДК 544.18

Квантово-химические расчеты димеров оганесона и его гомологов

Усов Д.П.¹, Тупицын И.И.¹
st054876@student.spbu.ru

¹ Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Интерес к исследованию сверхтяжелых элементов (СТЭ) обусловлен фундаментальным вопросом о границах применимости периодического закона Менделеева. Особое место среди СТЭ занимает оганесон (Og, Z=118), замыкающий группу благородных газов. Экстраполяция эмпирических данных предсказывает для него температуру кипения 247 К [1], однако современные теоретические расчеты [2] дают аномально высокие значения — температуру плавления 325(15) К и кипения 450(10) К, что означает твердую фазу при комнатной температуре. Столь существенное расхождение требует проведения дополнительных высокоточных молекулярных и твердотельных расчетов оганесона и его более легких гомологов.

В рамках односсылочного метода связанных кластеров была рассчитана кривая потенциальной энергии основного состояния димера Og_2 в широком диапазоне межъядерных расстояний вплоть до диссоциационного предела. В расчетах был использован релятивистский эффективный потенциал остова [3] для учета скалярно-релятивистских эффектов, спин-орбитального и брейтовского взаимодействия, а также для упрощения многоэлектронной задачи благодаря включению существенного числа остоновых электронов в эффективный потенциал. В качестве базисного набора использовался оптимизированный набор гауссовых орбиталей из работы [4], построенный в релятивистских расчетах средства к электрону методом связанных кластеров. Было проведено сравнение энергии диссоциации и длины связи димера Og_2 с соответствующими характеристиками более легких гомологов. При переходе от Rn_2 к Og_2 наблюдается нарушение тенденции плавного изменения молекулярных свойств, что напрямую связано с критическим усилением влияния спин-орбитального взаимодействия. Тем не менее, сопоставление энергий диссоциации с полуклассической энергией дисперсионного притяжения показывает, что по природе взаимодействия оганесон сохраняет принадлежность к благородным газам. Полученные двухчастичные потенциалы межатомного взаимодействия будут использованы для расчета температур плавления и кипения оганесона методами молекулярной динамики.

Работа выполнена при поддержке: фонд «Базис» (грант № 24-1-2-74-1).

Список литературы

- [1] Takahashi N. Boiling points of the superheavy elements 117 and 118 //Journal of radioanalytical and nuclear chemistry. – 2002. – Т. 251. – №. 2. – С. 299-301.
- [2] Smits O. R. et al. Oganesson: A noble gas element that is neither noble nor a gas //Angewandte Chemie International Edition. – 2020. – Т. 59. – №. 52. – С. 23636-23640.
- [3] Mosyagin N. S., Zaitsevskii A. V., Titov A. V. Generalized relativistic effective core potentials for superheavy elements //International Journal of Quantum Chemistry. – 2020. – Т. 120. – №. 2. – С. e26076.
- [4] Kaygorodov M. Y. et al. Electron affinity of oganesson //Physical Review A. – 2021. – Т. 104. – №. 1. – С. 012819.

УДК 539.194

Исследование электронной структуры и свойств фрагментов кристаллов с СТЕР дибромидов и диiodидов иттербия

Хадеева П.А.^{1,2}, Шахова В.М.², Титов А.В.^{1,2}
khadieieva_p@pnpi.nrcki.ru

¹ НИЦ «Курчатовский институт» – ПИЯФ, Гатчина, Россия

² Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Исследование электронной структуры кристаллов с тяжелыми d- и f-элементами является одной из наиболее сложных разделов современной вычислительной квантовой физики и квантовой химии из-за необходимости одновременного учета релятивистских и корреляционных эффектов с очень высокой точностью. Для многих практических приложений достаточно смоделировать электронную структуру некоторого относительно небольшого фрагмента кристалла, рассматривая остальную часть системы как «замороженное окружение», поэтому в данной работе расчет периодической структуры сводится к рассмотрению кристаллического фрагмента с «подстраиваемым-под-соединение» потенциалом внедрения (compound-tunable embedding potential, СТЕР [1-3]).

Из-за теоретических и технических сложностей расчетов такого типа важно иметь некоторый инструмент для проверки качества воспроизведения электронной плотности вблизи тяжелого атома. В случае рассмотрения кристаллических соединений для этой цели удобно выбрать химический сдвиг (ХС) линий рентгеновского эмиссионного спектра (РЭС). Прямые методы вычисления ХС линий РЭС практически не применимы для исследования соединений с тяжелыми элементами, поэтому в отделе квантовой физики и химии НИЦ «Курчатовский институт» - ПИЯФ был разработан новый двухшаговый метод расчета ХС линий РЭС [4].

С помощью данного подхода проведено исследование кристаллов дибромидов и диiodидов иттербия. Проведен анализ структурных параметров кристаллов YbBr_2 и YbI_2 в рамках расчетов с периодическими граничными условиями методом теории функционала плотности PBE0. Для выбранных систем построены фрагменты кристаллов с «подстраиваемым-под-соединение» потенциалом внедрения и вычислены ХС линий РЭС атома иттербия для проверки качества воспроизведения электронной плотности вблизи тяжелого атома.

Работа выполнена при поддержке: РНФ, грант № 24-73-00076.

Список литературы

- [1] V.M. Shakhova, et. al Compound-tunable embedding potential method: analysis of pseudopotentials for Yb in YbF_2 , YbF_3 , YbCl_2 and YbCl_3 crystals // Phys. Chem. Chem. Phys. 2022. V. 24. PP. 19333–19345.
- [2] P.A. Khadeeva et. al Ab initio coupled cluster study of chemical shifts of X-ray emission lines in solids: pilot applications to ytterbium halides // Mol. Phys. 2025. p. e2483881.
- [3] D.A. Maltsev, et. al Compound-tunable embedding potential method and its application to calcium niobate crystal CaNb_2O_6 with point defects containing tantalum and uranium // Phys. Rev. B. 2021.. V. 103. p. 205105.
- [4] Y.V. Lomachuk, et. al Method for evaluating chemical shifts of x-ray emission lines in molecules and solids// PRA. 2013. V. 88, 6. p. 062511.

УДК 621.039.56

Влияние выгорания урана-235 в топливных подвесках компенсирующих органов реактора СМ на физические характеристики активной зоны

Ханбиков Р.З.^{1, 2}, Малков А.П.¹, Буркацкий Е.О.¹, Шаймурзин И.М.^{1, 2}

E-mail: razkhanbikov@mail.ru

¹ Акционерное общество «Государственный научный центр – Научно-исследовательский институт атомных реакторов», Димитровград, Россия

² Димитровградский инженерно-технологический институт - филиал НИЯУ МИФИ, Димитровград, Россия

Реактор СМ-3 обладает рекордной плотностью потока тепловых нейтронов, значение которого может достигать до $5 \times 10^{19} \text{ м}^{-2}\text{с}^{-1}$. Для обеспечения требуемой продолжительности кампании высокопоточного исследовательского реактора необходимо иметь достаточно большой запас реактивности: так только для компенсации стационарного отравления по ^{135}Xe требуется около $5.5\beta_{\text{эфф}}$, а малый объем активной зоны $420 \times 420 \times 350$ мм и высокое энерговыделение (2 МВт/л) приводит к быстрой потере реактивности в ходе кампании. Для компенсации запаса реактивности необходимы эффективные рабочие органы системы управления и защиты, количество которых в небольшой активной зоне ограничено. Для этой цели используются компенсирующие органы (КО), расположенные в угловых ячейках активной зоны. Конструктивно они состоят из двух частей: верхняя часть – поглотитель нейтронов, нижняя – топливная подвеска (ТП КО), представляющая собой штатную тепловыделяющую сборку (ТВС) [1]. В крайнем нижнем положении КО поглотитель полностью введен в активную зону, в крайнем верхнем – ТВС полностью введена в активную зону. В промежуточном положении КО поглотитель частично выведен, а ТВС введена в активную зону неполностью. В ходе кампании реактора РО КО равномерно извлекают из активной зоны, компенсируя обратные связи по реактивности и выгорание топлива, в результате чего количество ^{235}U в ТП уменьшается, что сказывается на реактивностных параметрах активной зоны, таких как эффективность рабочих органов системы управления и защиты (РО СУЗ), запас реактивности и подкритичность активной зоны.

В настоящем докладе представлена информация об результатах исследования влияния выгорания ^{235}U в топливных подвесках компенсирующих органов реактора СМ после модернизации 2019-2020 гг. [2] на эффективность рабочих органов СУЗ, градуировочные кривые, запас реактивности, подкритичность активной зоны. Проведено сопоставление расчетных и экспериментальных данных, показана достоверность расчетных значений.

Список литературы

- [1] Киреев Н. В., Марихин Н. Ю., Буркацкая А. Р. и др. Расчётное обоснование проектного ресурса рабочих органов компенсации реактивности реакторной установки СМ // Сборник трудов АО ГНЦ НИИАР. – 2024. – № 4. – С. 28-38.
- [2] Тузов А.А., Ижутов А.Л., Малков А.П. и др. Реализация проекта по модернизации активной зоны реактора СМ-3 // Известия высших учебных заведений. Ядерная энергетика. – 2024. – № 2. – С. 30–40.

УДК 539.184.262

Поправка на собственную энергию к сверхтонкой структуре водородоподобных ионов: фейнмановская и кулоновская калибровки

Шаманаев А.С., Малышев А.В.

work@ashamanaev.ru

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

В первом порядке по постоянной тонкой структуре α доминирующий вклад в сверхтонкое расщепление уровней энергии атомов возникает из диаграмм собственной энергии. В работах [1–4] соответствующая поправка была исследована для водородоподобных ионов в фейнмановской калибровке. Между тем, преимущества применения кулоновской калибровки в случае расчетов лэмбовского сдвига хорошо известны [5–7]. Настоящая работа направлена на исследование преимуществ использования кулоновской калибровки для расчетов сверхтонкого расщепления.

Поправка на собственную энергию делится на три вклада [8]: неприводимый, приводимый и вершинный. Вычисление неприводимого вклада сводится к вычислению недиагонального матричного элемента оператора собственной энергии. Поэтому его вычисление в кулоновской калибровке является не связано с появлением новых сложностей [7]. Перенормировка приводимого и вершинного вкладов может быть выполнена с использованием результатов для оператора собственной энергии свободного электрона и для вершинного оператора, представленных кулоновской калибровки в работах [9, 10]. Сравнение расчетов в фейнмановской и кулоновской калибровках позволяет сделать выводы об улучшении точности, достигаемом за счет кулоновской калибровки.

Список литературы

- [1] V. A. Yerokhin, V. M. Shabaev, Phys. Rev. A **64**, 012506 (2001).
- [2] V. A. Yerokhin et al., Phys. Rev. A **72**, 052510 (2005).
- [3] V. A. Yerokhin, U. D. Jentschura, Phys. Rev. Lett. **100**, 163001 (2008).
- [4] V. A. Yerokhin, U. D. Jentschura, Phys. Rev. A **81**, 012502 (2010).
- [5] D. Hedendahl, J. Holmberg, Phys. Rev. A **85**, 012514 (2012).
- [6] J. Holmberg, Phys. Rev. A **84**, 062504 (2011).
- [7] V. A. Yerokhin et al., Phys. Rev. A **111**, 012802 (2025).
- [8] V. M. Shabaev, Phys. Rep. **356**, (2002) 119–228.
- [9] G. S. Adkins, Phys. Rev. D **27**, 1814 (1983).
- [10] G. S. Adkins, Phys. Rev. D **34**, 2489 (1986).

УДК 514.822

Нетривиальная тривиальность 2+1-мерной гравитации

Шейкин А. А.

E-mail: a.sheykin@spbu.ru

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

2+1-мерная гравитация начала изучаться в 60-е годы [1], а в конце 80-х стала основным полигоном для изучения квантовой гравитации (после обнаружения Виттеном ее точной решаемости [2] и открытия черной дыры БТЗ). Классической же 2+1-мерной ОТО часто пренебрегают в силу ее «тривиальности» – отсутствия гравитационного поля в вакууме. Основной мой тезис: тривиальность 2+1-мерной ОТО видна со многих разных ракурсов и делает ее очень полезным инструментом в преподавании. Похожая ситуация возникает с бозонной струной: крит. размерность 26 видна в любом подходе к квантованию.

Доказательство плоскостности решения для точечной частицы 2+1-мерной ОТО на базе анализа размерностей [1] не требует никаких университетских знаний, кроме понятия метрики и ее безразмерности в декартовых координатах: нетривиальная зависимость безразмерной метрики от расстояния до частицы возможна при наличии обезразмеривающего множителя (радиуса Шварцшильда), а в 2+1-мерном пространстве невозможно сконструировать размерную величину из массы, скорости света и гравитационной постоянной. Изоморфность его конусу опирается на интуитивное определение кривизны поверхности на уровне 1 курса: конус – это пространство, плоское в каждой точке, кроме одной. Устранение всех динамических степеней свободы (отсутствие гравитационных полей и гравитонов) калибровочной инвариантностью («калибровка стреляет дважды») доступно для понимания на 2-3 курсе, после освоения понятия связей и калибровочной инвариантности: из 6 степеней свободы метрики (симметричной матрицы 3 на 3) 3 устраняет фиксация калибровки, а еще 3 фиксируются уравнениями связей, возникающими вследствие наличия калибровочной инвариантности. Тождественное обнуление в 2+1-мерном пространстве тензора Вейля (неразличимость вакуумов 2+1-мерной ОТО) – полностью антисимметричной части тензора кривизны Римана R_{iklm} , следующая из этого выразимость тензора Римана через его свертки – тензора Риччи R_{km} и скаляра Риччи R , и обнуление кривизны при выполнении вакуумных уравнений Эйнштейна $R_{km} = 0$ – материал, доступный начинающим осваивать ОТО (3 курс).

Таким образом, знакомство с 2+1-мерной ОТО, на мой взгляд, должно происходить раньше, чем всестороннее знакомство с 3+1-мерной. 2+1-мерная ОТО, несмотря на локальную тривиальность, достаточно поучительна, чтобы служить иллюстрацией многих явлений классической физики, а не только квантовой.

Список литературы

- [1] A.Staruszkiewicz.Gravitation Theory in Three-Dimensional Space//Act.Phys.Pol.1963.V.24.P.735
- [2] E.Witten.2+1-dimensional gravity as an exactly soluble system//Nucl.Phys.B.1988.V.311.P.46
- [3] A. A. Sheykin, S. N. Manida. Universal constants and natural systems of units in a spacetime of arbitrary dimension // Universe. 2020. V. 6. P. 166. arXiv: 2005.08196.
- [4] A. V. Golovnev. On the role of constraints and degrees of freedom in the Hamiltonian formalism // Universe. 2023. V. 9. P. 101. arXiv: 2212.11260.

УДК 530.145.6,167.7

Сто лет квантовой механики

Шейкин А. А.

E-mail: a.sheykin@spbu.ru

Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург, Россия

Полученное Шредингером уравнение для волновой функции позволило обосновать правила квантования и было встречено современниками с восторгом, поскольку позволяло описывать квантовые системы при помощи знакомого физикам аппарата дифференциальных уравнений [1]. Построенную в том же году гидродинамическую формулировку уравнения Шредингера, уравнения Маделунга, можно трактовать как еще один шаг к наглядности: попытку создания механистической модели квантовых явлений. Хотя впоследствии неоднократно утверждалось, что уравнения Шредингера и Маделунга математически не эквивалентны, дебаты по этому поводу продолжаются до сих пор [2], как и споры о том, эквивалентны ли комплексная и вещественная (одним из примеров которой является маделунговская) формулировки квантовой механики [3].

Давид Бом, чья интерпретация КМ основывалась на идентичных маделунговским уравнениям, подчеркивал, что классические (механистические) модели неклассических явлений могут являться важным шагом на пути к их пониманию [4]. В самом деле, понимание модели зачастую достигается построением более сложного и строгого математического аппарата, в рамках которого разрешаются парадоксы (пример — разрешение В. А. Фоком парадокса ЭПР переходом к формализму матрицы плотности [5]). Но возможно и обратное: переход к более упрощенной модели, в рамках которой, согласно Бому, могут появляться новые представления, и анализ слабых мест которой может выявить границы ее приложимости. Пример Бомы — теория эфира, в ходе анализа которой появилась СТО. Можно также вспомнить метод гидродинамических аналогий Максвелла, позволивший ему получить уравнения электродинамики еще до построения ее строгого математического аппарата ([6], с. 141), и теорию теплорода, позволившую Фурье получить уравнение теплопроводности, а Карно — сформулировать второе начало термодинамики, но не способную объяснить, к примеру, производство тепла трением ([6], с. 243).

Таким образом, построение классических моделей неклассических (в т.ч. квантовых) явлений, на наш взгляд — законный инструмент анализа, при условии отказа приписывать понятиям, созданным в рамках этих моделей, определенный онтологический статус.

Список литературы

- [1] Н. Никитин. Волновая механика Шредингера // Русский переплет, 06.03.2001.
- [2] M. Reddiger, B. Pourier. Towards a mathematical Theory of the Madelung equations // J. Phys. A. 2023. V. 56. P.193001. arXiv:2207.11367.
- [3] T. Hoffreymon, M. P. Woods. Quantum theory does not need complex numbers (2025), arXiv: 2504.02808.
- [4] Д. Бом. Причинность и случайность в современной физике. М.: ИЛ, 1959. С. 185.
- [5] В. А. Фок. Можно ли считать, что квантовомеханическое описание реальности является полным? // УФН. 1936. Т. 16. С. 437.
- [6] Б. Г. Кузнецов. Принципы классической физики. М.: Изд-во АН СССР, 1956. С. 141.