

possibilities of using PET are limited by the high cost of tomographs and the need to place them near the cyclotron. The creation of new radiopharmaceuticals having a half-life of several hours allows one to partially solve it. PET results are more reliable when combined with other studies (CT, MRI).

More recently, new diagnostic devices for PET / CT scanners have appeared. They allow in one study to obtain functional (PET) and structural (CT) information, which is achieved by combining PET and CT images. Simultaneous obtaining of functional and anatomical information allows improving the quality of research by improving image quality and increasing the accuracy of determining the spatial localization of formations up to 98%.

PET is used in various fields of medicine. About 80% of clinical PET studies are carried out in the field of oncology; they allow us to differentiate malignant and benign formations, to determine the degree of spread of tumors with a sensitivity close to 100%. Studies of the whole body, taking 60-70 minutes, allow you to determine metastases of any localization. PET has no alternative in the early evaluation of chemotherapy results.

In cardiology, PET allows you to receive information about myocardial blood supply, metabolic rate, evaluate the signs of coronary artery disease, and monitor the effectiveness of treatment. For such studies, ultrashort-lived isotopes are used, for example,  $^{13}\text{N}$ ,  $^{18}\text{F}$ ,  $^{11}\text{C}$ .

PET is used to measure glucose metabolism (the only source of cell energy). About 40 minutes after the intravenous administration of radioactive glucose (most often it is the  $^{18}\text{F}$  isotope), the radioisotope enters the cells and reaches equilibrium. Then its distribution is measured in various slices. In brain research, this method is most effective.

Thus, PET is a highly informative method of radiation diagnostics, allowing for one study to assess the stage of the disease, obtaining an image of the primary tumor, regional and distant metastases, including previously unforeseen, which often dramatically changes the tactics of treatment.

#### **Literature**

1. Kelloff GJ; Hoffman JM; Johnson B; Scher HI; et al. "Progress and promise of FDG-PET imaging for cancer patient management and oncologic drug development". Clin. Cancer Res.-2014. - P. 28-32
2. de Jong PA; Tiddens HA; Lequin MH; Robinson TE; et al. "Estimation of the radiation dose from CT in cystic fibrosis". – 2009. - P. 18-21
3. Dilworth, Jonathan R.; Pascu, Sofia I. "The chemistry of PET imaging with zirconium-89". Chemical Society Reviews. – 2018. - P. 57-62
4. Michael E. Phelps. PET: physics, instrumentation, and scanners. Springer.-2006. –P. 8–10.

УДК 27.35.57

### **КВАНТОВАЯ ЗАДАЧА ТРЕХ И С КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ. НЕРЕЛЯТИВИСТСКАЯ ЭНЕРГИЯ ИОНИЗАЦИЙ АТОМА ГЕЛИЯ**

**Азнабаев Дамир Талгатович**

*[buski\\_dn@mail.ru](mailto:buski_dn@mail.ru)*

Докторант 2 курса специальности «Ядерная физика», ЕНУ им. Л.Н. Гумилева,  
Нур-Султан, Казахстан

Научный руководитель - К.К. Кадыржанов

#### **Введение**

Квантовая задача трёх тел с кулоновским взаимодействием - классическая задача квантовой механики. Многие исследования в современной физике приводят к необходимости вычисления значений энергии и волновых функции связанных состояний квантово-механической системы трёх заряженных частиц, которая описывается трёхмерным

уравнением Шредингера. В последнее время эта задача привлекает внимание в связи с исследованиями проблемы мюонного катализа ядерных реакций синтеза [1,2].

Большое значение трехчастичные системы с кулоновским взаимодействием имеют для метрологии [3]. Так, в рекомендуемых CODATA-98 значениях физических констант, для магнитного момента ядра атома гелия-3 дается значение "экранированного" магнитного момента. Иначе говоря, это значение было получено в экспериментах с атомом и включает в себя также поправки на связанное состояние атома. Развитие таких высокоточных методов важно еще и потому, что имеется широкий класс физических задач, которые представляют практический интерес. Например, в физике экзотических атомов и молекул исследуется атом антипротонного гелия [4]. В этом атоме антипротон замещает один из электронов атома гелия и при определенных условиях формирует метастабильные состояния со временем жизни в несколько микросекунд! Кроме того, что это рекордное время жизни для античастицы, находящейся в обычной (*реальной*) среде, это также астрономическое время по меркам атомной физики, где время жизни 2P состояния атома водорода всего 10 наносекунд. Это позволяет использовать для исследования структуры спектра атома антипротонного гелия методы прецизионной лазерной спектроскопии.

В данной работе рассматривается вариант вариационного метода, называемый "экспоненциальным" разложением, который позволяет вычислять квантовую кулоновскую задачу трех тел с очень высокой точностью [5]. Данный метод используется для вычисления нерелятивистских энергий ионизации атома гелия. Показано, что разрабатываемый метод является эффективным универсальным средством для исследования кулоновских систем.

#### Вариационный метод

Вариационные разложения, которые мы рассматриваем, наиболее эффективны для исследования систем, состоящих из двух электронов и тяжелого ядра. Отправной точкой в решении вариационными методами стационарного уравнения Шредингера,

$$H\psi = E\psi$$

для некоторого гамильтониана, является вариационный принцип Хиллерааса-Унд-гейма, более известный в математике как вариационный принцип Релея-Ритца, который считается универсальным методом при получении приближенного решения. Основными задачами вариационного исчисления, являются задачи на определения экстремумов или стационарных значений функционалов. Сущность этого метода состоит в замене задачи поиска стационарных значений функционалов принципиально более простой задачей поиска стационарных значений функций нескольких переменных [6].

Для S-состояний это разложение имеет вид:

$$\psi = (r_1, r_2, r_{12}) = \sum_n C_n e^{-\alpha_n r_1 - \beta_n r_2 - \gamma_n r_{12}} \quad (1)$$

где параметры в экспоненте выбираются тем или иным образом [7]. В предлагаемом подходе нелинейные параметры из уравнения (1) генерируются с помощью следующих простых формул:

$$\begin{aligned} \alpha_n &= \left[ \left[ \frac{1}{2} n(n+1) \sqrt{p_\alpha} \right] (A_2 - A_1) + A_1 \right], \\ \beta_n &= \left[ \left[ \frac{1}{2} n(n+1) \sqrt{p_\beta} \right] (B_2 - B_1) + B_1 \right], \\ \gamma_n &= \left[ \left[ \frac{1}{2} n(n+1) \sqrt{p_\gamma} \right] (C_2 - C_1) + C_1 \right]. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь  $[x]$  обозначает дробную часть  $x$ ,  $p_\alpha, p_\beta, p_\gamma$  - некоторые простые числа. Преимущество этих простых генераторов псевдослучайных чисел состоит в воспроизводимости результатов вариационных вычислений. Скорость сходимости экспоненциального разложения с псевдослучайной стратегией выбора нелинейных параметров в формуле 2., необычайно высока на наборах базисных функций умеренных размерностей (до 100-200 пробных функций).

### Результаты

Результаты численных расчетов энергии ионизации для основного состояния атома гелия приводятся с таблице 1. Вычисления были выполнены с помощью метода обратной итерации [5]. Вариационные параметры оптимизировались вручную. Следует отметить, что оптимальные вариационные параметры для разных состояний отличаются друг от друга, при этом точность расчетов существенно зависит (выигрыш 5-8 знаков) от выбора оптимальных вариационных параметров для данного связанного состояния. Оптимизация вариационных параметров осуществлялась на базисах с  $N=8000, 10000, 14000, 18000, 22000$  функций. При вычислении приведенных в таблице состояний было использовано от 8 до 12 "слоев" базисных функций.

Таким образом, атом гелия не только подтверждают общую применимость квантовой механики, но и служат превосходным способом проверки различных приближенных методов, обычно используемых в квантовой механики.

В таблице 1. хорошо видно, что скорость сходимости высокая, и это позволяет получать результаты с очень высокой точностью.

Таблица 1. Нерелятивистская энергия ионизаций атома гелия для основного состояния

Базис ( $N$ )	Энергия $E_{nr}$
8000	-2.90372 43770 341195 98311 15924 51819 5711
10000	-2.90372 43770 341195 98311 15924 51938 6135
14000	-2.90372 43770 341195 98311 15924 51943 9761
18000	-2.90372 43770 341195 98311 15924 51944 0432
22000	-2.90372 43770 341195 98311 15924 51944 0443

В таблице 1. исследуется сходимость значения нерелятивистской энергии в зависимости от числа базисных функций  $N$ . Чтобы решить проблему численной неустойчивости расчетов при больших значениях  $N$  использовались разработанные одним из авторов данной работы модули программ двенадцатеричной точности (соответственно, 100 десятичных цифр). В таблице 2. сравнение результатов полученными другими авторами.

Таблица 2. Нерелятивистская энергия ионизаций основного состояния атома гелия

Авторы (год)	Ссылка	$N$	Энергия $E_{nr}$
Drake et al. (2002)	[8]	2358	-2.90372 43770 34119 598311
Korobov (2002)	[9]	5200	-2.90372 43770 34119 59831 1159
Schwartz (2006)	[10]	24099	-2.90372 43770 34119 59831 11592 45194 40444 66969 25310
Nakashima, Nakatsuji (2007)	[11]	22709	-2.90372 43770 34119 59831 11592 45194 40444 66969
this work		22000	-2.90372 43770 34119 59831 11592 45194 40443

### Заключение

Вариационные волновые функции связанных состояний были получены решением уравнения Шредингера для квантовой задачи трех тел с кулоновским взаимодействием с помощью вариационного подхода, основанного на экспоненциальном разложении с

параметрами экспонент, выбираемыми псевдослучайным образом. Представлены расчеты нерелятивистские энергии основного состояния для атома гелия. Численные результаты расчетов приведены в таблице 1. Были произведены исследования сходимости, в зависимости от числа пробных функций, что позволяет утверждать, что точность достигает  $10^{-35}$  а.е. Эта точность достаточна для получения надежных теоретических предсказаний.

### Список литературы

1. L.I. Ponomarev Review of the  $\mu$ CF Theory after EXAT-98 // *Hyperfine Interactions*, T. – 2001. – Vol. 138. -P. 15-23.
2. L.I. Ponomarev Muon Catalyzed Fusion and Basic Muon Reactions in Deuterium and Hydrogen // *Contemporary Physics* T. -1991. –Vol. 31. –P. 219.
3. P.J. Möhr and B.N. Taylor Precision Physics of Simple Atomic Systems // *Rev. Mod. Phys.* T. – 2000. –Vol. 72. – P. 351-358.
4. V.I. Korobov, D. Bakalov and H.J. Monkhorst New variational expansion for the antiprotonic helium atoms // *Phys. Rev. A.* – 1999. –Vol. 59. – P.919-921.
5. D.T. Aznabaev, A.K. Bekbaev, and V.I. Korobov Nonrelativistic energy levels of helium atoms // *Phys. Rev. A.* -2018. – Vol. 98 . – P.510 -518.

ӘӨЖ 543.429.22

## ТЫРНАҚ ДОЗИМЕТРИЯСЫНЫҢ ТӨТЕНШЕ ЖАҒДАЙДА ҚОЛДАНЫЛУЫ

**Амандықова А.М., Жанузаков М.М.**

*altyn\_ma@mail.ru*

Ядролық физика, жаңа материалдар және технологиялар 2-ші курс магистранты

Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті,

Нұр-Сұлтан, Қазақстан

Ғылыми жетекші – Жумадилов К.Ш.

### Кіріспе

Сәулеленуден кейінгі оқшауланған тіс дозиметриясы және басқа да биологиялық дозиметрия әдістері радиацияның елеулі әсер етуі мүмкін жағдайларды зерттеуде және дозаны қалпына келтіруде өте пайдалы әдістер екендігі дәлелденді [1]. Дегенмен, жарақаттанушылар саны көп төтенше жағдайдан кейін сұрыптау нәтижесін дереу бере алатын қолданыстағы «тірі тіс» дозиметрия әдісінің өткізгіштік қасиеті шектеулі болуы мүмкін. Ал көптеген белгілі дозиметриялық әдістер анық нәтижелерді алғанға дейін уақыт талап етеді. Соңғы зерттеулер, жарақаттанушы адам саны көп болған жағдайда, тырнақ немесе аяқ тырнақтарына жүргізілген ЭПР негізіндегі дозиметрия жағдайды жоғары деңгейде бағалаудың тиімді әдісі болуы мүмкін екендігін көрсетеді. Тырнақтар көп мөлшерде  $\alpha$ -кератинмен қамтылған және бұл компонентте радиация әсерінен пайда болатын радикалдардан бақыланатын ЭПР сигналдары көрінеді. Сол сияқты, шашта да көп мөлшерде  $\alpha$ -кератин бар. Өкінішке орай, шашта сонымен қатар радиация сигналын жасыра алатын кең, қарқынды ЭПР сигналға ие меланин бар.

ЭПР негізіндегі тырнақ дозиметриясының айтарлықтай артықшылықтары бар:

- Дозаны өлшеу үшін үлгілерді оңай алуға болады.
- Дозаны дереу бағалау мүмкіндігі.
- Дозаны өлшеу орындары дененің әр жерінде орналасқан, яғни қолда және аяқта. Бұл өлшемдер ЭПР негізіндегі тіс дозиметриясын өте жақсы толықтырады.
- Өлшеулерді кең таралған және қол жетімді X-диапазонды қарапайым рентген спектрометрлерімен жүргізуге болады.
- Өте сезімтал, шағын өрістегі X-диапазонды ЭПР спектрометрлерінің көптігі.