Жоба туралы қысқаша ақпарат

Жоба аты	ЖТН AP23487020 «Плазмалық ортаның жалпыланған химиялық моделі аясындағы тығыз қыздырылған заттың құрамы»
Жоба өзектілігі	Қыздырылған тығыз заттың химиялық моделі жоғары температура мен қысым жағдайындағы, зат атомдардың, иондардың, молекулалар мен электрондардың ішінара иондалу күйіндегі қоспасы болып табылатын жүйелердің термодинамикалық және тасымалдау қасиеттерін адекватты сипаттау қабілетінің арқасында өзінің өзектілігін сақтап отыр. Толық иондалған плазмалық модельдерден айырмашылығы, ол диссоциациялану, иондалу және рекомбинациялану процестерін ескереді, бұл оны астрофизикалық объектілерді, инерциялық термоядерлық синтезді модельдеуде, сондай-ақ жоғары энергиялы тығыз физика мен материалтану міндеттерінде ерекше сұранысқа ие етеді.
Жоба мақсаты	**Жобаның мақсаты** — қысыммен иондалу мен диссоциациялануды аналитикалық түрде есептеуге, құрамдас бөлшектердің ішкі статистикалық қосындысының жинақталмау мәселесін шешуге, сондай-ақ плазмалық фазалық ауысудың өмір сүру шекараларын нақтылауға мүмкіндік беретін бұрын әзірленген жалпыланған химиялық модель негізінде қыздырылған тығыз заттың құрамын зерттеу.
Жоба міндеттері	**1. Көпкомпонентті плазмалық ортаның жалпыланған химиялық моделі шеңберіндегі қыздырылған тығыз заттың құрамы** • **1.1** Дифракция мен симметрияның кванттық әсерлерін, құрамдас бөлшектер өлшемдерінің шектілігін, сондай-ақ олардың электрлік поляризациялануын ескеретін микроскопиялық әрекеттесу потенциалдары бар көпкомпонентті қоспаның еркін энергиясы үшін өрнекті алу. • **1.2** Тығыздық пен температура диаграммасындағы қысыммен иондалу орын алатын физикалық жағдайларды анықтау. • **1.3** Тығыздық пен температура диаграммасындағы қысыммен диссоциациялану орын алатын физикалық жағдайларды анықтау. **2. Құрамдас бөлшектердің ішкі статистикалық қосындысын регуляризациялау** • **2.1** Әрекеттеспейтін құрамдас бөлшектердің идеал жүйесі үшін ішкі статистикалық қосындыны шектеу (кесу). • **2.2** Отырықшылығы нөлден өзгеше қозған энергетикалық деңгейлердің критикалық кванттық сандарының жиынтығын анықтау. • **2.3** Плазмалық ортаның концентрациясы мен температурасына байланысты қозған энергетикалық деңгейлердің отырықшылықтарының үлестірілуін есептеу. **3. Плазмалық фазалық ауысу жағдайларын нақтылау** • **3.1** Дифракция мен симметрияның кванттық әсерлерін, атомдар мен иондар өлшемдерінің шектілігін, сондай-ақ олардың атом-атомдық жуықтау шеңберіндегі өзара тартылуын ескеретін сутегі мен дейтерийдің көпкомпонентті қоспасының еркін энергиясы үшін өрнекті

	алу. • **3.2** Сутегі мен дейтерий қоспасы үшін изотермалар мен Гюгонио адиабаталарын есептеу, сондай-ақ оларды компьютерлік модельдеу нәтижелерімен салыстыру. • **3.3** Плазмалық ортаның зарядталған және бейтарап компоненттері арасындағы күшті корреляцияларға байланысты плазмалық фазалық ауысу шекараларын нақтылау.
Күтілетін және қол жеткізілген нәтижелер	**2024 жыл:** Плазмалық ортаның параметрлерін анықтау мақсатында қыздырылған тығыз заттың құрамына талдау жүргізілді. Дифракция мен симметрияның кванттық әсерлерін, құрамдас бөлшектер өлшемдерінің шектілігін, сондай-ақ олардың электрлік поляризациялануын ескеретін бөлшекаралық әрекеттесу потенциалдары бар еркін электрондар мен иондардың, атомдар мен молекулалар қоспасы үшін Гельмгольцтің еркін энергиясы алынды. Тығыздық пен температура диаграммасындағы қысыммен иондалу процесіне сәйкес келетін қисық есептелді. Тығыздық пен температура диаграммасындағы қысыммен диссоциациялану процесіне сәйкес келетін қисық есептелді. **2025 жыл:** Құрамдас бөлшектердің ішкі статистикалық қосындысын тұрақтандырудың мүмкін тәсілдері зерттелді. Өзара әрекеттеспейтін идеалды құрамдас бөлшектер жүйесі үшін әртүрлі тығыздық пен температура мәндерінде бөлшектердің қозған деңгейлер бойынша қоныстану таралуы есептелді. Бөлшектер арасындағы өзара әрекеттесу бар жағдайда, тығыздық пен температура функциясы ретінде қоныстануы нөлге тең болатын критикалық кванттық сандардың тәуелділігі анықталды. Бөлшектер арасындағы өзара әрекеттесу бар жағдайда, орта температурасы мен тығыздығының функциясы ретінде қозған энергетикалық деңгейлердің қоныстану таралуы есептелді **2026 жыл: Плазмалық фазалық ауысу** параметрлерін есептеуге арналған химиялық модельдерді салыстыру жүргізіледі. Барлық үш жыл ішінде атқарылған жұмыстардың нәтижелері бойынша жобаның ғылыми бағыты бойынша келесідей жарияланымдар шығарылады: **Science Citation Index Expanded** индекстелетін және **Web of Science** базасында импакт-фактор бойынша **1 (бірінші), 2 (екінші) және (немесе) 3 (үшінші) квартильге** кіретін және (немесе) **Scopus** базасында **CiteScore** бойынша процентилі кемінде **60 (алпыс)** болатын рецензияланатын ғылыми басылымдарда кемінде **3 (үш) мақала және (немесе) шолу**; **ҒЖБССҚК** (Ғылым және жоғары білім саласындағы сапаны қамтамасыз ету комитеті) ұсынған рецензияланатын шетелдік немесе отандық басылымда кемінде **1 (бір) мақала немесе шолу**;
Зерттеу тобы мүшелерінің аты-жөні, идентификаторлары (Scopus Author ID, Researcher ID, ORCID,	Ғылыми жетекші – Давлетов Аскар Ербуланович (**Researcher ID:** O-1078-2014, **ORCID ID:** 0000-0003-0007-968, **Scopus ID**: 6602642543);

бар болса) және сәйкес профильдерге сілтемелер	Ткаченко И.М. (**Researcher ID:** A-4125-2015, **ORCID ID:** 0000-0001-8767-0581, **Scopus ID**: 7006413551); Архипов Ю.В. (**Researcher ID:** N-4833-2014, **ORCID ID:** 0000-0002-7299-5452**, Scopus ID**: 6603726292) Мухаметкаримов Е.С. (**Researcher ID:** N-6833-2017, **ORCID ID:** 0000-0003-1381-4532, **Scopus ID**: 55700980900) Еримбетова Л.Т. (**Researcher ID:** O-2204-2014, **ORCID ID:** 0000-0003-3498-8216, **Scopus ID**: 55702201200) Кисан А. (**Researcher ID:** P-7952-2014, **ORCID ID:** 0000-0002-8841-6902, **Scopus ID**: 57204819851)
Қолдану	Химиялық модельді пайдалану параметрлердің кең ауқымындағы заттың күй теңдеулерін, фазалық ауысулары мен оптикалық қасиеттерін дәлірек есептеуге мүмкіндік береді, бұл эксперименттік мәліметтерді интерпретациялау және жаңа технологияларды әзірлеу үшін өте маңызды.
Приоритет в сравнении с реальными аналогами	Қыздырылған тығыз заттың химиялық моделі баламалы тәсілдермен салыстырғанда басымдыққа ие, себебі ол әдетте қарапайым тұйық формулалар болмайтын ішінара иондалу аймағындағы жүйе қасиеттерін аналитикалық сипаттауды қамтамасыз ете алады. Үлкен есептеу ресурстарын талап ететін күрделі сандық әдістерден айырмашылығы, ол нәтижелердің физикалық айқындылығы мен интерпретациялануын сақтай отырып, күй теңдеулері, құрамы және термодинамикалық сипаттамалары үшін ықшам аналитикалық тәуелділіктерді алуға мүмкіндік береді. Бұл модельді теориялық талдау, параметрлерді жылдам бағалау және күрделірек көпдеңгейлі есептеу схемаларына енгізу үшін ерекше құнды етеді.
Жарияланымдар тізімі (URL, DOI көрсетілген)	1. A.E. Davletov, Yu.V. Arkhipov, Ye.S. Mukhametkarimov, L.T. Yerimbetova, I.M. Tkachenko. Warm dense matter composition within the framework of the generalized chemical model of a multicomponent plasma medium // Physics of non-Ideal Plasma 18 (PNP 18), September 17, 2024. – https://indico.cern.ch/event/1437801/contributions/6134220/ 2. A.E. Davletov, L.T. Yerimbetova, Ye.S. Mukhametkarimov, I.M. Tkachenko, A. Kissan. Mott transition in a multicomponent plasma under warm dense matter conditions // International Scientific Research Forum in honor of 90th anniversary of Al-Farabi Kazakh National University. – 26-28 September 2024. – С. 77 3. Yerimbetova L.T., Davletov A.E., Mukhametkarimov Ye.S., Arkhipov Yu.V., Tkachenko I.M. Ionization potential lowering in the framework of the generalized chemical model // IV annual conference of Kazakh Physical Society, Sarsen Amanzholov East Kazakhstan University, June 4 – 7, 2025 – P. 123-124 4. Yerimbetova L.T., Davletov A.E., Mukhametkarimov Ye.S., Arkhipov Yu.V., Tkachenko I.M. Ionization and Partition Function Regularization in Multicomponent Warm Dense Matter // Strongly Coupled Coulomb Systems (SCCS 2025), Tahoe Blue Event Center in Stateline, Nevada, USA, July 27 – 31, 2025. – No. 27; 5. Yerimbetova L.T., Davletov A.E., Mukhametkarimov Ye.S., Arkhipov Yu.V., Tkachenko I.M. Multicomponent plasma composition under warm dense matter conditions: a generalized chemical model approach // 11th International

	conference on Plasma Physics and Plasma Technology (PPPT-11), Minsk, Belarus, September, 15-19, 2025. – P. 20 6. Yerimbetova L. T., Arkhipov Yu. V., Mukhametkarimov Ye. S., Davletov A. E., Tkachenko I. M. Generalized Chemical Model for Warm Dense Hydrogen: Ionization Potential Depression and Molecular Dissociation Shifts // Contributions to Plasma Physics – 2025. – Art. No. e70065 (10 p.) – https://doi.org/10.1002/ctpp.70065
Патент туралы ақпарат	-//-