

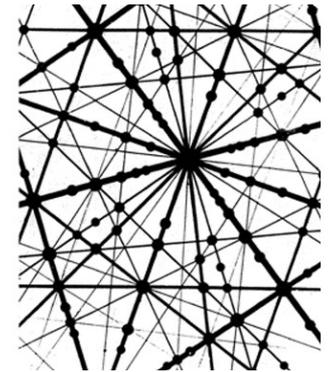


**ФТИ им. А.Ф. Иоффе**



# 50-я Международная Тулиновская конференция по Физике Взаимодействия Заряженных Частиц с Кристаллами

Москва, МГУ им М.В. Ломоносова,  
25-27 мая 2021



## Ядерные тормозные способности для потенциалов с притягивающей ямой

[П.Ю. Бабенко, А.Н. Зиновьев](#)

ФТИ им. А.Ф. Иоффе

# Введение

Рассчитаны ядерные тормозные способности изотопов водорода и гелия в материалах Be, C, W, перспективных для использования в качестве первой стенки токамака реактора.

Использование потенциалов, рассчитанных в приближении функционала плотности с притягивающей ямой, позволило получить более точные значения ядерных тормозных способностей для изотопов водорода, которые при малых энергиях отличаются на 27–60% от табличных данных.

Результаты для разных изотопов водорода хорошо описываются универсальной кривой.

Показано, что присутствие притягивающей ямы в потенциале значительно влияет на зависимость ядерных тормозных способностей от энергии соударения.

# Потери энергии - теории

**Бор Нильс (1913)**

**Бете Ханс и Блох Феликс (1930)**

**Ландау Лев Давидович (1944)**

**Ферми Энрико и Теллер Эдвард (1947)**

**Линдхард Йенс и Шарф Мортэн (1953) и Шиотт Ханс (1963)**

**Фирсов Олег Борисович (1959)**

**Оен Ордеан и Робинсон Марк (1976)**

**Циглер Джеймс (1977)**

**Брандт Вернер (1982) и Китагава Митсуо (1984)**

**Зигмунд Питэр (2016)**

# Величины для описания энергетических потерь

Удельные потери  
(тормозная способность)

$$\frac{dE}{dx} \quad \left[ \frac{\text{эВ}}{\text{Å}} \right]$$

Сечение торможения  
приходящееся на один атом

$$S = \frac{1}{N} \left( - \frac{dE}{dx} \right) \quad \left[ \frac{\text{эВ} \cdot \text{Å}^2}{\text{атом}} \right]$$

$N$  – число атомов мишени  
в единице объема

# Потери энергии

Потери энергии

Ядерные

(столкновения с ядрами атомов)

Электронные (неупругие)

(возбуждение и ионизация атомов)

Суммарные потери = Ядерные + Электронные

Суммарное сечение торможения

$$S = S_n + S_e$$

Суммарные удельные потери

$$\left(\frac{dE}{dx}\right) = \left(\frac{dE}{dx}\right)_n + \left(\frac{dE}{dx}\right)_e$$

# Почему важно знать потери энергии ?

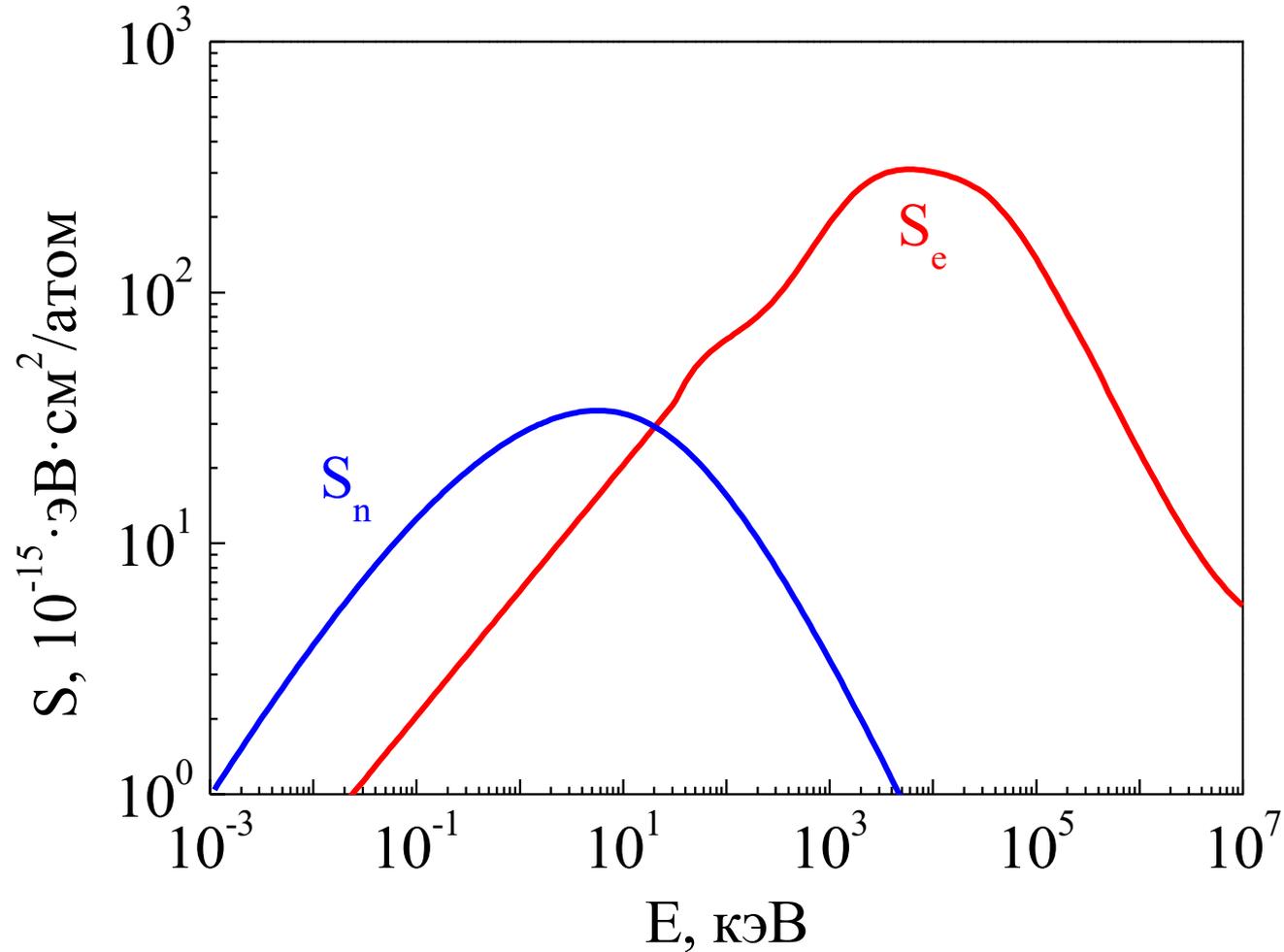
Для легких частиц при энергиях выше нескольких кэВ доминируют Электронные потери.

В пристеночной плазме токамака, где энергии частиц составляют 10–200 эВ, доминируют **Ядерные потери**.

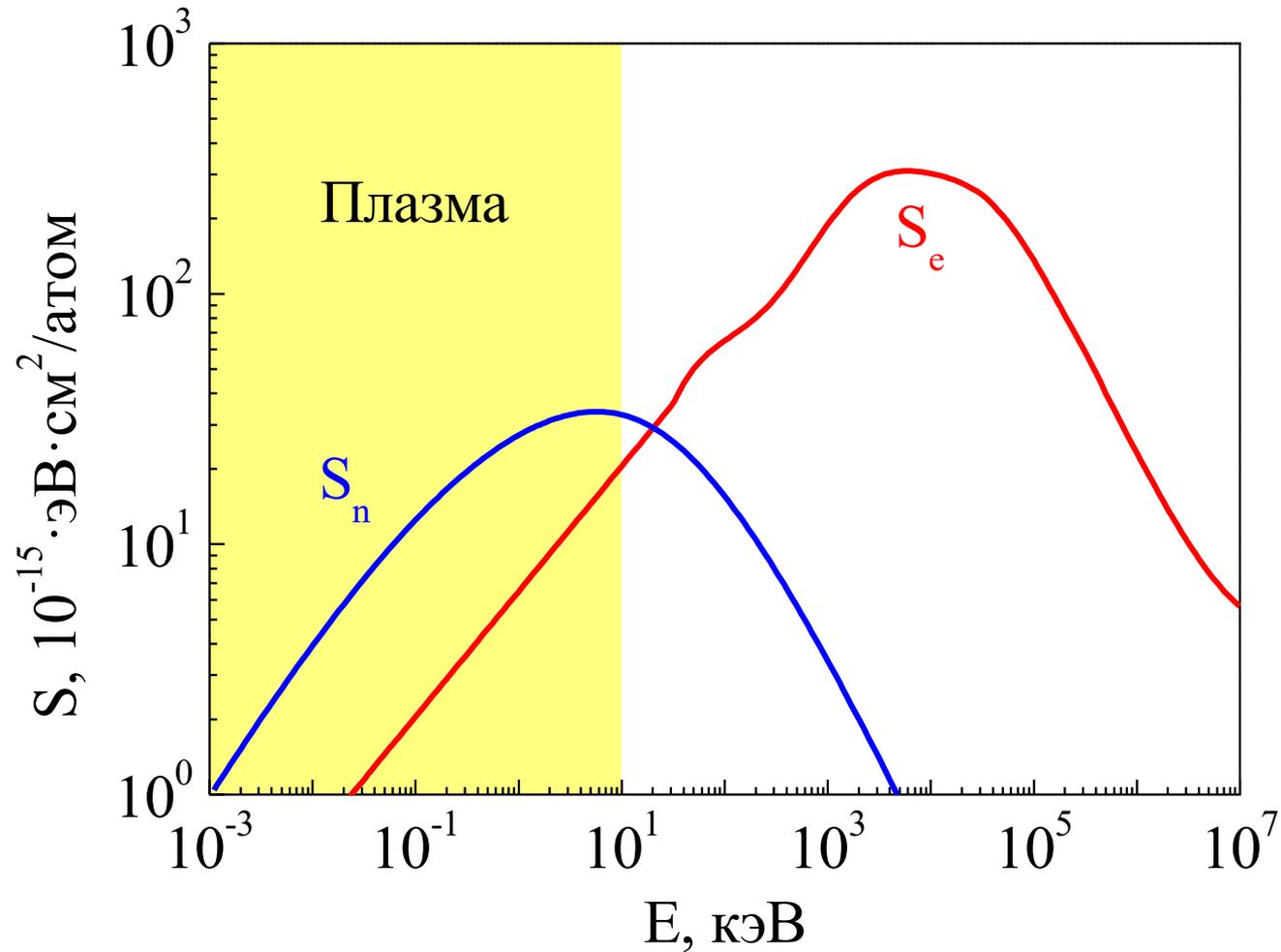
Понимание взаимодействия частиц плазмы с первой стенкой токамака является одной из основных проблем, которые необходимо решить для успешной работы токамака-реактора.

**Ядерные потери** энергии  
при прохождении частиц в веществе

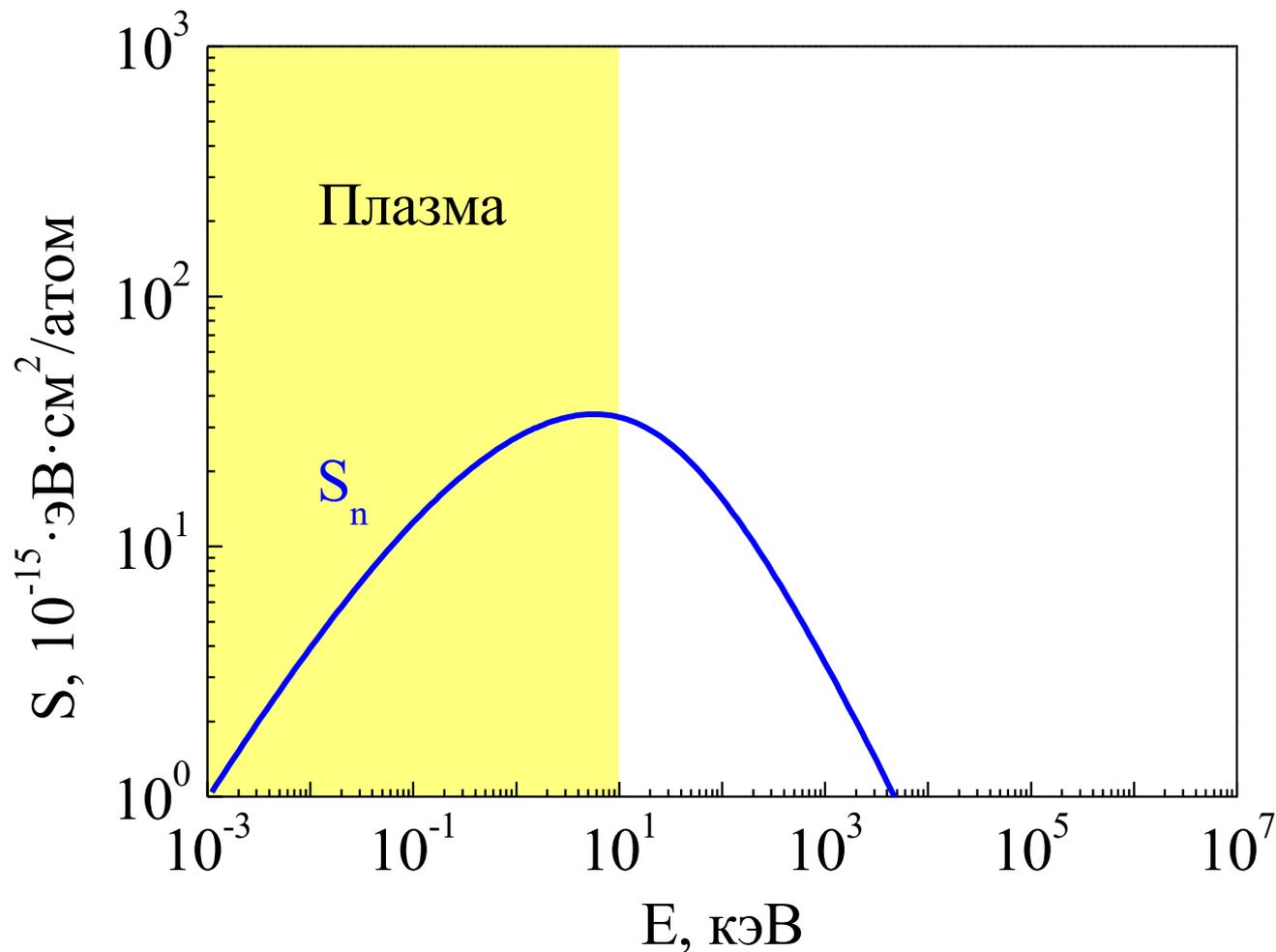
# Общий характер зависимости сечения ядерного $S_n$ и электронного $S_e$ торможения от энергии



# Общий характер зависимости сечения ядерного $S_n$ и электронного $S_e$ торможения от энергии



# Общий характер зависимости сечения ядерного торможения $S_n$ от энергии



# Вычисление сечения ядерного торможения - $S_n$ “классика”

$$S_n = \int_0^{\infty} 2\pi p \cdot T[\theta(p)] dp \quad (1)$$

$p$  – параметр удара,  $T[\theta]$  – потеря энергии при соударении (2),  $\theta(p)$  – угол рассеяния в СЦМ

$$T[\theta(p)] = \frac{4M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} \cdot \sin^2 \left[ \frac{\theta(p)}{2} \right] \quad (2)$$

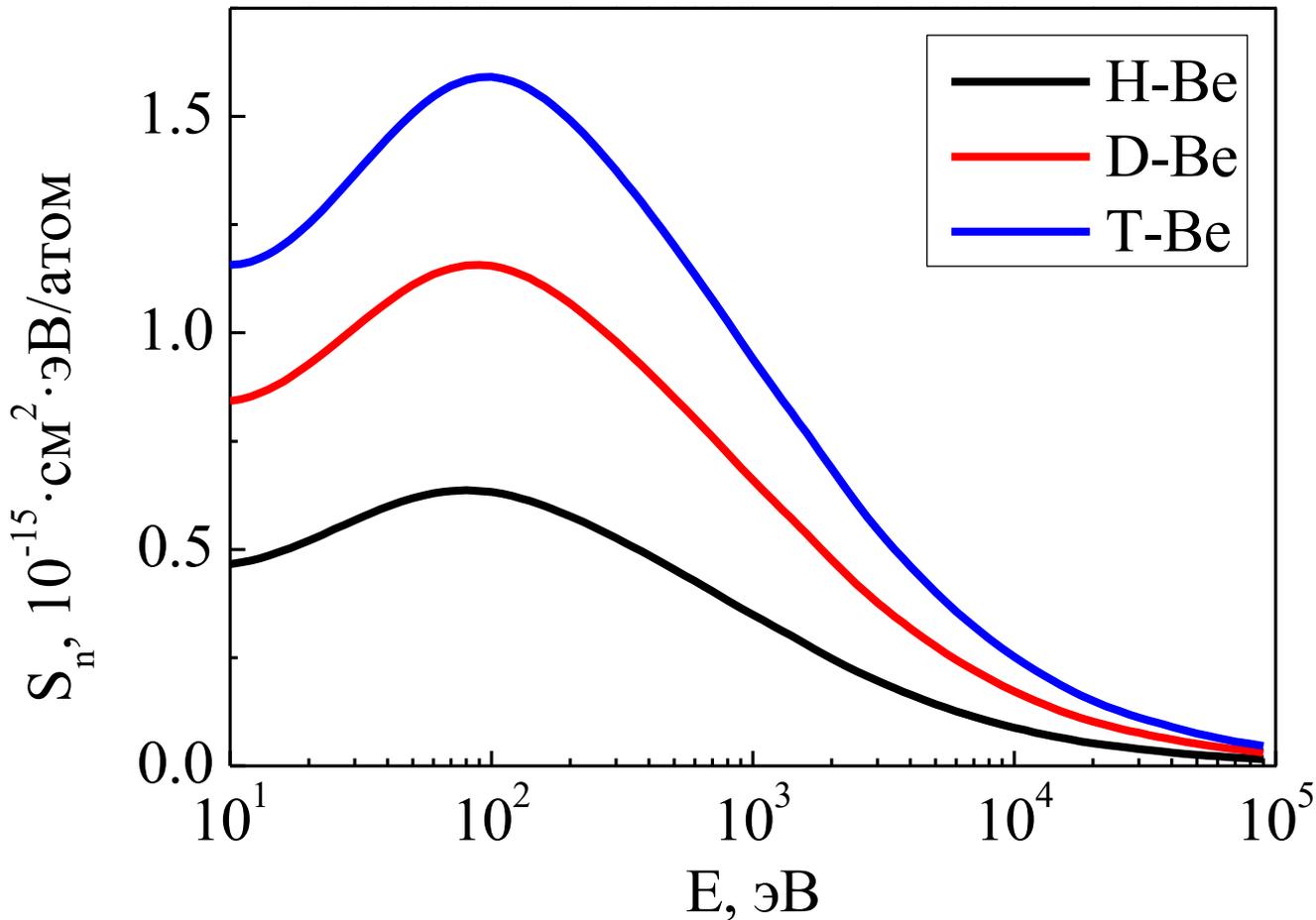
$M_1$  и  $M_2$  – массы сталкивающихся частиц

$$\theta(p) = \pi - 2p \cdot \int_{r_0}^{\infty} \frac{dr}{r^2 \cdot \sqrt{1 - \frac{U(r)}{E_{CM}} - \frac{p^2}{r^2}}} \quad (3)$$

здесь  $U(r)$  – потенциал взаимодействия,  
 $E_{CM} = E \cdot M_2 / (M_1 + M_2)$  – энергия соударения в СЦМ,  $r_0$  – корень уравнения (4)

$$1 - \frac{U(r_0)}{E_{CM}} - \frac{p^2}{r_0^2} = 0 \quad (4)$$

# Ядерные тормозные способности изотопов водорода в бериллии



Рассчитанные ядерные тормозные способности для изотопов водорода в бериллии.

# Универсальные координаты Линдхарда

Приведенная энергия -  $\varepsilon$

$$\varepsilon = E_0 \cdot \frac{M_2}{M_1 + M_2} \cdot \frac{a}{Z_1 Z_2 e^2}$$

Приведенное сечение  
торможения -  $s(\varepsilon)$

$$s(\varepsilon) = S \cdot \frac{M_1 + M_2}{M_1} \cdot \frac{1}{4\pi} \cdot \frac{1}{Z_1 Z_2 e^2} \cdot \frac{1}{a}$$

$a$  – длина экранирования

$E_0$  – энергия налетающей частицы

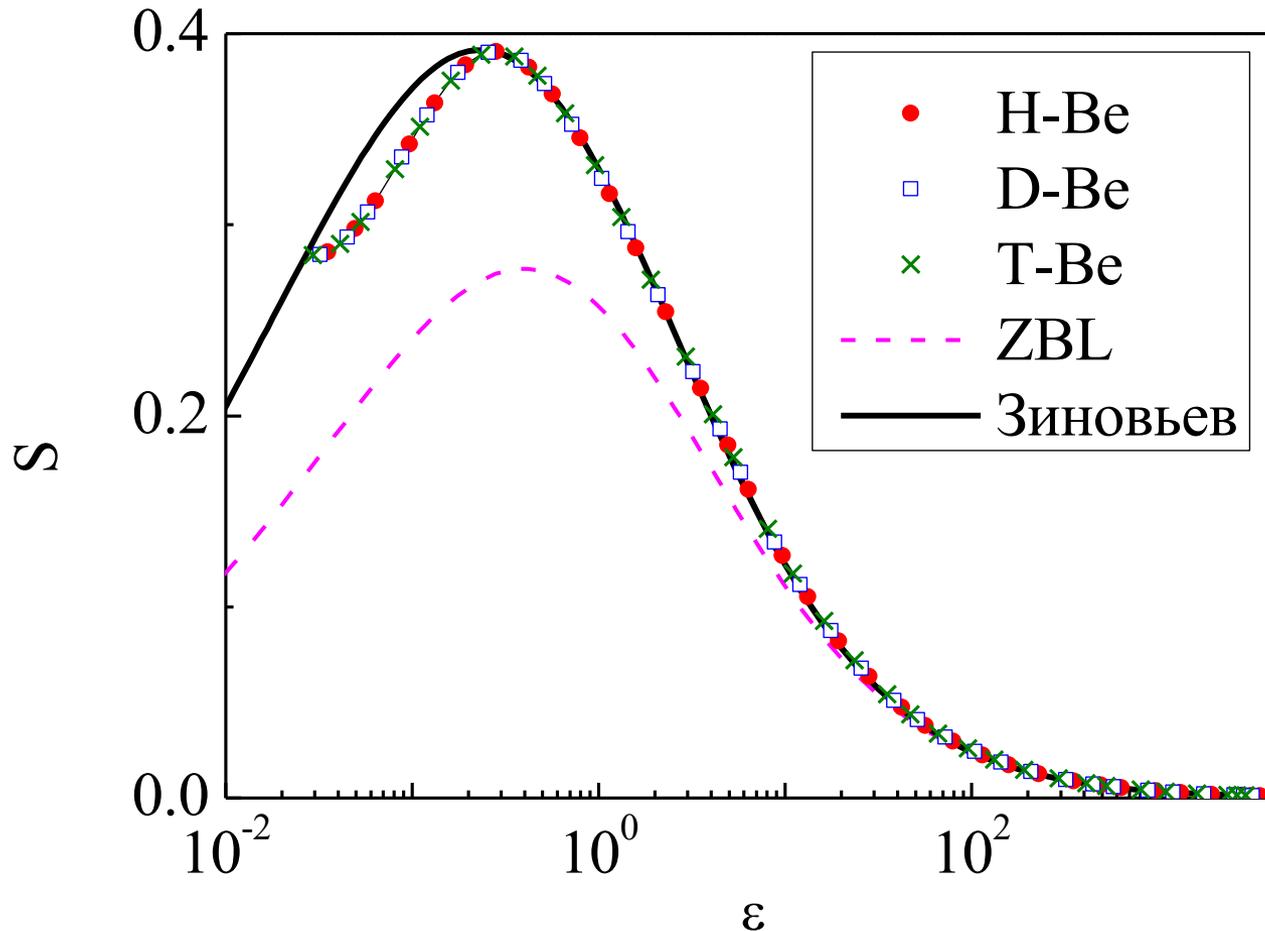
$M_1$  – масса налетающей частицы,  $Z_1$  – заряд налетающей частицы

$M_2$  – масса атома мишени,  $Z_2$  – заряд атома мишени

$e$  – заряд электрона

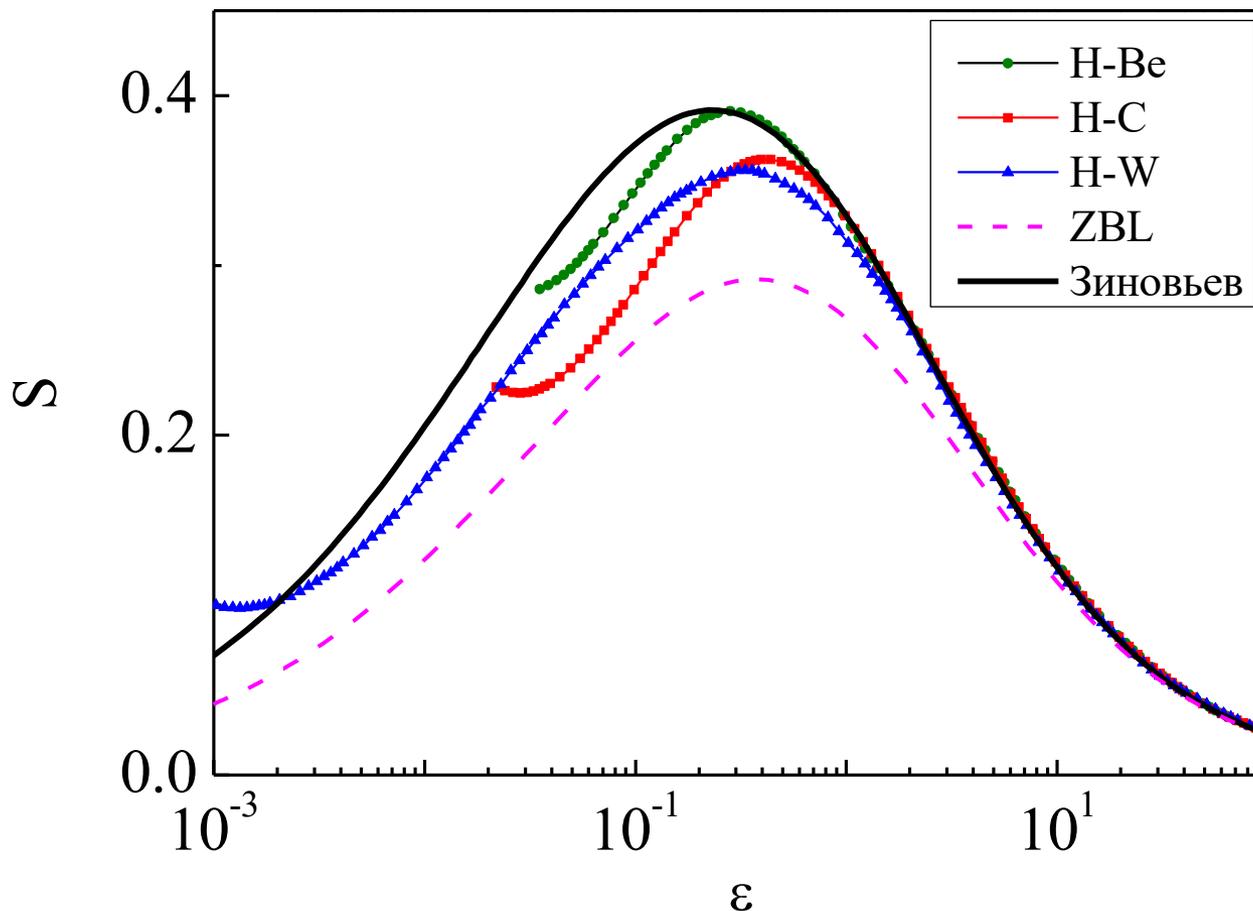
$S$  – сечение торможения

# Ядерные тормозные способности изотопов водорода в бериллии



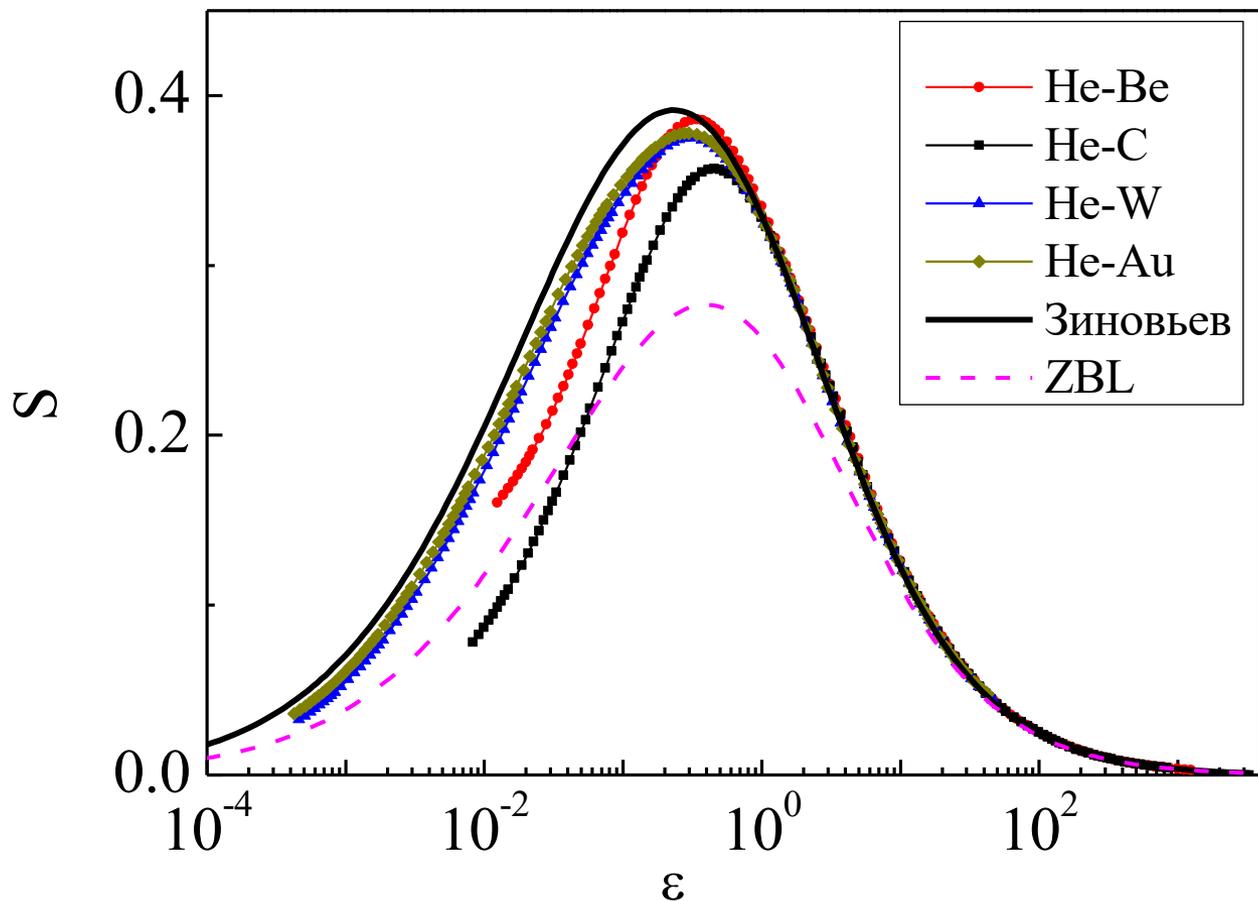
Сравнение вычисленных данных об ЯТС при столкновениях изотопов водорода с бериллием в универсальных координатах. Данные хорошо описываются единой кривой. Представлено сравнение с результатами, получаемыми при использовании потенциалов Зиновьева и ZBL.

# Ядерные тормозные способности водорода в бериллии, углероде и вольфраме



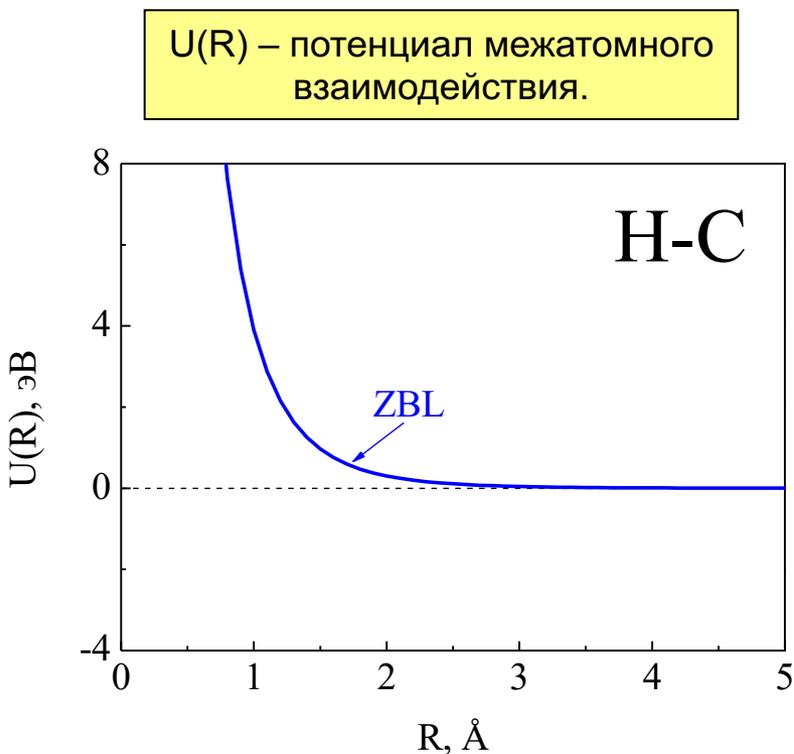
ЯТС для столкновений водорода с мишенями из бериллия, углерода и вольфрама. Приведено сопоставление с результатами расчетов при использовании потенциалов Зиновьева и ZBL.

# Ядерные тормозные способности гелия в бериллии, углероде, вольфраме и золоте

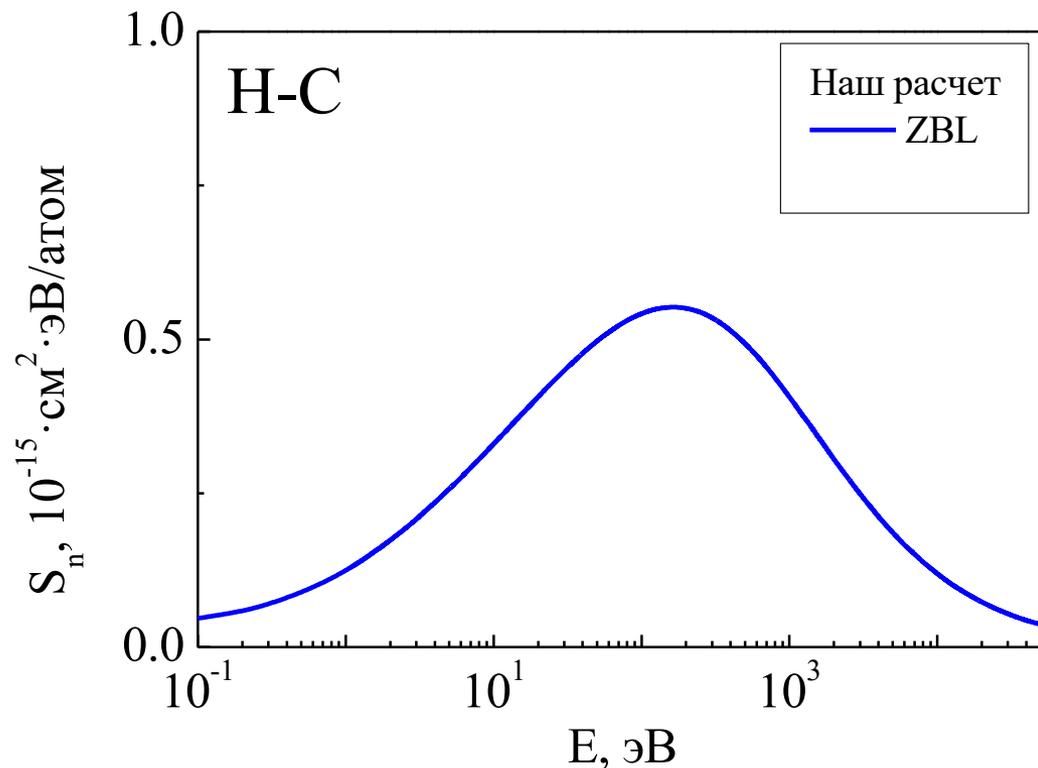


ЯТС для столкновений атомов гелия с Be, C, W и Au в универсальных координатах. Представлены также расчеты с использованием потенциалов Зиновьева и ZBL.

# Сечение ядерного торможения для потенциала ZBL

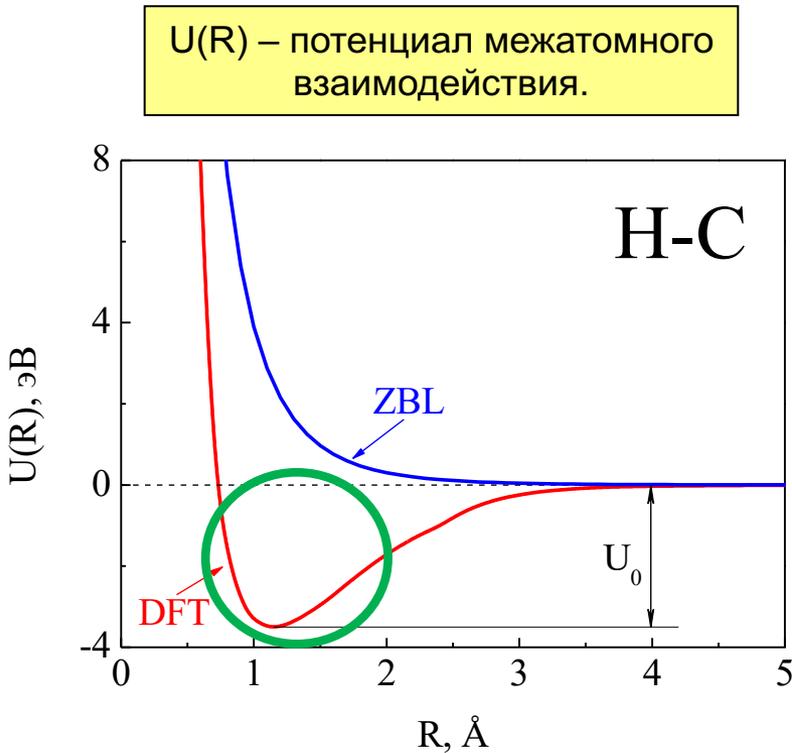


ZBL – Ziegler, Biersack, Littmark  
Циглер, Бирзак, Литтмарк



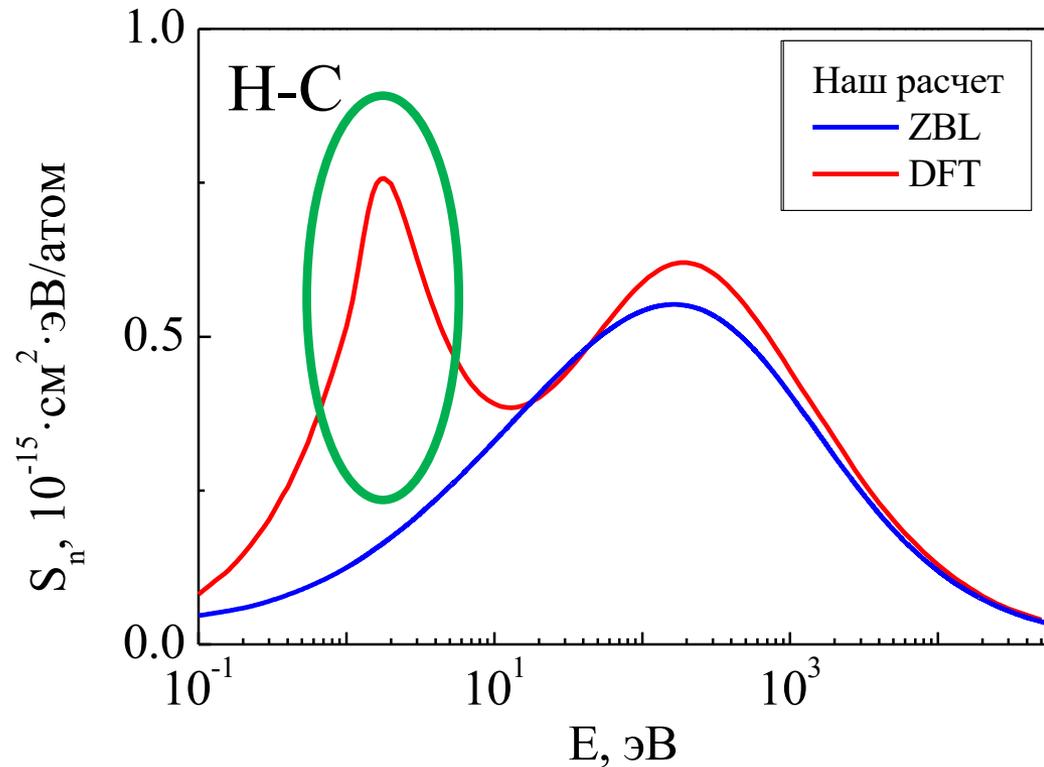
Сечение ядерного торможения для столкновений атомов H с C в зависимости от энергии атома водорода. Синяя линия расчет с использованием потенциала ZBL.

# Сечение ядерного торможения для потенциала DFT



ZBL – Ziegler, Biersack, Littmark  
Циглер, Бирзак, Литтмарк

DFT – Density Functional Theory  
Теория функционала плотности



Сечение ядерного торможения для столкновений атомов H с C в зависимости от энергии атома водорода. Синяя линия расчет с использованием потенциала ZBL. Красная линия расчет с использованием потенциала DFT.

# Вычисление сечения ядерного торможения - $S_n$ “квазиклассика”

$$S_n = Q_{tr} \frac{2M_1M_2}{(M_1 + M_2)^2} E_{LS} \quad (1)$$

$Q_{tr}$  – транспортное сечение (2),  $M_1$  и  $M_2$  – массы сталкивающихся частиц,  $E_{LS}$  – энергия соударения в ЛСК.

$$Q_{tr} = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (l + 1) \sin^2(\delta_l - \delta_{l+1}) \quad (2)$$

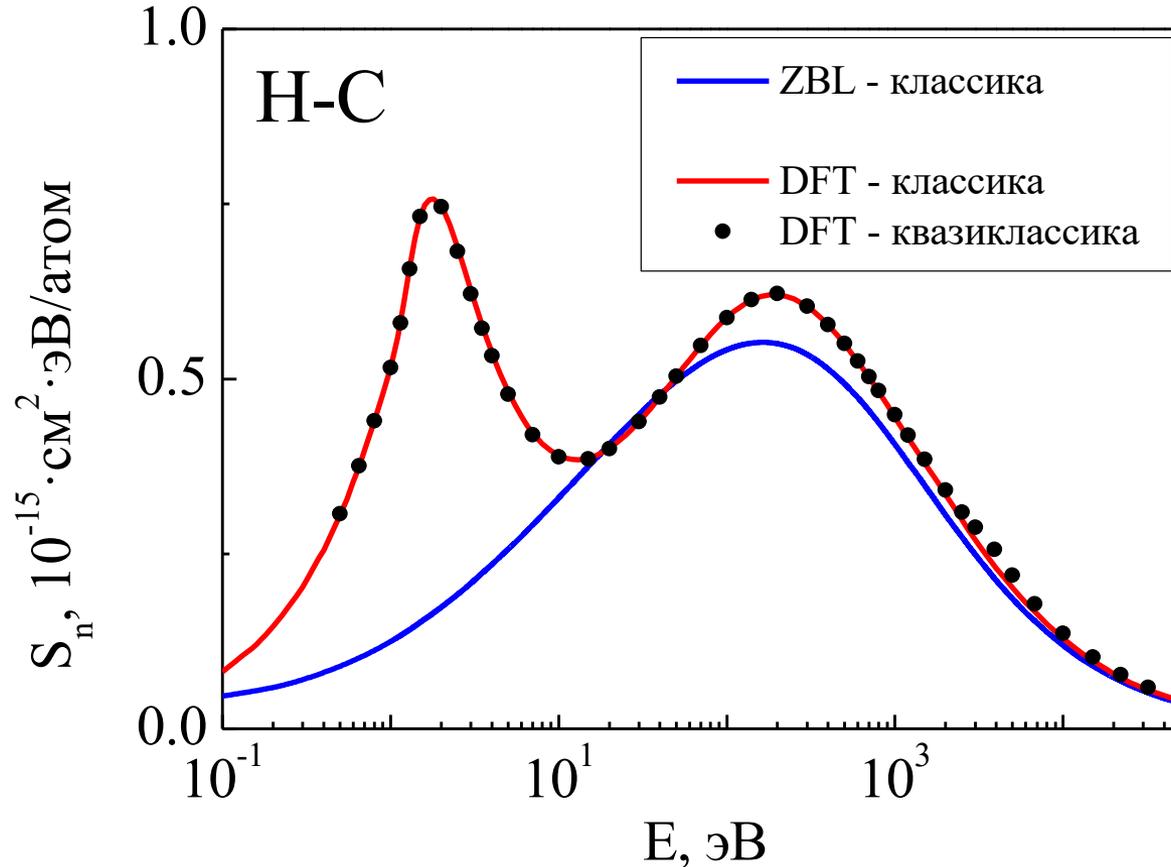
$k$  – импульс в СЦМ,  $l$  – орбитальное квантовое число,  $\delta_l$  – фаза рассеяния (3).

$$\delta_l = \int_{r_0}^{\infty} \left[ \sqrt{2\mu[E_{CM} - U(r)] - \frac{(l + \frac{1}{2})^2}{r^2} - k} \right] dr + \frac{\pi}{2} \left( l + \frac{1}{2} \right) - kr_0 \quad (3)$$

где  $r$  – межъядерное расстояние,  $\mu$  - приведенная масса ( $\mu = M_1M_2 / \{M_1 + M_2\}$ ),  $E_{CM}$  – энергия в СЦМ,  $U(r)$  – потенциал межатомного взаимодействия,  $r_0$  – корень уравнения (4).

$$2\mu[E_{CM} - U(r_0)] - \frac{(l + \frac{1}{2})^2}{r_0^2} = 0 \quad (4)$$

# Сечение ядерного торможения “классика” и “квазиклассика”



Сечение ядерного торможения для столкновений атомов Н с С в зависимости от энергии атома водорода.

DFT – Density Functional Theory  
Теория функционала плотности

ZBL – Ziegler, Biersack, Littmark  
Циглер, Бирзак, Литтмарк

# Выводы

1. Рассчитаны ЯТС для изотопов водорода и гелия при соударениях с Be, C, W - материалами, перспективными для использования в качестве первой стенки токамака-реактора.
2. Использование DFT-потенциалов с коррекцией параметров потенциальной ямы, основанной на данных спектроскопических измерений, позволило получить более точные результаты, которые отличаются на 27–60% от табличных данных.
3. Данные для различных изотопов водорода хорошо описываются универсальной кривой.
4. Показано влияние потенциальной ямы на ЯТС при малых энергиях соударения.



2021

ФТИ им. А. Ф. Иоффе

Главное здание ФТИ

**Спасибо за внимание !**

# Результаты работы изложены в статье

**Письма в Журнал Технической Физики**

2020. том. 46. вып. 18. с. 23-26.

А.Н. Зиновьев, П.Ю. Бабенко

Ядерные тормозные способности изотопов водорода и гелия  
в бериллии, углероде и вольфраме.