

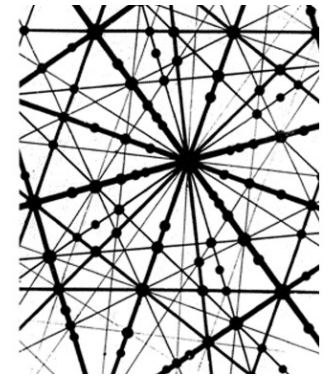


ФТИ им. А.Ф. Иоффе



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 ?

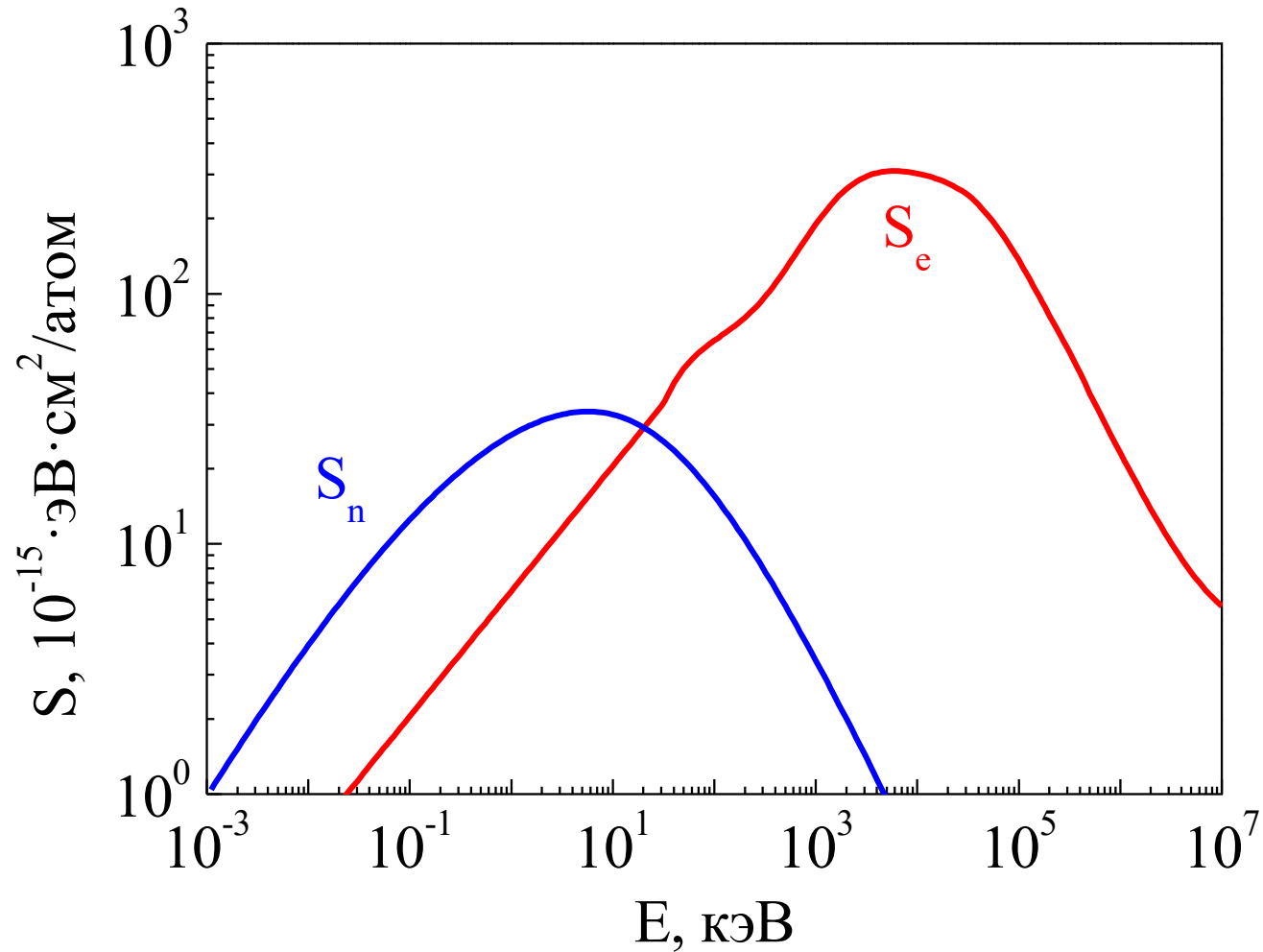
Для легких частиц при энергиях выше нескольких кэВ доминируют Электронные потери.

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

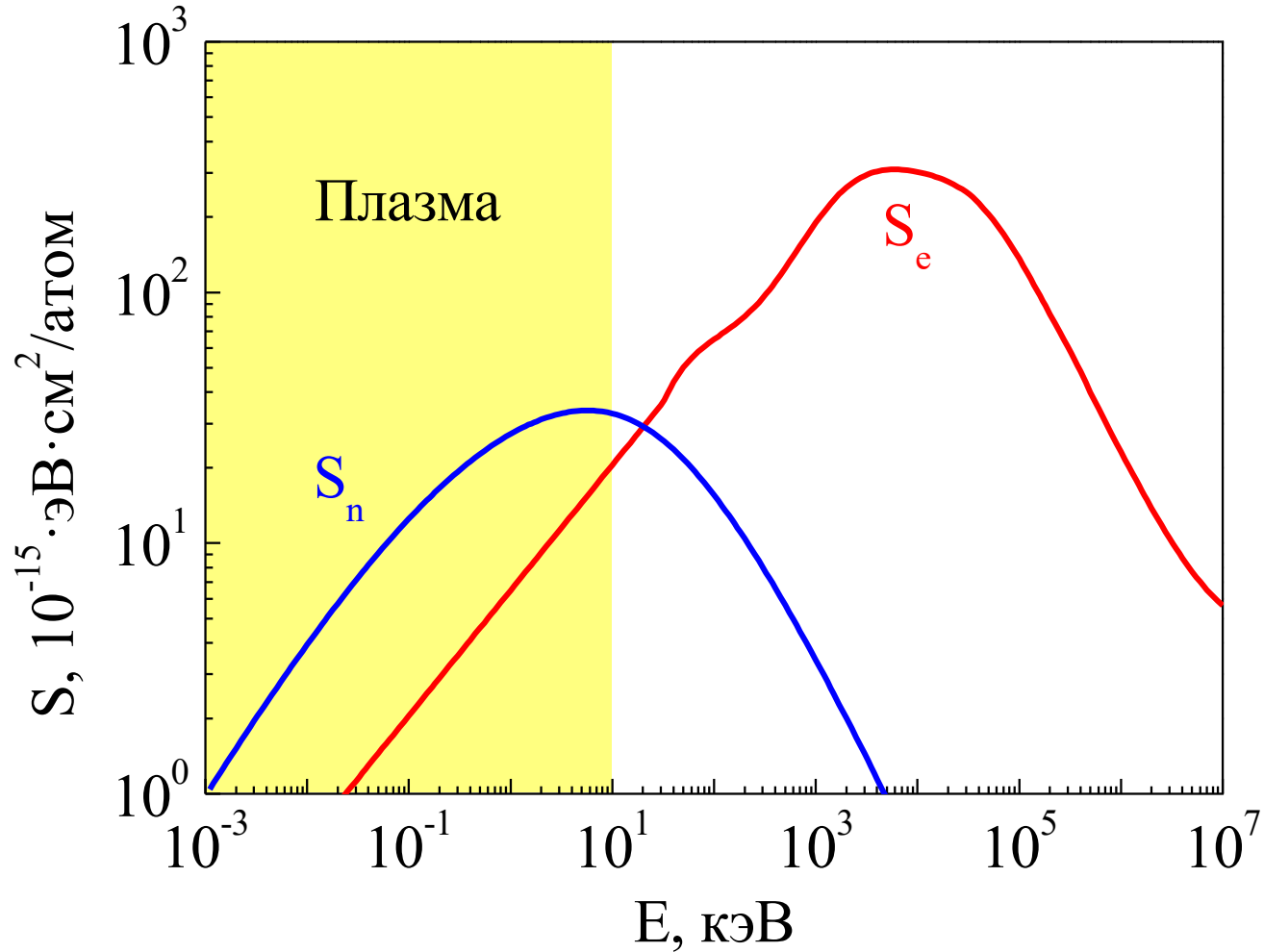
Понимание взаимодействия частиц плазмы с первой стенкой токамака является одной из основных проблем, которые необходимо решить для успешной работы токамака-реактора.

Ядерные потери энергии
при прохождении частиц в веществе

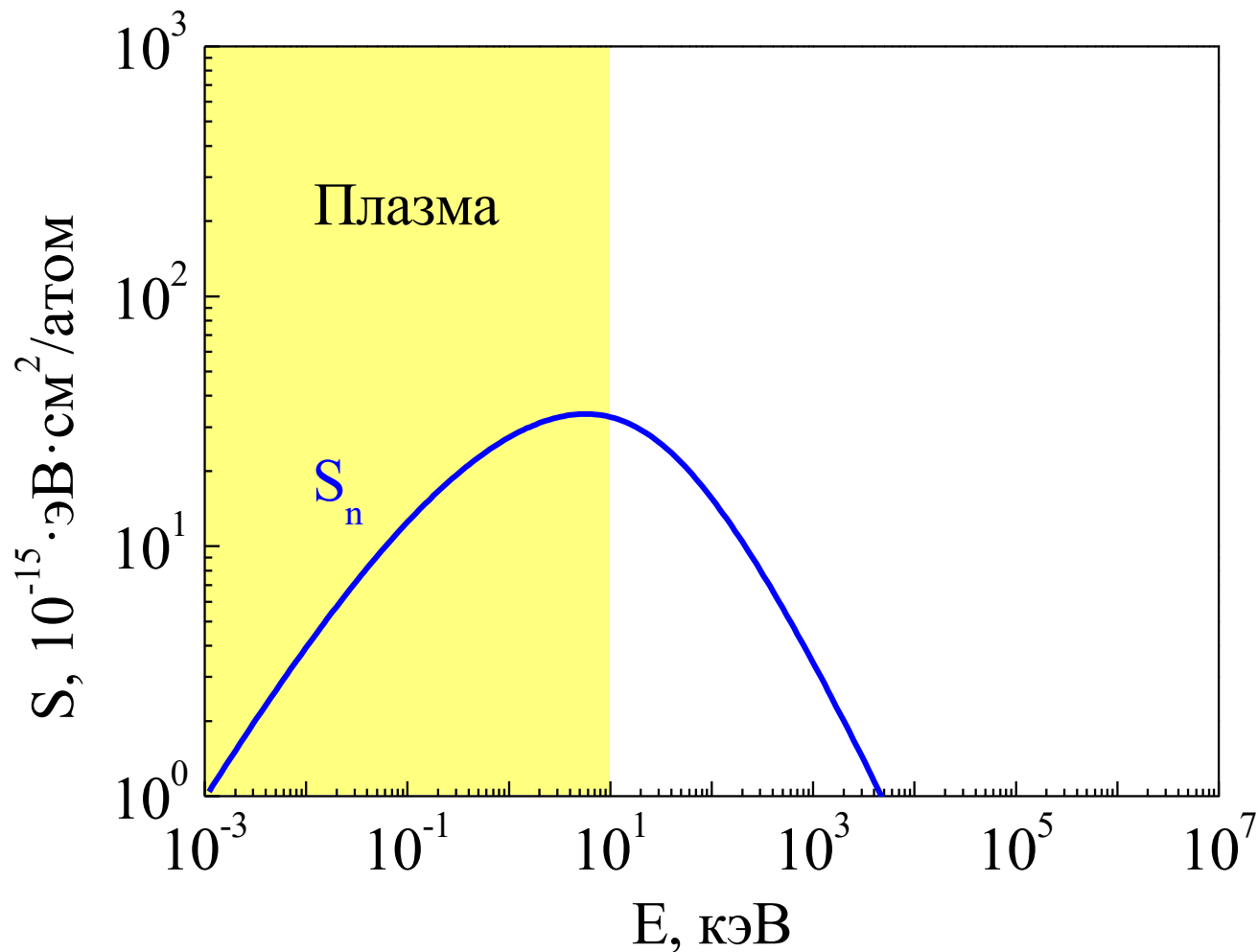
Общий характер зависимости сечения ядерного S_n и электронного S_e торможения от энергии



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

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

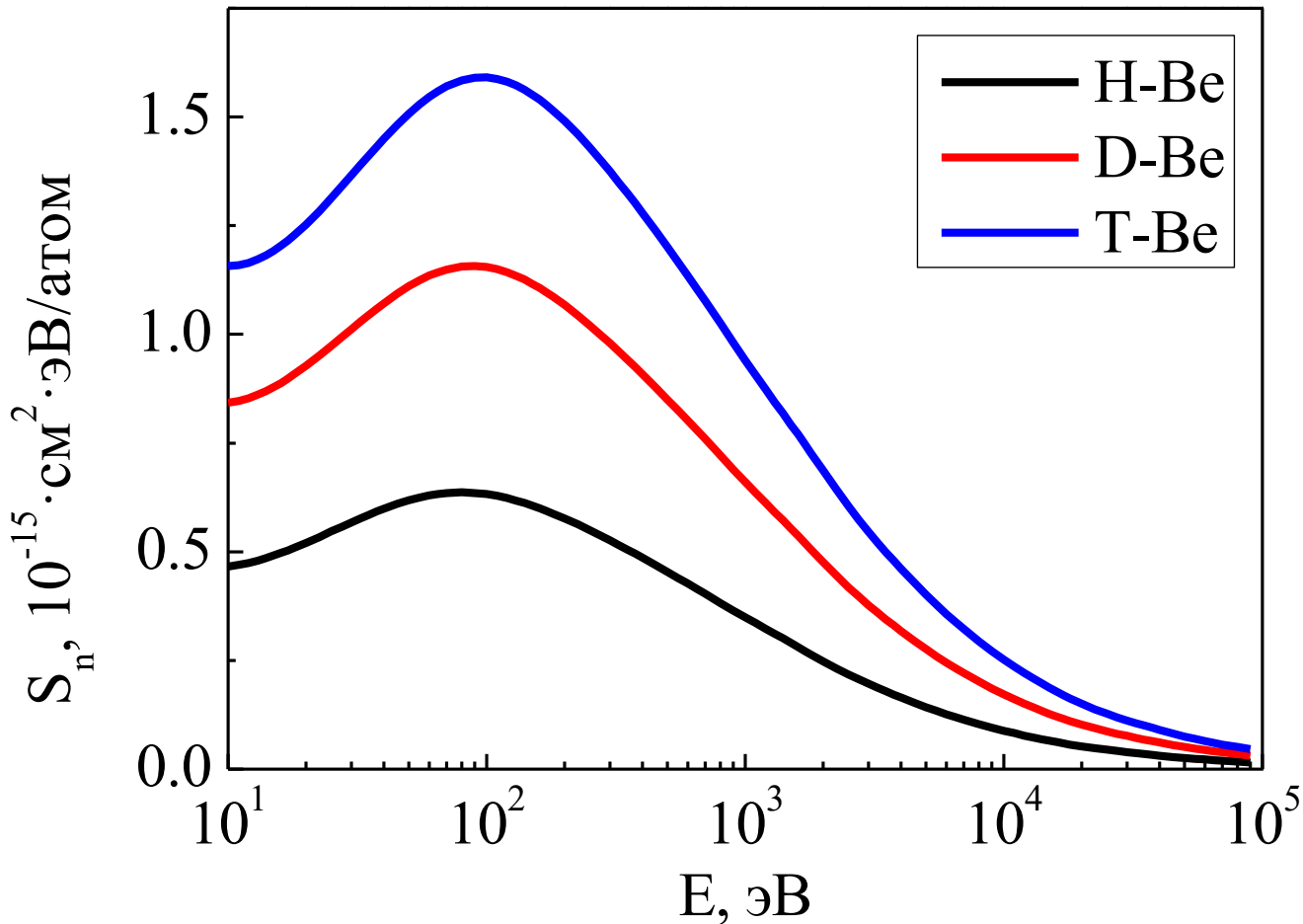
M_1 и M_2 – массы сталкивающихся частиц

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

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 - ε

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

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

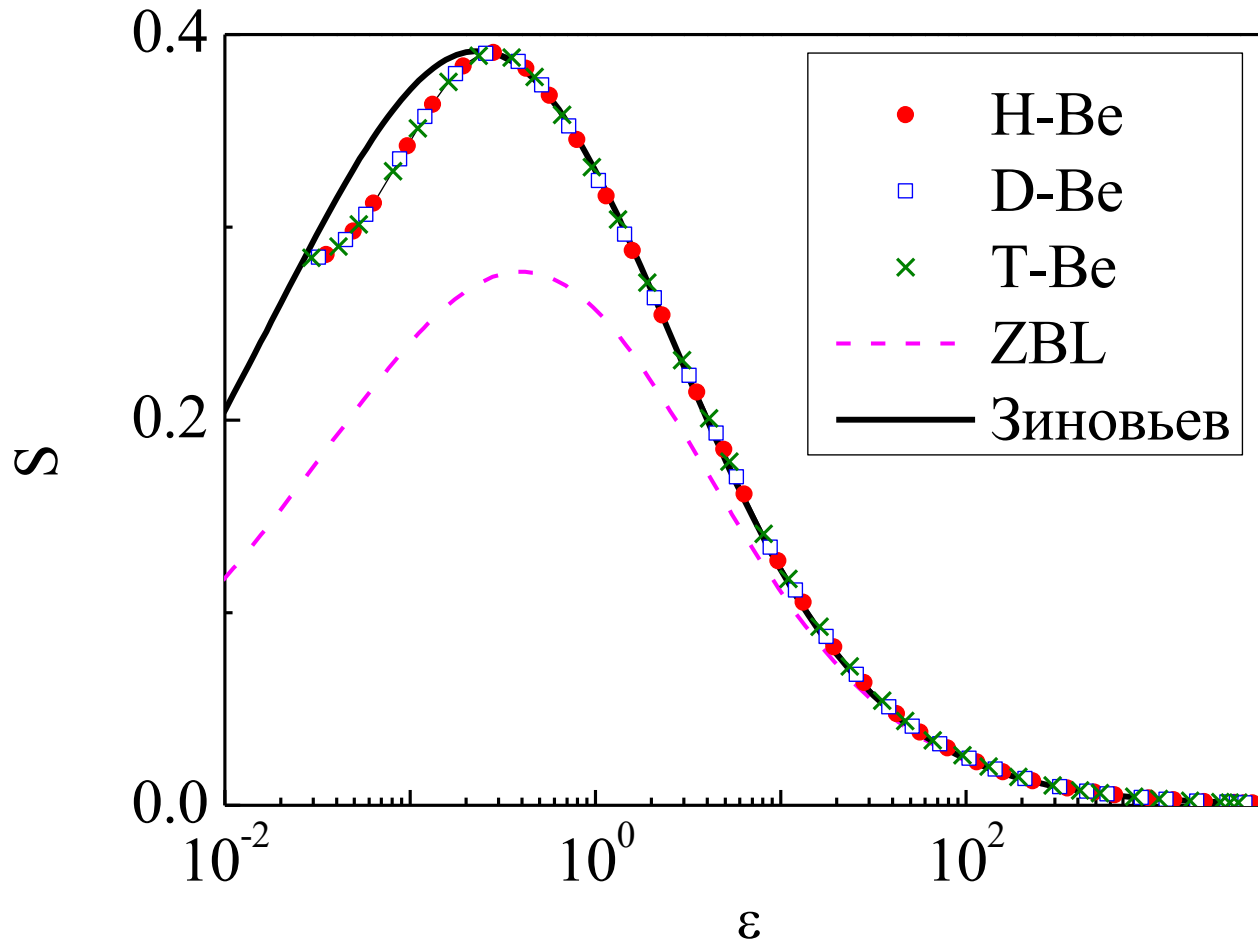
M_1 – масса налетающей частицы, Z_1 – заряд налетающей частицы

M_2 – масса атома мишени, Z_2 – заряд атома мишени

e – заряд электрона

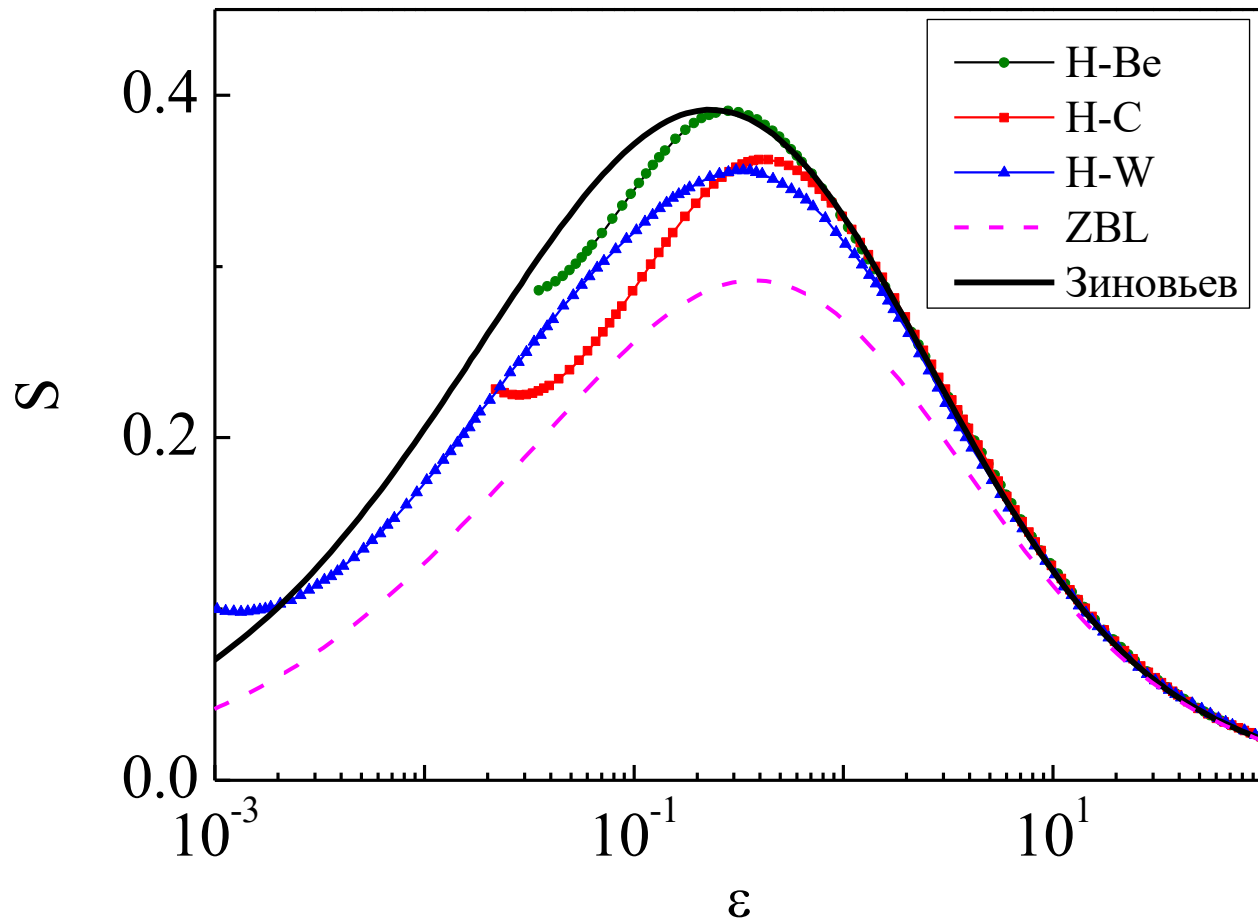
S – сечение торможения

Ядерные тормозные способности изотопов водорода в бериллии



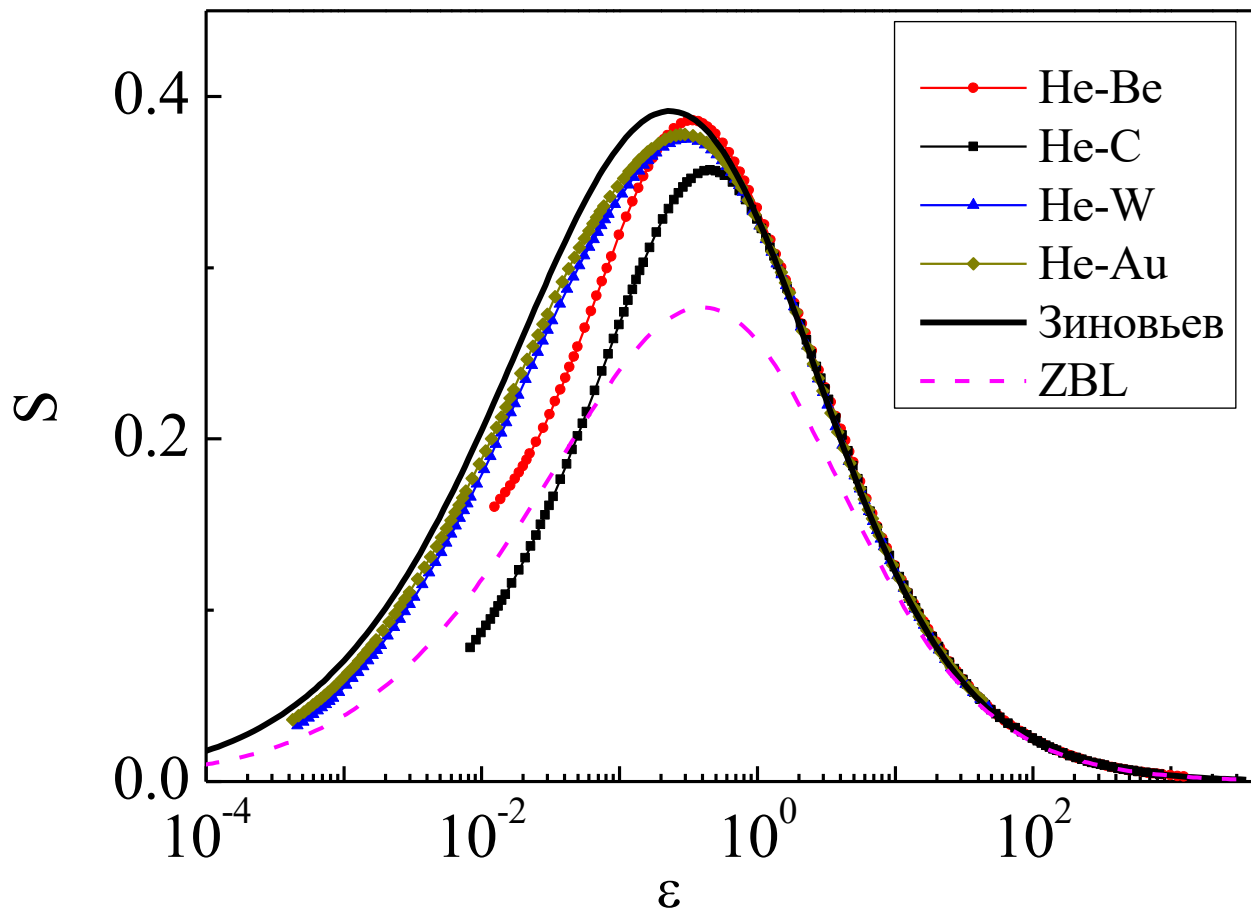
Сравнение вычисленных данных об ЯТС при столкновениях изотопов водорода с бериллием в универсальных координатах. Данные хорошо описываются единой кривой. Представлено сравнение с результатами, получаемыми при использовании потенциалов Зиновьева и ZBL.

Ядерные тормозные способности водорода в бериллии, углероде и вольфраме



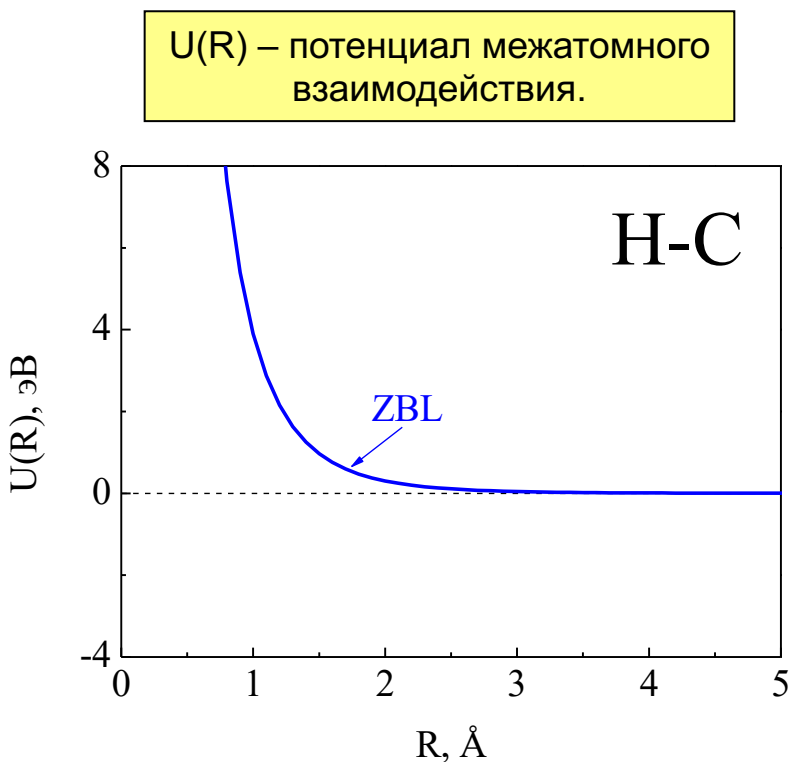
ЯТС для столкновений водорода с мишенями из бериллия, углерода и вольфрама. Приведено сопоставление с результатами расчетов при использовании потенциалов Зиновьева и ZBL.

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

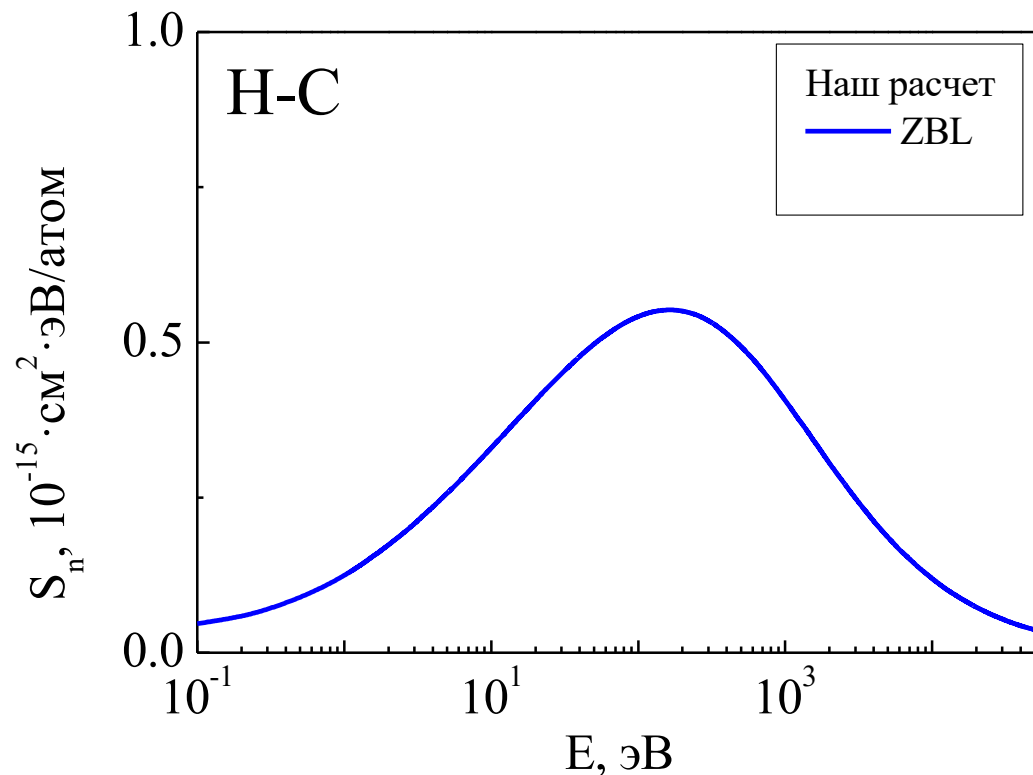


ЯТС для столкновений атомов гелия с Be, C, W и Au в универсальных координатах. Представлены также расчеты с использованием потенциалов Зиновьева и ZBL.

Сечение ядерного торможения для потенциала ZBL

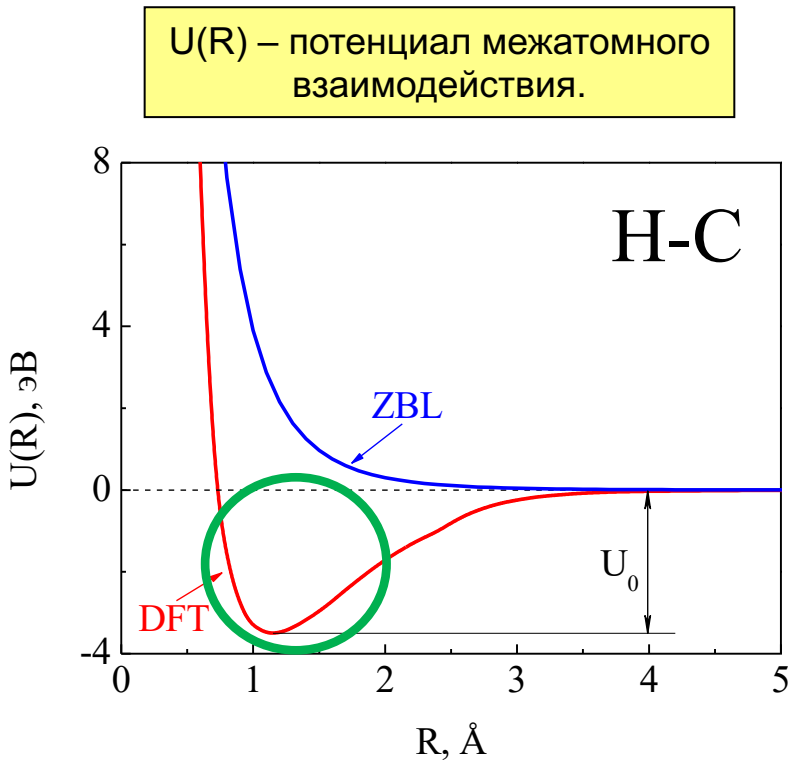


ZBL – Ziegler, Biersack, Littmark
Циглер, Бирзак, Литтмарк



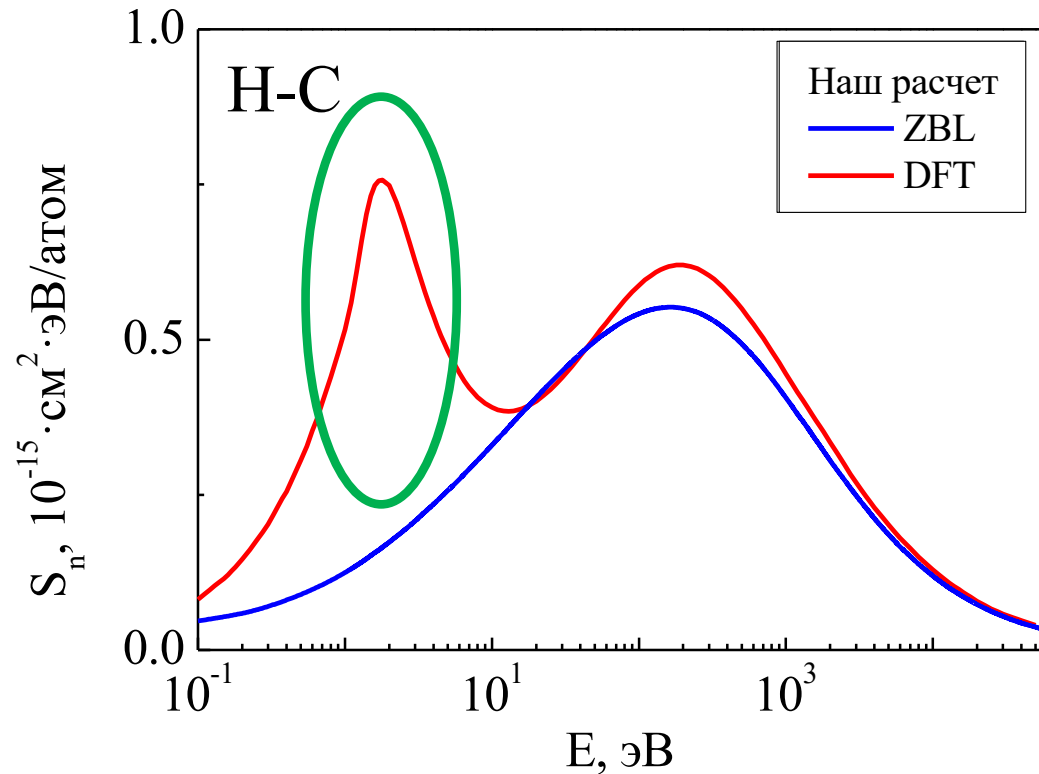
Сечение ядерного торможения для столкновений атомов H с C в зависимости от энергии атома водорода. Синяя линия расчет с использованием потенциала ZBL.

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.

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

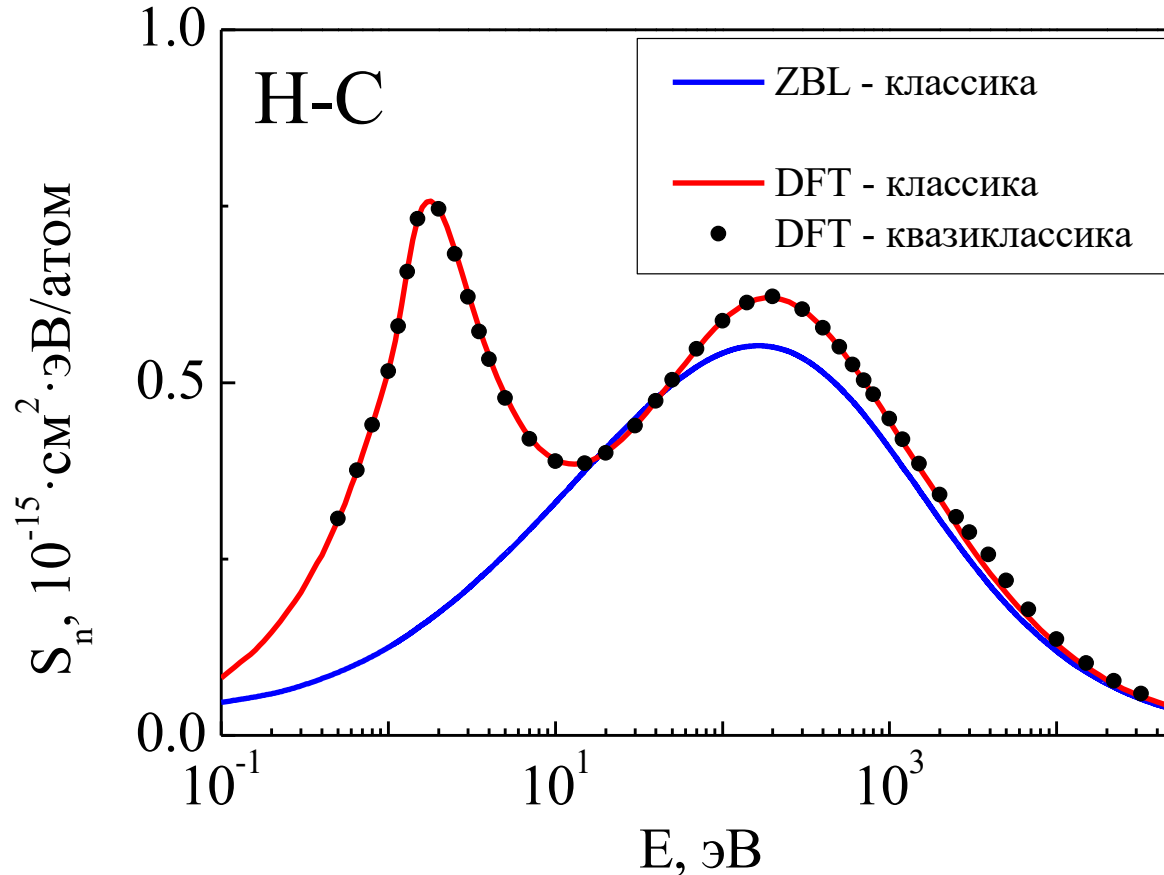
k – импульс в СЦМ, l – орбитальное квантовое число, δ_l – фаза рассеяния (3).

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

где r – межъядерное расстояние, μ - 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.



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.