

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАЕКТОРИЙ АТОМОВ ВОДОРОДА И ДЕЙТЕРИЯ В ПОЛЯРИЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКАХ

А. А. ВАСИЛЬЕВ<sup>1</sup>, М. Е. ВЗНУЗДАЕВ<sup>1</sup>, К. А. ИВШИН<sup>1</sup>, С. С. КИСЕЛЕВ<sup>2</sup>,  
П. А. КРАВЦОВ<sup>1</sup>, А. Н. СОЛОВЬЕВ<sup>1</sup>, И. Н. СОЛОВЬЕВ<sup>1</sup>, С. Г. ШЕРМАН<sup>1</sup>, Р. ЭНГЕЛЬС<sup>3</sup>

<sup>1</sup>ПНИЯФ НИЦ „ Курчатовский институт“, 188300, Гатчина, Россия,  
E-mail: marat@pnpi.spb.ru

<sup>2</sup>Университет ИТМО, 197101, Санкт-Петербург, Россия

<sup>3</sup>Исследовательский центр Юлих, 52425, Юлих, Германия

Международный эксперимент PolFusion направлен на исследование методом столкновения пучков в вакууме  $dd$  ядерного синтеза при условии поляризации исходных дейтронов. Основными элементами экспериментальной установки являются источники поляризованных пучков атомарного водорода и дейтерия. Для получения достаточно интенсивных поляризованных пучков необходима оптимизация этих источников путем построения их математической модели с вычислением траекторий атомов в высокоградиентных магнитных полях. Описано построение трехмерной математической модели источника и ее программной реализации. В качестве иллюстрации приведены результаты вычислений для источника ANKE ABS, проведено сравнение расчетов по трехмерной модели с экспериментальными данными и расчетами по аналогичной двумерной модели. Показано преимущество трехмерного подхода.

**Ключевые слова:** поляризованный ядерный синтез, источник поляризованных атомарных пучков, математическое моделирование атомарных пучков, водород, дейтерий.

**Введение.** Эксперимент PolFusion [1] осуществляется международной коллаборацией в составе исследователей из России, Германии, Италии и Нидерландов на базе Лаборатории криогенной и сверхпроводящей техники (ЛКСТ)\* Петербургского Института ядерной физики\*\* с участием сотрудников и студентов Университета ИТМО. Проект направлен на исследование [2] реакции синтеза дейтронов со спиновой поляризацией исходных компонентов при энергии столкновения (10—100 кэВ). Поскольку интенсивность пучка поляризованного источника определяет частоту исследуемых физических событий, а значит и объем набранной в эксперименте статистики, то моделирование и оптимизация параметров источников приобретают решающее значение.

Обнаруженный Штерном и Герлахом [3] эффект пространственного разделения атомов по спину в неоднородном магнитном поле используется для получения пучков поляризованных атомов водорода и дейтерия [4, 5]. Устройство для решения такой задачи называется источником поляризованного атомарного пучка.

---

\* <<http://lkst.ru>>.

\*\* <<http://www.pnpi.spb.ru>>.

Для оптимизации источника поляризованного атомарного пучка и получения пучков высокой интенсивности необходимо создание соответствующей математической модели установки. Основой такой модели является алгоритм построения траекторий атомов в высокоградиентных магнитных линзах, используемых для получения поляризации.

Компьютерное моделирование траекторий применяется при создании поляризованных источников не впервые [6, 7]. В традиционных подходах используется существенно упрощенное предположение о цилиндрической симметрии системы: расчетные траектории атомов лежали в плоскости, проходящей через ось магнитной системы. Это позволяло проводить только двумерное моделирование траекторий. В реальной системе частицы имеют максвелловское распределение скоростей по всем трем координатам, следовательно, подобное упрощение является лишь приближением.

В настоящей работе представлено описание модели и реализующей ее программы, которая осуществляет трехмерный расчет траекторий атомов в магнитной системе источника поляризованного атомарного пучка.

**Положения основы математической модели.** Атомы являются электрически нейтральными объектами и для изменения траектории их движения используются высокоградиентные магнитные поля. Для их создания применяют многополюсные магнитные системы (магнитные линзы), в которых пространственное разделение движущихся атомов обеспечивается избирательной фокусировкой или дефокусировкой атомов с определенным спиновым состоянием (рис. 1, здесь 1 — элемент секступольного магнита, ориентация магнитного поля для каждого элемента обозначена стрелкой; 2 — дефокусированный пучок; 3 — сфокусированный пучок).

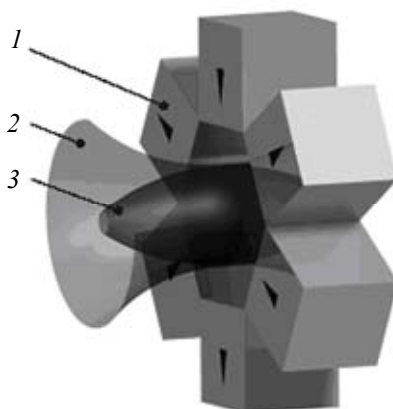


Рис. 1

Рассмотрим движение атома во внешнем магнитном поле  $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ . Сила, действующая на атом, определяется его магнитным моментом, умноженным на величину градиента магнитного поля. Энергия атома во внешнем магнитном поле зависит от абсолютной величины поля, поэтому при движении в неоднородном магнитном поле кинетическая и потенциальная энергия атома переходят одна в другую. В результате на атом действует сила  $\mathbf{F}$ , направленная вдоль или против градиента абсолютной величины магнитного поля:

$$\mathbf{F} = -\nabla E^{(i)}, \quad (1)$$

где  $E^{(i)}$  — энергия  $i$ -го стационарного состояния атома. Направление этой силы определяется знаком магнитного момента атома.

Так как для расчета силы, действующей на атом, аддитивная составляющая энергии роли не играет, в дальнейшем все  $E^{(i)}$  будут приводиться относительно значения энергии связи электрона в основном состоянии атома без поля (13,6 эВ).

Рассмотрим простейший случай атома водорода. Его основное (1S) состояние во внешнем магнитном поле ( $B = |\mathbf{B}|$ ) имеет четыре стационарных состояния с энергией:

$$E^{(1)} = A_{\text{H}} - (\mu_e + \mu_p) B, \quad (2)$$

$$E^{(2)} = -A_{\text{H}} + \sqrt{4A_{\text{H}}^2 + (\mu_e - \mu_p)^2 B^2}, \quad (3)$$

$$E^{(3)} = A_{\text{H}} + (\mu_e + \mu_p) B, \quad (4)$$

$$E^{(4)} = -A_{\text{H}} - \sqrt{4A_{\text{H}}^2 + (\mu_e - \mu_p)^2 B^2}, \quad (5)$$

где  $\mu_e = -5,79509 \cdot 10^{-9}$  эВ/Гс — магнитный момент электрона,  $\mu_p = 8,804315 \cdot 10^{-12}$  эВ/Гс — магнитный момент протона,  $A_{\text{H}} = 1,47132 \cdot 10^{-6}$  эВ — постоянная сверхтонкой структуры, равная одной четверти энергии расщепления основного состояния водорода при отсутствии магнитного поля. Нумерация энергий в данном случае идет от более высокого к более низкому уровню энергии.

В случае дейтерия основное (1S) состояние расщепляется уже на шесть стационарных состояний, выражения для которых расписываются так же, как для водорода.

Траектория движущейся частицы описывается уравнением Ньютона:

$$\frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \frac{1}{m} \mathbf{F}. \quad (6)$$

Для атомов в определенных состояниях сверхтонкого расщепления уравнение (6) принимает вид:

$$\frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -\frac{1}{m} \nabla E^{(i)}. \quad (7)$$

В общем случае для вычисления силы, действующей на летящую частицу, следует задать  $\mathbf{B}(\mathbf{r})$  и  $\nabla |\mathbf{B}(\mathbf{r})|$  при всех доступных для частиц значениях  $\mathbf{r}$ . Для идеальных многополюсных линз модуль величины магнитного поля зависит только от расстояния до оси линзы, соответственно градиент величины магнитного поля направлен по радиусу цилиндрической системы координат:

$$B(r) = B_0 \left( \frac{r}{r_0} \right)^{\frac{N}{2}-1}, \quad (8)$$

где  $B_0$  — магнитное поле на внутренней поверхности  $N$ -полюсного магнита ( $N \geq 4$ ) с отверстием радиуса  $r_0$ . Таким образом, для атомов водорода во внешнем магнитном поле в точке с координатами  $(x, y, z)$ ,  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$  можно написать значение силы  $F_r^{(i)}$  для состояния  $i$ :

$$F_r^{(1)} = -\frac{\partial E^{(1)}}{\partial r} = (\mu_e + \mu_p) \frac{\partial B}{\partial r} = B_0 \left( \frac{N}{2} - 1 \right) \frac{(\mu_e + \mu_p)}{r_0^{\frac{N}{2}-1}} r^{\frac{N}{2}-2}, \quad (9)$$

$$F_r^{(2)} = -\frac{1}{2} \frac{2(\mu_e - \mu_p)^2 B}{\sqrt{4A_{\text{H}}^2 + (\mu_e - \mu_p)^2 B^2}} \frac{\partial B}{\partial r}, \quad (10)$$

$$F_r^{(3)} = -F_r^{(1)}, \quad (11)$$

$$F_r^{(4)} = -F_r^{(2)}. \quad (12)$$

Атомы в состояниях 1 и 2, когда сила направлена к оси магнита, фокусируются, а в состояниях 3 и 4 — дефокусируются. Сила, действующая на атомы в состояниях 1 и 3 (так называемых „чистых состояниях“), не зависит от величины магнитного поля, а только от градиента и выражается степенной функцией от  $r$ .

Для моделирования процесса прохождения магнитной системы поляризованного источника атомами водорода или дейтерия необходимо создать генератор начального положения атома и вектора его скорости. При создании генератора возникает ряд проблем, связанных с неопределенностью режима течения газа и его температуры в разреженном состоянии. В связи с этим необходимо ввести ряд допущений, позволяющих компенсировать неполноту физической картины истечения газа из сопла. Корректность этих допущений будет установлена сопоставлением результатов расчета характеристик пучка по предложенной модели с экспериментальными данными, доступными для некоторых поляризованных источников.

При моделировании траектории движения атома за начальную точку принимается выход сопла так называемого диссоциатора, в котором происходит преобразование молекулярного водорода или дейтерия в атомарный, а за конечную — выход из источника, апертура определенного диаметра. Пространство между этими двумя точками занимает магнитный тракт, образованный системой линз различной полярности и магнитной силы.

Традиционным при моделировании траекторий движения атомов является допущение, что их движение на всем пути от сопла диссоциатора до выхода из источника не зависит от траектории остальных атомов. Атомы при этом начинают свое движение непосредственно от среза сопла в свободно-молекулярном режиме. Это крайне упрощенный подход, и в настоящей работе предлагается способ учета изменений режима течения газа. Предполагается, что атомы начинают движение от плоскости  $z = z_0$ , на которой „разыгрываются“ [8] начальные условия — координаты и компоненты скорости (рис. 2). Плоскость  $z_0$  не совпадает с плоскостью сопла, а отстоит от него на некотором расстоянии, соответствующем возникновению свободно-молекулярного режима движения атомов.

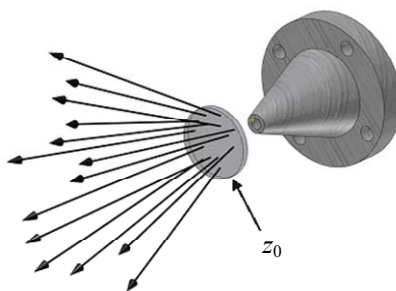


Рис. 2

В предложенной модели приближенно состояние газа для начального генератора может быть описано четырьмя параметрами:  $V_{\text{drift}}$  — средняя продольная скорость атомов пучка;  $T_{\text{eff}}$  — значение температуры пучка, которое получил бы наблюдатель, двигаясь со скоростью  $V_{\text{drift}}$  вдоль пучка;  $z_0$  — (за „0“ принимается положение сопла);  $r_0$  см. (8).

Начальные координаты  $(x, y, z)$  равномерно „разыгрываются“ в круге  $x^2 + y^2 \leq r_0^2$ , где  $r_0 \geq r_{\text{nozzle}}$  ( $r_{\text{nozzle}}$  — радиус сопла). Скорости атомов „разыгрываются“ в соответствии с распределением Максвелла при температуре распределения  $T_{\text{eff}}$  и к „разыгранному“  $z$ -компоненту

скорости добавляется  $V_{\text{drift}}$ . Эффективность магнитной системы оценивается по отношению количества частиц, достигших мишени, к числу частиц, проникших в первую линзу.

**Программная реализация модели.** Частицы со свойствами (начальными координатами, направлением движения, температурой, спином), заданными генератором начальных условий, движутся в поле внешних сил, создаваемых магнитными линзами, объединенными в магнитный тракт. Для каждой частицы существует два возможных исхода этого движения — „гибель“ в результате столкновения со стенками либо успешный выход за пределы магнитного тракта и попадание в апертуру заданного диаметра, расположенную на некотором расстоянии от выхода. Для определения эффективности магнитного тракта с точки зрения избирательной фокусировки определенного спинового состояния необходимо построить траекторию каждой отдельной частицы на всем протяжении тракта и проанализировать статистику попаданий частиц в выходную апертуру для всей совокупности „разыгранных“ событий.

Как было показано выше, задача построения траектории отдельной частицы сводится в общем случае к решению системы уравнений (7) по всем трем координатам. Введя обозначение  $\mathbf{V} = \frac{d\mathbf{r}}{dt}$ , перейдем от системы трех уравнений второго порядка к системе шести уравнений первого порядка, решить которую можно с помощью компьютерной программы. Для каждой „разыгранной“ частицы такая программа должна обладать возможностью:

— задавать значения пространственных координат и компонентов скорости в начальной точке;

— вычислять значения компонентов силы, действующей на частицы, и задавать значения пространственных координат и компонентов скорости в любой точке пространства.

Программа написана на языке FORTRAN с использованием подпрограммы решения систем дифференциальных уравнений `ddeqbs.f` из свободно распространяемой библиотеки CERN Program Library (CERNLIB) [9]. Для визуализации результатов расчета применен широко используемый при обработке экспериментальных данных пакет ROOT [10].

Важнейшими исходными данными для программы являются сведения о конструкции магнитной системы: геометрия, напряженность поля у поверхности магнитов, число полюсов в каждой линзе и т.д. Необходимо также задать точность вычисления и начальный шаг приращения пространственных координат.

Программа вычисляет значения координат и скоростей частицы через заданный промежуток времени итерационным методом. В качестве параметра невязки выступает разность между значениями положения конечной точки траектории в двух последовательных итерациях.

Результаты работы программы формируются в выходной файл, содержащий таблицу значений координат и скоростей частиц во всех расчетных точках.

Программа обеспечивает возможность отбора полученных данных по различным критериям. Так, для визуализации картины внутри поляризованного источника предусмотрена возможность записи в файл абсолютно всех созданных треков или треков, дошедших до мишени (выходной апертуры).

**Примеры моделирования реальных источников.** На рис. 3 и 4 представлены результаты моделирования источника поляризованных пучков ANKE ABS [6], работающего в исследовательском центре Юлих, Германия [11]. Приведены смоделированные профили пучка для фокусирующегося (рис. 3, а) и дефокусирующегося (рис. 4, а) состояния атомов, а также соответствующие им диаграммы плотности распределения частиц на выходе из источника (б). Рисунки наглядно демонстрируют разницу в работе магнитной системы для разного спинового состояния атомов.

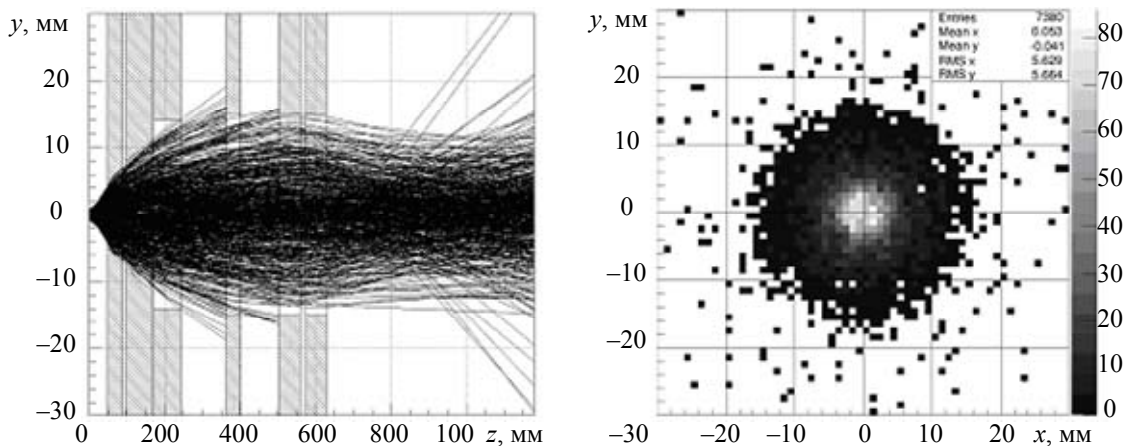


Рис. 3

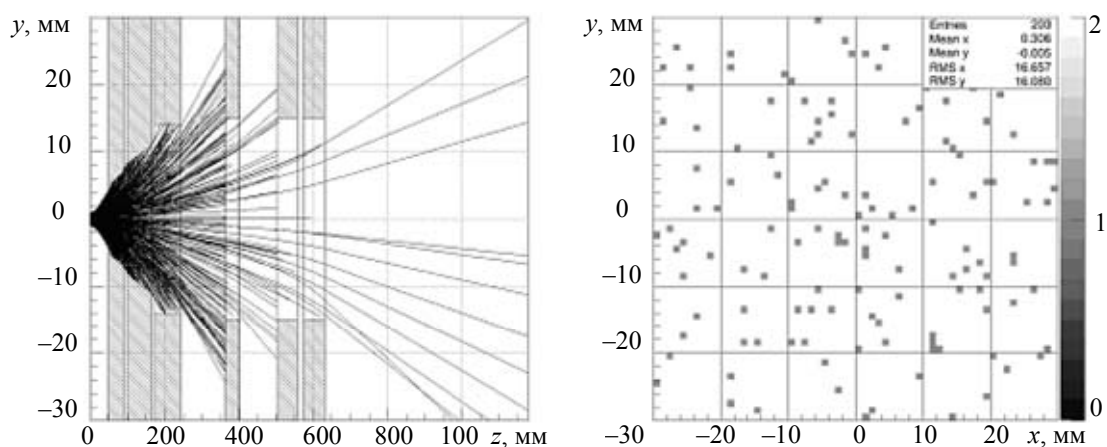


Рис. 4

В основе разработки трехмерной модели лежит предположение, что она позволит повысить точность моделирования профиля атомарного пучка. Пример различия между двумерным (1) и трехмерным (2) расчетами (3 — эксперимент) приведен на рис. 5.

На нем построен профиль атомарного пучка ANKE ABS [6], измеренный в рабочих условиях при помощи квадрупольного масс-спектрометра. Для этих же параметров источника пучков выполнено моделирование траекторий атомов в источнике по двумерной и трехмерной методике. Все профили нормированы на число частиц  $f$ , долетевших до выхода из источника (площадь профиля). Видно удовлетворительное согласие профиля пучка при трехмерном моделировании с экспериментальными данными. Двумерная модель предсказывает существенно более узкий пучок атомов, вступая в противоречие с экспериментом.

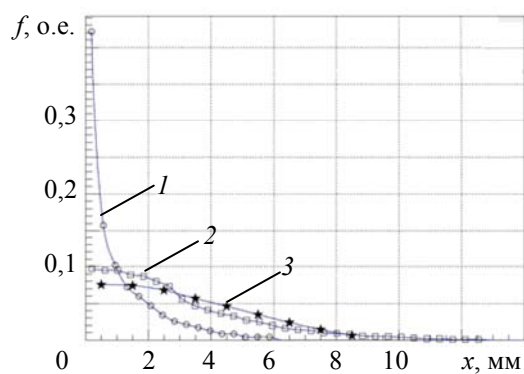


Рис. 5

**Заключение.** В результате проведенной работы создана и программно реализована методика трехмерного моделирования поляризованных атомарных пучков.

Моделирование траекторий атомов в магнитных полях позволяет рассчитывать влияние различных элементов источников поляризованных атомарных пучков на интенсивность, размеры пучков и другие параметры, предсказывать и сужать область поиска оптимального режима работы источника.

С помощью программы проведены расчеты для источника поляризованных пучков ANKE ABS, для которого имеются доступные для сравнения экспериментальные данные.

Сопоставление предложенного расчета по трехмерной и двумерной методикам с экспериментальными данными показало существенное преимущество трехмерного подхода в точности описания профиля пучка.

Работа выполнена в рамках эксперимента PolFusion и поддержана грантом Российского научного фонда (проект № 14-12-01056РНФ).

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Engels R, Grigoryev K, Kochenda L, Kravtsov P, Mikirtychiants M, Rathmann F, Paetz gen. Schieck H, Ströher H, Trofimov V., Vasilyev A., Vznuzdaev M. Polarized fusion // Physics of Particles and Nuclei. 2014. Vol. 45, Is. 1. P. 341—343.
2. Терехин С. Н., Васильев А. А., Взнуздаев М. Е., Воронаев Н. И., Иванов И. Ю., Киселев С. С., Марусина М. Я., Кравцов П. А., Надточий А. В., Трофимов В. А. Приборная база эксперимента по исследованию сечения реакции dd-ядерного синтеза с поляризованными компонентами в проекте PolFusion // Изв. вузов. Приборостроение. 2011. Т. 54, № 7.
3. Gerlach W., Stern O. Der experimentelle Nachweis der Richtungsquantelung im Magnetfeld // Z. Phys. 1922. Bd 9. S. 349.
4. Dunham J. S., Galovich C. S., Glavish H. F., Hanna S. S., Mavis D. G., and Wissink S. W. Polarized gas jet targets // Nucl. Instrum. Methods. 1984. Vol. 219. P. 46.
5. Krämer D. et al. // Nucl. Instr. and Meth. 1984. Vol. 220. P. 123.
6. Mikirtychyants M., Engels R., Grigoryev K, Kleines H., Kravtsov P., Lorenz S., Nekipelov M., Nelyubin V., Rathmann F., Sarkadi J., H. Paetz gen. Schieck, Seyfarth H., Steffens E., Ströher H., Vasilyev A. The Polarized H and D Atomic Beam Source for ANKE at COSY // Nucl. Instrum. Methods. A. 2013. Vol. 721. P. 83—98.
7. Korsch W. Ph.D. Thesis, Philipps Universität Marburg, unpublished, 1990.
8. Соболев И. М. Метод Монте-Карло. М.: Наука, 1972. 64 с.
9. CERN Program Library [Электронный ресурс]: < <http://cernlib.web.cern.ch/cernlib/>>.
10. ROOT. A data analysis framework [Электронный ресурс]: < <http://root.cern.ch> >.
11. Forschungszentrum Jülich [Электронный ресурс]: < <http://www.fz-juelich.de>>.

#### Сведения об авторах

- Александр Анатольевич Васильев** — канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник; Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова; заведующий лабораторией; E-mail: vassilie@pnpi.spb.ru
- Марат Евгеньевич Взнуздаев** — канд. хим. наук, старший научный сотрудник; Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова; E-mail: vznuzdaev@gmail.com
- Кузьма Александрович Ившин** — младший научный сотрудник; Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова; E-mail: kuzmaivshin@gmail.com
- Сергей Степанович Киселев** — канд. техн. наук, доцент; Университет ИТМО; кафедра световодной фотоники; E-mail: kss212@mail.ru
- Петр Андреевич Кравцов** — канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник; Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова; E-mail: pkravt@gmail.com
- Александр Николаевич Соловьев** — Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова; стажер; E-mail: solo.alex.nik@gmail.com
- Иван Николаевич Соловьев** — Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова; стажер; E-mail: ivan.solessi@gmail.com
- Семен Григорьевич Шерман** — канд. физ.-мат. наук, старший научный сотрудник; Петербургский институт ядерной физики им. Б. П. Константинова; E-mail: sherman@pnpi.spb.ru
- Ральф Энгельс** — доктор; Институт ядерной физики Исследовательского центра Юлих; E-mail: r.w.engels@fz-juelich.de

**Ссылка для цитирования:** Васильев А. А., Взнуздаев М. Е., Ившин К. А., Киселев С. С., Кравцов П. А., Соловьев А. Н., Соловьев И. Н., Шерман С. Г., Энгельс Р. Моделирование траекторий атомов водорода и дейтерия в поляризованных источниках // Изв. вузов. Приборостроение. 2015. Т. 58, № 12. С. 1008—1015.

## SIMULATING TRAJECTORIES OF HYDROGEN AND DEUTERIUM ATOMS IN POLARIZED SOURCES

A. A. Vasilyev<sup>1</sup>, M. E. Vznuzdaev<sup>1</sup>, K. A. Ivshin<sup>1</sup>, S. S. Kiselev<sup>2</sup>,  
P. A. Kravtsov<sup>1</sup>, A. N. Solovyev<sup>1</sup>, I. N. Solovyev<sup>1</sup>, S. G. Sherman<sup>1</sup>, R. Engels<sup>3</sup>

<sup>1</sup> St. Petersburg Nuclear Physics Institute of the National Research Center "Kurchatov Institute",  
188300, Gatchina, Leningrad district, Russia,  
E-mail: marat@pnpi.spb.ru

<sup>2</sup> ITMO University, 197101, St. Petersburg, Russia

<sup>3</sup> Forschungszentrum Jülich GmbH, 52425, Jülich, Germany

The international PolFusion experiment devoted to investigation of nuclear dd-fusion reaction with polarized initial particles is considered. A mathematical model of the polarized source is proposed to simulate high intensity polarized beams using calculation and optimization of the atomic trajectories in high-gradient magnetic fields. A significant achievement of the described model is calculation of three-dimensional trajectories instead of cylindrical two-dimensional calculations used in former models. Basic approaches used in the trajectories calculations are described, results of calculation carried out for ANKE ABS polarized source are presented as an illustration. An advantage of the three-dimensional approach is demonstrated.

**Keywords:** polarized nuclear fusion, atomic beam source, mathematical simulation of atomic beams, hydrogen, deuterium.

### Data on authors

<b>Alexander A. Vasilyev</b>	— PhD, Senior Scientist; Petersburg Nuclear Physics Institute; Head of Laboratory; E-mail: vassilie@pnpi.spb.ru
<b>Marat E. Vznuzdaev</b>	— PhD, Senior Scientist; Petersburg Nuclear Physics Institute; E-mail: vznuzdaev@gmail.com
<b>Kuzma A. Ivshin</b>	— Junior Scientist; Petersburg Nuclear Physics Institute; E-mail: kuzmaivshin@gmail.com
<b>Sergey S. Kiselev</b>	— PhD, Associate Professor; ITMO University, Department of Light-Guided Photonics; E-mail: kss212@mail.ru
<b>Petr A. Kravtsov</b>	— PhD, Senior Scientist; Petersburg Nuclear Physics Institute; E-mail: pkravt@gmail.com
<b>Alexander N. Solovyev</b>	— Petersburg Nuclear Physics Institute; Intern; E-mail: solo.alex.nik@gmail.com
<b>Ivan N. Solovyev</b>	— Petersburg Nuclear Physics Institute; Intern; E-mail: ivan.solessi@gmail.com
<b>Semen G. Sherman</b>	— PhD, Senior Scientist; Petersburg Nuclear Physics Institute; E-mail: sherman@pnpi.spb.ru
<b>Ralf Engels</b>	— PhD; Institute of Nuclear Physics, Research Center Jülich; E-mail: r.w.engels@fz-juelich.de

**For citation:** Vasilyev A. A., Vznuzdaev M. E., Ivshin K. A., Kiselev S. S., Kravtsov P. A., Solovyev A. N., Solovyev I. N., Sherman S. G., Engels R. Simulating trajectories of hydrogen and deuterium atoms in polarized sources // Izvestiya Vysshikh Uchebnykh Zavedeniy. Priborostroyeniye. 2015. Vol. 58, N 12. P. 1008—1015 (in Russian).

DOI: 10.17586/0021-3454-2015-58-12-1008-1015