

- [10] M.K. Issanova, S.K. Kodanova, T.S. Ramazanov, D.H.H. Hoffmann. Contrib. Plasma Phys. 56, 425 (2016).
- [11] M.T. Gabdullin, S.K. Kodanova, T.S. Ramazanov, M.K. Issanova, T.N. Ismagambetova. Nukleonika 61, №2, 125 (2016).
- [12] M.K. Issanova, S.K. Kodanova, T.S. Ramazanov, N.Kh. Bastykova, Zh.A. Moldabekov, C.-V. Meister. Laser and Particle Beams, 34, 457-466 (2016).
- [13] Д. Рихтер. CLR via C#. Программирование на платформе Microsoft .NET Framework 4.5 на языке C#. 4-е изд., изд. Питер, 2016. – 896 с.
- [14] К. Нагел, Б. Ивъен, Дж. Глинн, К. Уотсон, М. Скиннер. C# 4.0 и платформа .NET 4 для профессионалов, изд. Вильямс, 2011. – 1440 с.
- [15] T.S. Ramazanov, S.K. Kodanova, N.Kh. Bastykova, Zh.A. Moldabekov, M.K. Issanova. Communications in Computational Phys., Vol. 15, 2014, 981-995.
- [16] Г. Шилдт. C# 4.0, изд. Вильямс, 2015. – 1056 с.
- [17] Н. А. Литвиненко. Технология программирования на C++, изд. БХВ-Петербург, 2010. – 281 с.
- [18] M. Mahdavi and T. Koohrokh. Physical Review E 85, 016405 (2012).
- [19] J.R. Adams, N.S. Shilkin, V.E. Fortov, V.K. Gryaznov, V.B. Mintsev, R. Redmer, H. Reinholz, and G. Ropke. Phys. Plasmas. Vol. 14. P. 062303 (2007).
- [20] D.H.H. Hoffmann et al. Phys. Rev. Vol. A 42. P. 2313 (1990).

Коданова С.К., Исанова М.К., Слямова Э.С.

Тығыз плазмадағы иондардың тәжелуін есептеу үшін бағдарламалық модуль құру

Түйіндеме. Осы жұмыстың шенберінде тиімді бөлшектердің өзара әрекеттесу потенциалын пайдалана отырып, кулондық логарифм негізінде тығыз плазмалық тәжеу процестерін есептеу, талдау және визуализациялау үшін бағдарламалық кешен әзірленді. Бағдарламалық модуль пайдаланушыларды графикалық интерпретация және кесте түрінде кең ақпаратпен қамтамасыз етеді. Құрылған автоматтандырылған кешен инерциялық термоядролық синтездегі тығыз плазма қасиеттерін зерттеудің ынғайлы және сенімді құралы болып табылады. Жасалынған бағдарламалық кешен идеалды емес тығыз плазманың қасиеттерін зерттеу және моделдеу үшін теориялық және қолданбалы мәнге ие. Бағдарламалық модульдер негізінде алынған сандық нәтижелер басқа авторлардың теориялық және тәжірибелік жұмыстарымен салыстырылып, жақсы келісімдерге ие болды.

Түйін сөздер: тығыз плазма, инерциялық термоядролық синтез, бағдарламалық кешен, компьютерлік моделдеу, визуалдау

Kodanova S.K., Issanova M.K., Slyamova E.S.

Creation of the program module for calculation of ion stopping in a dense plasma

Summary. In this work developed the software package for calculation, analysis and visualization of the stopping processes in dense plasma based on the Coulomb logarithm using an effective interaction potential. The software module provides users with extensive information as graphical interpretations as well as in table. Created automated complex is a convenient and reliable means to investigate properties of the dense plasma of inertial thermonuclear fusion. Software package developed by the project has both theoretical and practical importance for the investigation and simulation of non-ideal dense plasma properties. The numerical results obtained on the basis of software modules were compared with the theoretical and experimental works of other authors and have good agreement.

Keywords: dense plasma, inertial confinement fusion, software complex, computer simulation, visualization.

УДК 533.9:004.9

С.К. Коданова¹, Т.С. Рамазанов¹, М.К. Исанова^{1*}, Р.И. Голятина², С.А. Майоров²

(¹Научно-исследовательский институт экспериментальной и теоретической физики,

Казахский национальный университет имени Аль-Фараби, г. Алматы, Казахстан

²Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, Москва, Россия,

*E-mail: moldir.issanova@gmail.com)

**ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ТРАЕКТОРИЙ ИОНОВ В ПЛОТНОЙ ПЛАЗМЕ,
РАССЧИТАННЫХ МЕТОДОМ МОНТЕ КАРЛО**

Аннотация. В работе методом Монте Карло проведен расчет торможения ионов в плотной плазме инерционного термоядерного синтеза. Результатом компьютерного моделирования являются численные данные по динамическим характеристикам, такие как, тормозные потери, средний угол рассеяния, глубина

проникновения, эффективный пробег частиц. Также по итогам работы была создана программа трехмерной визуализации траекторий ионов в плотной плазме инерционного термоядерного синтеза.

Ключевые слова: плотная плазма, торможение, двухтемпературная плазма, инерционный термоядерный синтез, тяжелые ионы, мишени инерционного термоядерного синтеза.

Введение. Плотная горячая плазма является предметом активных теоретических исследований [1-8]. В частности, эти исследования актуальны в связи с экспериментами NIF (National Ignition Facility) [9] и экспериментами на Z-пинче в Сандиа [10]. Для получения термоядерной реакции в вышеуказанных объектах, необходимо изучить такие динамические свойства, как тормозная способность [11-18], коэффициенты переноса плотной плазмы. Расчет параметров термоядерной мишени тяжелоионного инерциального синтеза требует адекватного количественного описания процессов взаимодействия тяжелоионных пучков с плотной плазмой в широком диапазоне параметров. Поэтому, чтобы знать свойства плотной плазмы в разных условиях, наиболее привлекательным является компьютерное моделирование, которое дает ответ на многие важные вопросы, необходимых для использования плотной плазмы ИТС при решениях энергетических проблем.

В настоящее время существует достаточно много программ позволяющих проводить моделирование процесса ионной имплантации в твердые тела, не прибегая к эксперименту. Моделирование происходит с некой долей погрешности и пока не способно полностью заменить реальные эксперименты, но его результаты оказывают неоценимую помощь в проведении исследований. Наиболее известными программами являются SRIM (The Stopping and Range of Ions in Matter) [19] и Geant4 [20].

Постановка задачи. Рассмотрим силы взаимодействия между тяжелыми частицами - нейтральной и заряженной, т.е. между ионом и атомом. Хорошо исследована экспериментально и теоретически задача взаимодействия электрона с атомом и ионом. Природа этого взаимодействия может быть очень сложна и на близких расстояниях часто необходимо использовать квантовомеханическую модель. Взаимодействие же тяжелых частиц часто можно свести к классической задаче, в которой их движение определяется потенциалом взаимодействия и соответствующей ему силой. И хотя взаимодействие электронных оболочек носит квантовый характер, задача взаимодействия тяжелых частиц может быть сведена к задаче рассеяния частицы при движении в потенциальном поле в классическом приближении. Рассмотрим различные виды ион – атомного взаимодействия в процессе столкновения: поляризационное притяжение иона к атому, передачу заряда и короткодействующее отталкивание, определяющее газокинетические свойства газов. Определим энергию столкновения $\varepsilon_r = m v_{12}^2 / 4 = \varepsilon_{12} / 2$, равную полной кинетической энергии сталкивающихся частиц в системе центра масс, и эффективный диаметр столкновения d , связанный с диффузионным сечением соотношением $\sigma_d = \pi d^2$.

Ион поляризует атомы своим электрическим полем и взаимодействует с индуцированными диполями. Потенциальная энергия этого взаимодействия для расстояний, больших диаметра атома и меньших среднего межатомного расстояния $N^{-1/3}$ равна:

$$U(r_{12}) = -\frac{\alpha Ry a_0^4}{r_{12}^4}, \quad (1)$$

где r_{12} - расстояние между атомом и ионом, $\alpha = \alpha_0 / a_0^3$, α_0 - поляризуемость атома, $a_0 = 0.529 \times 10^{-8}$ см – радиус Бора, $Ry = 13.6$ эВ – постоянная Ридберга, N – числовая плотность атомов. Сечение поляризационных столкновений $\sigma_{pol} \propto 1/v_{12}$. Для определения подвижности иона в случае преобладания поляризационных столкновений пригодна модель постоянной (не зависящей от скорости) частоты столкновений иона. Естественно, что на больших расстояниях важны эффекты экранировки, а на малых расстояниях не работает линейное приближение для поляризации. Тем не менее, поляризационное приближение дает очень хорошую точность для коэффициентов подвижности ионов в несобственном газе.

Модель абсолютно жестких, упругих сфер является хорошим приближением для описания взаимодействия атомов на близких расстояниях при небольших энергиях столкновения. Газокинетическое сечение в модели столкновений упругих сфер равно:

$$\sigma_{gas} = \pi d_{gas}^2, \quad (2)$$

где d_{gas} эффективный диаметр атомов может быть определен из данных о вязкости газов [21].

Задача столкновения двух жестких сфер с разными диаметрами d_1 и d_2 , массами m_1 и m_2 , может быть сведена к задаче рассеяния одной частицы на неподвижном центре. На близких расстояниях, сравнимых с диаметром атома, ион отталкивается от атома из-за взаимодействия электронных оболочек. Короткодействующую отталкивательную часть потенциала взаимодействия при энергиях столкновения $\varepsilon_r < Ry$ можно аппроксимировать зависимостью

$$U(r_{12}) = U_0 \exp(-r_{12}/a_d), \quad (3)$$

где U_0, a_d - положительные константы [22]. В этом случае диффузионное сечение равно:

$$\sigma_d = \pi d^2 = \pi a_d^2 \ln^2(U_0/\varepsilon_r). \quad (4)$$

Это сечение слабо зависит от энергии столкновения, поэтому при сближении иона с атомом до расстояния порядка атомного размера, можно использовать модель твердых сфер с диаметром $d_{sphere} = \frac{1}{2}(d_{gas} + d_{ion})$. В качестве диаметра иона можно выбрать диаметр атомов из данных о вязкости газов.

При больших энергиях $\varepsilon_r \gg Ry$ и малых прицельных параметрах ион с атомом могут сближаться до расстояний, меньших диаметра атома. В этом случае ион с атомом взаимодействуют, как экранированные кулоновские частицы с зарядом ядер Ze . Это взаимодействие с хорошей точностью описывается потенциалом Юкавы:

$$U(r_{12}) = \frac{Z^2 e^2}{r_{12}} \exp(-r_{12}/a_d) \quad . \quad (5)$$

Алгоритм для моделирования ион - атомных столкновений. Для моделирования ион-атомных столкновений при движении иона в однородном электрическом поле проводилось интегрирование уравнений движения ионов. Для этого использовалась стандартная схема Рунге-Кутты второго порядка точности. На каждом шагу по времени разыгрывалось столкновение иона с атомом. Перечислим основные этапы разработанного алгоритма ион - атомного столкновения:

- 1) в системе центра масс сталкивающихся частиц в соответствии с вероятностью столкновения случайным образом выбираются скорости и прицельный параметр столкновения;
- 2) при движении частиц в системе центра масс с поляризационным потенциалом взаимодействия (1) определяются: расстояние наибольшего сближения r_{min} , относительная скорость частиц в точке наибольшего сближения $v_{12}(r_{min})$, угол рассеяния χ ;
- 3) если $r_{min} > d_{gas}$, то скорости иона и атома отклоняются на угол χ ;
- 4) если $r_{min} < d_{gas}$, то скорости иона и атома пересчитываются в соответствии с законом столкновения упругих сфер, расстояние наибольшего сближения полагается равным $r_{min} = d_{gas}$, определяется относительная скорость частиц в точке наибольшего сближения $v_{12}(r_{min})$;
- 5) вычисляется сечение резонансной перезарядки $\sigma_{res}(v_{12}(r_{min}))$ для относительной скорости частиц в момент наибольшего сближения $v_{12}(r_{min})$;

6) если расстояние наибольшего сближения $r_{\min} < r_{ct} = (2\sigma_{res}(v_{12}(r_{\min}))/\pi)^{1/2}$, то с вероятностью $1/2$ скорости иона и атома меняются;

7) пересчитываются скорости в лабораторной системе, накапливается статистика по различным характеристикам столкновений.

Разработанный алгоритм воспроизводит известное решение кинетического уравнения Больцмана для дрейфа заряженных твердых сфер [23], подвижность в пределе слабого поля [24], а также известные теоретические результаты по кинетике столкновения упругих сфер [21].

Результаты. В данной работе методом Монте Карло проведено моделирование траекторий ионов в плотной плазме инерционного термоядерного синтеза. Главным преимуществом расчета методом Монте Карло состоит в том, что он позволяет учитывать любой физический процесс непосредственно. Например, локальные и нелокальные неупругие потери энергии, энергию связи между различными атомами, замещающие столкновения и так далее. Кроме того, можно получить точные решения для многокомпонентных и многослойных мишней сложной геометрии, что позволяет моделировать реальное взаимодействие плазмы с ионным пучком. В работе рассмотрена взаимодействие ионов ксенона в меди и бериллии, также ионов железа в смесидейтерия, трития и водорода при различных значениях энергий.

На рисунке 1 приведены траектории ионов ксенона с начальной энергией 5 кэВ, 15 кэВ и 30 кэВ в меди. На рисунке 2 приведены траектории ионов ксенона с начальной энергией 30 кэВ, 100 кэВ и 300 кэВ в бериллии. На рисунке 3 представлены траектории ионов железа в смесидейтерия, трития и водорода с начальной энергией 30 кэВ.

На рисунке 1 показаны результаты расчетов тормозных характеристик однозарядных ионов железа с начальной энергией изотопов водорода 30 кэВ с температурой 500 К: а) траектория ионов железа в изотопе водорода - протий; б) дейтерий; в) тритий.

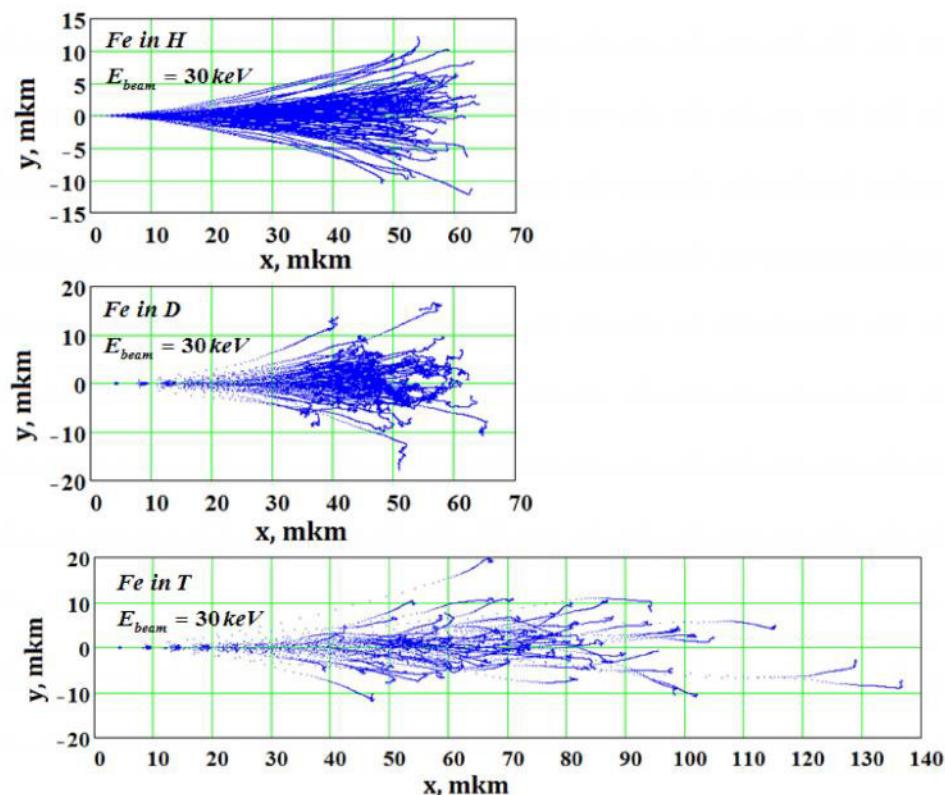


Рис. 1. Пробег ионов железа в смеси дейтерия, трития и водорода

На рисунке 2 показан пробег ионов ксенона в меди: а) с начальной энергией 5 кэВ; б) 15 кэВ; в) 30 кэВ. Зависимость энергии ионов хорошо известна экспериментальными данными ксенона в меди [25]. Еще одна интересная особенность этих результатов - эффект анизотропной дифференциальной дисперсионной остановки ионов (отрыв) в продольном направлении вдоль направления пучка примерно в два раза выше, чем в поперечном направлении. Более подробный анализ этого явления

будет выполнен в дальнейшей работе. На рисунке 3 показаны траектории ионов ксенона в меди, полученные из SRIM, для различных диапазонов начальной энергии. Наши расчеты с использованием методов Монте-Карло имеют хорошее согласие по сравнению с результатами SRIM, что подтверждает правильность наших расчетов и позволяет рассчитать другие динамические характеристики.

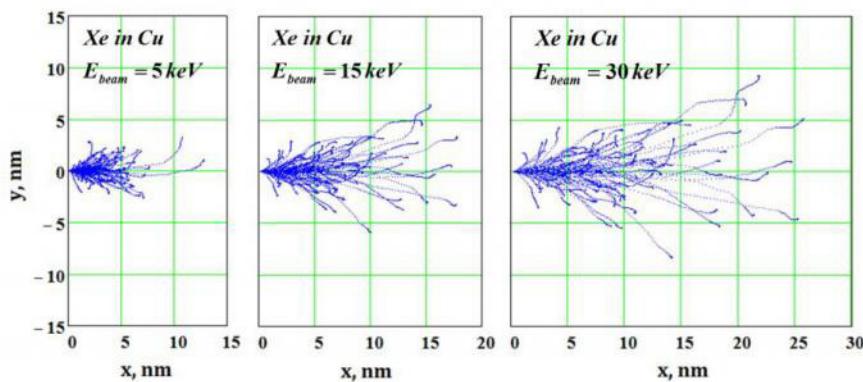


Рис. 2. Пробег ионов ксенона в меди

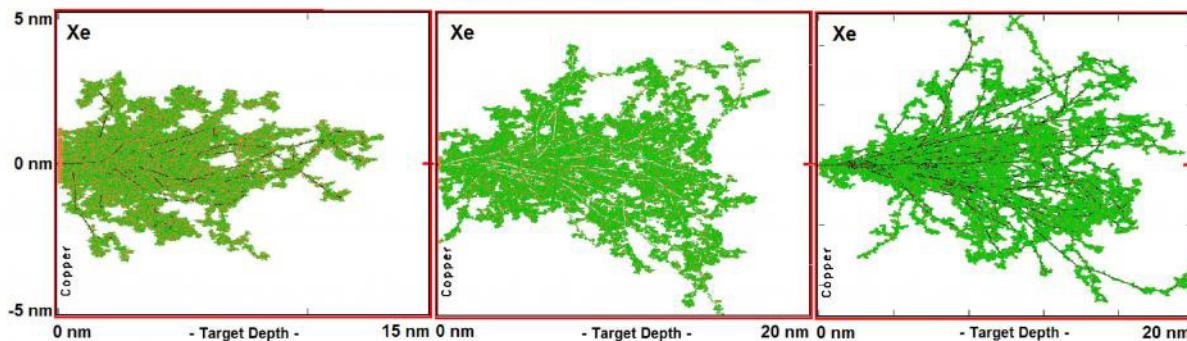


Рис. 3. Результаты, полученные из SRIM: траектории ионов ксенона в меди

Траектория каждого иона начинается с задания его положения, направления движения и энергии. Затем прослеживается последовательность столкновений иона с атомами мишени; между столкновениями свободный пробег иона предполагается прямолинейным. На пути каждого свободного пробега энергия частицы уменьшается на величину электронных потерь энергии, а затем, после столкновения, на так называемые ядерные, или упругие, потери энергии, т. е. на энергию, переданную атому мишени при столкновении.

Расчет методом Монте Карло основан на модели парных столкновений и траектория иона определяется рядом последовательных парных столкновений с атомами мишени. Это допущение может не соблюдаться при очень низких энергиях, когда заметное рассеяние ионов происходит даже на большом удалении от ядер атомов мишени, а также при моделировании имплантации высокоэнергетичных ионов. В последнем случае в конце траектории в области максимума упругих потерь энергии плотность атомов отдачи становится очень высокой и пренебречь их взаимодействием между собой нельзя.

Заключение. Инерционный синтез на тяжелых ионах более перспективен, так как более эффективно происходит поглощение энергии, выше частота повторения импульсов и больше энергия в импульсе. Основной энерговклад пучка тяжелых ионов в разных типах термоядерных мишеней происходит в плотной, высокотемпературной плазме, образованной этим же энерговкладом. Таким образом, пробеги тяжелых многозарядных ионов в мишени, и ионизационные потери обусловлены тормозной способностью плотной высокотемпературной плазмы. Поэтому, знание величин пробегов и профилей энерговклада быстрых и тяжелых, заряженных частиц в плазме позволят более точно определить характеристики термоядерной мишени.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Республики Казахстан в рамках гранта 3083/ГФ4 (2016).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Zh. A. Moldabekov, P. Ludwig, M. Bonitz, and T. Ramazanov // Phys. Rev. E. – 2015. – Vol. 91. – P. 023102.
- [2] Zh. A. Moldabekov, P. Ludwig, J.P. Joost, M. Bonitz, and T. Ramazanov // Contrib. Plasma Phys. -2015. – Vol.55. - P. 186.
- [3] S.K. Kodanova, T.S. Ramazanov, M.K. Issanova, Zh.A. Moldabekov, G. Nigmatova // Contrib. Plasma Phys. -2015. – Vol.55, No. 2-3, p. 271 – 276.
- [4] T. S. Ramazanov, S. K. Kodanova, Zh. A. Moldabekov, and M. K. Issanova // Phys. Plasmas. – 2013. – Vol. 20. – P. 112702.
- [5] M.K. Issanova, S.K. Kodanova, T.S. Ramazanov, D.H.H. Hoffmann // Contrib. Plasma Phys. – 2016. – Vol. 56. – № 5. – P. 425-431.
- [6] M.K. Issanova, S.K. Kodanova, T.S. Ramazanov, N.Kh. Bastykova, Zh.A. Moldabekov, C.-V. Meister // Laser and Particle Beams. – 2016. – Vol. 34. – P. 457-466.
- [7] M.K. Issanova, M.T. Gabdullin, S.K. Kodanova, T.S. Ramazanov, T. Ismagambetova // Nukleonika. - 2016, - Vol. 61. - №2. – P. 125.
- [8] P. E. Grabowski, M.P. Surh, D.F. Richards, F.R. Graziani, and M.S. Murillo // Phys. Rev. Lett. – 2013. – Vol. 111. – P. 215002.
- [9] L. X. Benedict et al // Phys. Rev. E. – 2012. – Vol. 86. – P. 046406.
- [10] Woo-Pyo Hong and Young-Dae Jung // Phys. Plasmas. – 2015. – Vol. 22. P. 012701.
- [11] Dae-Han Ki and Young-Dae Jung // Phys. Plasmas. – 2010. – Vol. 17. – P. 074506.
- [12] O. Hurricane et al // Nature. – 2014. – Vol. 506. – P. 343.
- [13] M. E. Cuneo et al // IEEE Trans. Plasma Science. – 2012. – Vol. 40. – P. 3222.
- [14] D. H. H. Hoffmann, A. Blazevic, P. Ni et al // Laser and Particle beams. – 2005. – Vol. 23. – P. 47.
- [15] D. H. H. Hoffmann, K. Weyrich, H. Wahl et al // Phys. Rev. A. – 1990. – Vol. 42. – P. 2313.
- [16] D. H. H. Hoffmann, J. Jacoby, W. Laux et al // Phys. Rev. Lett. – 1995. – Vol. 74. – P. 1550.
- [17] J. A. Frenje, P. E. Grabowski, C. K. Li, F. H. Seguin, A. B. Zylstra, M. Gatun Johnson, R. D. Petrasso, V. Yu Glebov, and T. C. Sangster // Phys. Rev. Lett. – 2015. – Vol. 115. – P. 205001.
- [18] A. B. Zylstra, J. A. Frenje, P. E. Grabowski, C. K. Li, G. W. Collins, P. Fitzsimmons, S. Glenzer, F. Graziani, S. B. Hansen, S. X. Hu, M. Gatun Johnson, P. Keiter, H. Reynolds, J. R. Rygg, F. H. Seguin, and R. D. Petrasso // Phys. Rev. Lett. – 2015. – Vol. 114. – P. 215002.
- [19] J.F. Ziegler, M.D. Ziegler, J.P. Biersack // Nucl. Instr. Meth. in Phys. Res. B. - 2010. - Vol. 268. - P. 1818–1823.
- [20] M.H. Mendenhall, R.A. Weller // NIM. - 2005. - Vol. 227. - P.420-430.
- [21] С.Ю. Лукьянов, Н.Г. Ковалевский // М.: МИФИ, 1999. – С. 425.
- [22] Г. Бёрд // М.: Мир, 1981.
- [23] И. Мак-Даниэль, Э. Масон // М.: Мир, 1976.
- [24] R.D. White, R.E. Robson, K.F. Ness // Com. Phys. Comm. - 2001. - Vol. 142. - P. 349.
- [25] Yu.V. Gott 1978 Interaction of particles with matter in plasma studies (Moscow: Atomizdat).

Коданова С.К., Рамазанов Т.С., Исанова М.К., Голятина Р.И., Майоров С.А.

Монте Карло әдісімен есептеген тығыз плазмадағы иондардың траекториясын визуализациялау

Түйинде. Жұмыста инерциялық термоядролық синтез тығыз плазмасының иондарының тежелуі Монте Карло әдісі арқылы есептеулер жүргізілді. Компьютерлік модельдеу нәтижесі болып энергия жоғалтулары, орташа шашырау бұрышы, енү терендігі, бөлшектердің тиімді жүруі сияқты динамикалық сипаттамалары бойынша сандық мәліметтер болып табылады. Жұмыс нәтижесінде термоядролық синтез тығыз плазмасының иондарының траекторияларын үшөлшемді визуалдау бағдарламасы жасалды.

Түйін сөздер: тығыз плазма, екікомпонентті плазма, инерциялық термоядролық синтез, ауыр иондар, инерциялық термоядролық синтез нысаналары.

Kodanova S.K., Ramazanov T.S., Issanova M.K., Golyatina R.I., Maiorov S.A.

Visualization ion trajectories in a dense plasma calculated by the method Monte Carlo

Summary. In this paper, the Monte Carlo method was used to simulate ion trajectories in a dense plasma of inertial confinement fusion. The results of computer simulation are numerical data on the dynamic characteristics, such as energy loss, penetration depth, the effective range of particles, stopping and straggling. By the results of the work the program of 3D visualization of ion trajectories in a dense plasma of inertial confinement fusion was developed.

Keywords: dense plasma, stopping, two-temperature plasma, inertial confinement fusion, heavy ions, inertial confinement fusion targets.