

01

Моделирование движения молекул H_2 и D_2 в секstupольных магнитах

© А.В. Юрченко,¹ Д.М. Николенко,² И.А. Рачек,² Д.К. Топорков,^{1,2} Ю.В. Шестаков^{1,2}

¹ Новосибирский государственный университет,
630090 Новосибирск, Россия

² Институт ядерной физики СО РАН,
630090 Новосибирск, Россия
e-mail: arseniy-1995@mail.ru

Поступило в Редакцию 24 октября 2018 г.

В окончательной редакции 24 октября 2018 г.

Принято к публикации 28 марта 2019 г.

Произведено моделирование движения молекул водорода и дейтерия в магнитной системе установки, предназначенной для получения поляризованных по ядерному спину молекул. Для пространственного разделения молекул с различными проекциями магнитных моментов методом спиновой фильтрации в неоднородном магнитном поле использованы сверхпроводящие секstupольные магниты. Расчет выполнен при индукции магнитного поля вблизи полюсов 3.7 Т и температуре сопла 7 К. Моделирование показало, что отношение поляризованного потока молекул водорода в детектор к полному потоку из сопла источника составляет $2.3 \cdot 10^{-6}$, при этом ядерная поляризация близка к 100%. Для дейтерия расчеты показали, что это отношение меньше в 7 раз из-за малости магнитного момента по отношению к молекулам водорода. Приведены графики траекторий молекул в магнитной системе и их пространственного распределения. Рассмотрены математические аспекты алгоритма разработанной компьютерной программы.

Ключевые слова: секstupольные магниты, дейтерий, Монте–Карло моделирования.

DOI: 10.21883/JTF.2019.09.48057.378-18

Введение

Все чаще в литературе обсуждается возможность применения поляризованного топлива в термоядерных реакциях синтеза для производства энергии [1]. Так, в случае полностью поляризованных ядер дейтерия и 3He сечение реакции синтеза увеличивается на 50%. Столь сильный эффект от наличия поляризации частиц, участвующих в реакции, был подтвержден экспериментально [2]. Также поляризованные молекулы могут быть использованы в качестве внутренних мишеней при проведении ускорительных экспериментов. Для получения высокоинтенсивных потоков поляризованных молекул водорода и его изотопов нужно знать динамику поляризации в молекулах при их столкновениях со стенками или при конденсации в жидкую или твердую фазу.

Современные источники поляризованных атомов водорода и дейтерия позволяют получать пучки интенсивностью около 10^{17} atoms/s. Подробный обзор существующих источников поляризованных атомов водорода приведен в работах [3,4]. Интенсивность таких источников принципиально ограничена рассеянием атомов друг на друге в плотном пучке, поэтому ожидать прогресса в развитии таких источников не приходится. Другой недостаток этих источников состоит в том, что накапливать и хранить поляризованный дейтерий/водород в атомарном состоянии не представляется возможным — неизбежно происходит рекомбинация атомов в молекулы.

Ранее была предложена схема реализации установки, в которой можно преодолеть оба вышеуказанных ограничения [5]. В работе [6] была продемонстрирована

принципиальная возможность получения поляризованных молекул изотопов водорода, используя для этого имеющийся в ИЯФ СО РАН источник поляризованных атомов дейтерия [7], содержащий секstupольные магниты. В основе метода получения поляризованных молекул лежит их пространственное разделение (сепарация) в сильном неоднородном магнитном поле. Подробное описание экспериментального стенда приведено в [8]. Экспериментальные результаты по получению поляризованных молекул приведены в [9,10]. Похожее исследование по изучению ядерной поляризации молекул водорода и дейтерия ведется в Юлихе (Германия) [11], где молекулы получают в результате рекомбинации атомов из „стандартного“ источника поляризованных атомов. Авторы наблюдают высокую ядерную поляризацию полученных таким образом молекул. Однако скорость производства молекул ограничена интенсивностью поляризованного пучка из источника.

Для расчета ожидаемой интенсивности источника была разработана программа Монте–Карло моделирования движения молекул в экспериментальной установке в присутствии неоднородного магнитного поля секstupольных магнитов. В настоящей работе рассмотрено движение нейтральной частицы, обладающей магнитным моментом, в неоднородном магнитном поле $2n$ -польного магнита.

В результате моделирования получены: пространственное распределение молекул водорода и дейтерия в месте расположения приемной трубки-детектора, обладающих различными проекциями магнитного момента, построены траектории молекул в экспериментальной

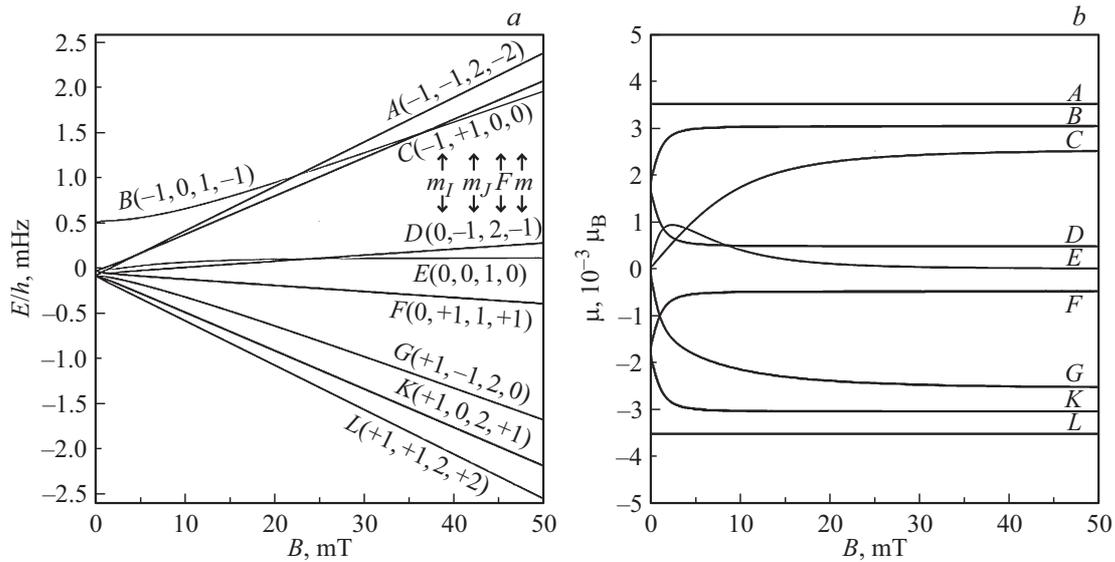


Рис. 1. *a* — сверхтонкая энергетическая структура молекулы водорода в магнитном поле [12]; m_I, m_J, m — проекции спинового I , орбитального J и полного F моментов соответственно; *b* — магнитные моменты молекул в соответствующих состояниях в единицах магнетона Бора (μ_B).

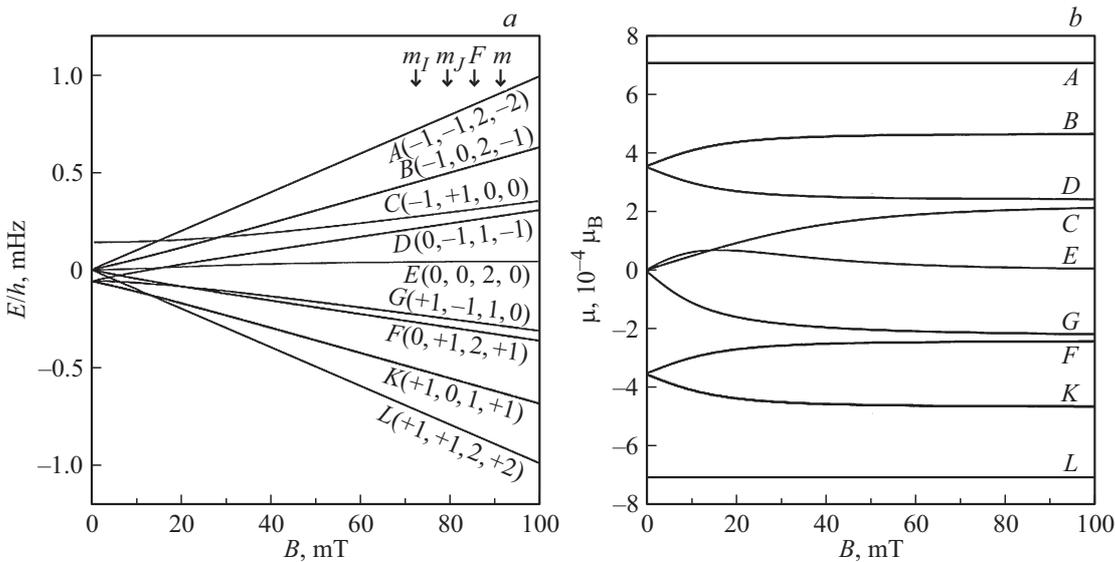


Рис. 2. *a* — сверхтонкая энергетическая структура молекулы дейтерия в магнитном поле [12]; m_I, m_J, m — проекции спинового I , орбитального J и полного F моментов соответственно; *b* — магнитные моменты молекул в соответствующих состояниях в единицах магнетона Бора (μ_B).

установке, рассчитаны число молекул, попадающих в приемную трубку-детектор по отношению к потоку из сопла, и векторная ядерная поляризация сфокусированной молекулярной струи.

Свойства молекул водорода и дейтерия

Как водород, так и дейтерий имеют два спиновых изомера, орто-состояние, когда спиновая волновая функция симметрична (спины ядер в молекуле водорода параллельны), и пара-состояние, когда спины антипа-

раллельны. При обычных условиях нормальный водород представляет собой смесь 3/4 орто- и 1/4 пара-модификации, а нормальный дейтерий — 2/3 орто- и 1/3 пара-модификации. При низких температурах термодинамически стабильны орто-модификация дейтерия и пара-модификация водорода. Самопроизвольное орто-пара-превращение при низких температурах происходит очень медленно. Молекулы водорода, имеющие различные проекции магнитного момента, могут быть пространственно разделены в неоднородном магнитном поле, что впервые было продемонстрировано в работе [12].

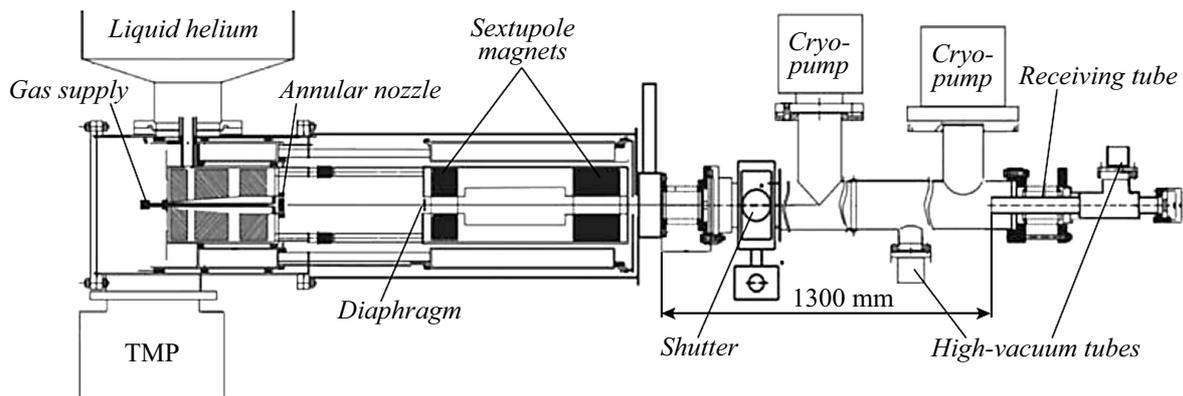


Рис. 3. Схема экспериментального стенда. ТМН — турбомолекулярный насос.

В работе [13] рассматривалась теория молекулярного водорода и дейтерия в магнитном поле. На основе теории возмущений автором были определены энергии уровней $E(B)$ сверхтонкой структуры этих молекул в пределе слабого и сильного магнитных полей. Приводятся уравнения кривых, которые показывают зависимость энергии квантовых состояний молекул от величины поля. Энергетические структуры девяти основных состояний молекул водорода и дейтерия в магнитном поле показаны на рис. 1, *a* и 2, *a*. Используя эти результаты, в настоящей работе вычислены эффективные магнитные моменты $\mu = \frac{\partial E}{\partial B}$ молекул водорода и дейтерия. Зависимости магнитного момента от поля B показаны на рис. 1, *b* и 2, *b*. Значения вычисленных магнитных моментов и их поведение в зависимости от величины поля использовались в расчетах. Поскольку молекулы имеют магнитный момент порядка ядерного магнетона, то для их отклонения в магнитном поле требуется больший градиент по сравнению с атомами, которые имеют магнитный момент порядка магнетона бора.

Описание магнитной системы экспериментального стенда

Экспериментальный стенд создан на базе компонентов имеющегося в ИЯФ источника поляризованных атомов дейтерия [8]. Источник содержит сверхпроводящие секstupольные магниты в криостате, содержащим жидкий гелий.

Для сепарации молекул водорода или дейтерия применяются два магнита [14]. Схема установки приведена на рис. 3. Внутренний диаметр трубки, определяющей доступную апертуру магнитов, равен $\varnothing 42$ мм. Два магнита длиной 7.0 см и 12.5 см, разделенные промежутком в 31 см, были применены для фокусировки пучка молекул. Толщина железного слоя между магнитами и трубкой 1 мм. Магнитное поле на расстоянии 22 мм от оси магнита при силе тока в обмотке 350 А имеет индукцию 3.7 Т и градиент магнитного поля 340 Т/м. Угол, на который отклоняется молекула водорода в области поля

с таким градиентом, движущаяся вначале вдоль полюса магнита и имеющая магнитный момент $3 \cdot 10^{-3} \mu_B$ и скорость 300 м/с, составляет около $1.5 \cdot 10^{-3}$ рад. Диск диаметром $\varnothing 40$ мм, установленный на входе в магнит, образует кольцевую диафрагму шириной 1 мм. Разместив на расстоянии 330 мм (это расстояние близко к максимально возможному для нашего источника поляризованных атомов) от диафрагмы источник молекул — кольцевое сопло, установленное соосно с магнитами, с наружным и внутренним диаметрами $\varnothing 41.9$ и $\varnothing 41.7$ мм (ширина щели сопла соответственно равна 0.1 мм), получим угловой разброс $\sim \pm 1.5 \cdot 10^{-3}$ рад для молекул, летящих из сопла вдоль оси магнита. Тепловым мостом сопло соединено с поверхностью, имеющей температуру жидкого гелия. С помощью нагревателя температуру сопла можно изменять в широких пределах, начиная от температуры жидкого гелия.

Диск, установленный на входе в магнит, образует тень за магнитом, куда молекулам невозможно попасть при выключенных магнитах, если они откачиваются криогенной поверхностью магнита с вероятностью, равной единице. На расстоянии 135 см от магнитов эта тень имеет диаметр > 30 мм. На этом расстоянии по оси магнитов (2185 мм от сопла) установлена приемная трубка-детектор $\varnothing 30$ мм и длиной 20 см. Она оканчивается объемом, в котором установлена высоковакуумная лампа, служащая для измерения давления газа на конце трубки. Иллюстрация геометрических размеров установки приведена на рис. 4.

Приемная трубка-детектор может перемещаться в поперечном направлении на расстояние ± 6 см, что позволяет измерить пространственное распределение интенсивности пучка в этом месте и выставить трубку по оси магнитов. При включении магнитного поля молекулы в состояниях с отрицательной проекцией спинового момента $m_l < 0$ (для молекул водорода это уровни *A*, *B*, *C* на рис. 1) отклоняются к оси и, попадая в трубку, повышают в ней давление.

Поток сфокусированных молекул определяется произведением повышения давления в приемной трубке и известной ее проводимостью. Экспериментальные ре-

В первом уравнении системы (6) введены обозначения

$$a = (r^2\dot{\varphi})^2 = \frac{L^2}{m^2} = \text{const} = (r_0^2\dot{\varphi}_0)^2, \quad (11)$$

где $L = mr^2\dot{\varphi} = \text{const} = mr_0^2\dot{\varphi}_0$ — механический момент молекулы, который сохраняется, что следует из второго уравнения (6) и можно выразить $\dot{\varphi}(t) = r_0^2\dot{\varphi}_0/r^2(t)$:

$$b = \frac{(n-1)\mu B_{\text{max}}}{m(r_{\text{max}})^{n-1}} = \text{const}. \quad (12)$$

Для решения первого уравнения системы (6) перейдем от дифференциального уравнения второго порядка к системе из двух уравнений первого порядка:

$$\dot{r} = \frac{a}{r^3} - br^{n-2} \rightarrow \begin{cases} \dot{r} = v_r \\ \dot{v}_r = \frac{a}{r^3} - br^{n-2} \end{cases} \quad (13)$$

с начальными условиями на влете частицы в магнитное поле $r(t=0) = r_0$, $v_r(t=0) = v_{r_0}$.

Нетрудно показать, что в частном случае секступольного магнита ($2n = 6$) и при условии, что магнитный момент частицы не зависит от величины поля ($\mu = \text{const}$), решение $r(t)$ имеет аналитический вид

$$r(t) = \begin{cases} \sqrt{2c/2b + A \cos(\lambda t + \delta)}, & \mu > 0 \\ \sqrt{c/2b + A \text{ch}(\lambda t + \delta)}, & \mu < 0 \end{cases}, \quad (14)$$

где $c = \dot{r}_0^2 + \frac{a}{r_0^2} + br_0^{k-1} = \text{const}$ — константа интегрирования, которая определяется из начальных условий в момент влета частицы в магнитное поле при $t = 0$, $A = 2\sqrt{(\frac{c}{4b})^2 - \frac{a}{4b}}$, $\lambda = 2\sqrt{|b|}$, фаза δ также может быть определена из начальных условий.

В случае, когда магнитный момент частицы зависит от величины магнитного поля (рис. 1, b и 2, b), задача может быть решена только численно. Для решения системы уравнений (13) в ходе разработки компьютерной программы использовался распространенный метод Рунге–Кутты 4-го порядка. В предельном случае, когда магнитный момент у всех частиц постоянный, результаты моделирования, полученные с использованием аналитического решения (14), сравнивались с результатами моделирования, полученными при численном решении уравнений (13). Это служило одной из проверок правильности работы компьютерной программы.

Интенсивность молекул, вылетающих под углом θ из источника, можно описать формулой

$$I(\theta) = I_0 \cos^n(\theta). \quad (15)$$

При $n = 1$ распределение интенсивности (15) из отверстия называется законом Ламберта. Интенсивность источника максимальна в направлении $\theta = 0$ и убывает с увеличением θ , становится равной нулю в касательных к поверхности излучения направлениях. Закон Ламберта применим для истечения газа из объема, а также

для истечения газа в свободномолекулярном (максвелловском) режиме из длинной трубки при его малом расходе. Степень n в распределении (15) характеризует направленность потока в перпендикулярном к плоскому источнику направлении. В моделировании считается, что $n = 1$.

Найдем связь между полным числом частиц N_0 , которые излучает источник, и интенсивностью вперед $I_0 = I(\theta = 0)$. Элемент телесного угла, в который излучает источник, дается выражением

$$d\Omega = \sin(\theta)d\theta d\varphi. \quad (16)$$

Тогда число частиц dN , летящих в телесный угол $d\Omega$ определяется как

$$dN = I_0 \cos^n(\theta) \sin(\theta)d\theta d\varphi. \quad (17)$$

Полное число частиц N_0 , которое излучил источник, вычисляется интегрированием этого выражения

$$N_0 = I_0 \int_{\theta=0}^{\theta=\pi/2} \int_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi} \cos^n(\theta) \sin(\theta)d\theta d\varphi = 2\pi I_0 / (n+1). \quad (18)$$

Выражение, с помощью которого определяется число частиц dN , летящих в телесный угол $d\Omega$, записывается следующим образом:

$$dN = N_0 \frac{n+1}{2\pi} \cos^n(\theta)d\Omega. \quad (19)$$

Из выражения (17) следует, что функция плотности вероятности по углу θ при $n = 1$ имеет вид $f(\theta) = a \cos(\theta) \sin(\theta)$. Из условия нормировки $\int_0^{\pi/2} f(\theta)d\theta = 1$ находим коэффициент $A = 2$. Таким образом, углы, под которыми вылетают молекулы из сопла, распределены по закону

$$f(\theta) = 2 \cos(\theta) \sin(\theta). \quad (20)$$

Для генерации угла θ по закону (20) используется метод обратной функции: $\theta = a \sin(\sqrt{\xi})$, где ξ — равномерно распределенная случайная величина на отрезке $[0;1]$.

В моделировании распределение молекул по площади источника было принято равномерным. Для круглого выходного отверстия источника молекул, внутренний радиус которого R_1 , а внешний R_2 , число молекул dN_ρ , находящихся в кольце радиуса $\rho \in (R_1 : R_2)$ и шириной $d\rho$, есть отношение соответствующих площадей колец

$$dN_\rho = N_0 \frac{2\pi\rho d\rho}{\pi(R_2^2 - R_1^2)}, \quad (21)$$

где N_0 — полное число молекул, вылетающих из сопла источника. Из (21) определяется плотность вероятности

вылетающих молекул из сопла источника по радиусу ρ

$$f(\rho) = A \frac{dN_\rho}{N_0 d\rho} = A \frac{2\rho}{R_2^2 - R_1^2}, \quad (22)$$

где $A = 1$ — нормировочная константа, определяемая из условия

$$\int_{R_1}^{R_2} f(\rho) d\rho = 1.$$

Используя метод обратной функции, получаем выражение для случайного радиуса ρ вылетающих молекул из сопла, распределенного по закону (22)

$$\rho = \sqrt{R_1^2 + \xi(R_2^2 - R_1^2)}, \quad (23)$$

где ξ — равномерно распределенная случайная величина на отрезке $[0;1]$. Полярный угол φ , определяющий начальные координаты вылета молекулы из сопла, распределен равномерно на отрезке $[0; 2\pi]$.

В процессе моделирования предполагалось максвелловское распределение молекул по скоростям. Функция плотности распределения Максвелла–Больцмана по модулю скорости молекул в объеме газа выглядит следующим образом:

$$f(v) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} v^2 e^{-\frac{mv^2}{2kT}}, \quad (24)$$

где m — масса молекулы, T — температура газа, $k = 1.38 \cdot 10^{23}$ J/K — постоянная Больцмана.

Распределение молекул по скоростям в пучке получается умножением (24) на вероятность вылета, пропорциональной скорости v . Таким образом, плотность распределения по модулю скорости для пучка имеет вид $f(v) = Avv^2 e^{-\frac{mv^2}{2kT}}$. Если молекулы имеют постоянный дрейф, то в экспоненциальное выражение добавляется дрейфовая скорость следующим образом:

$$f(v) = Av^3 e^{-\frac{m(v-v_d)^2}{2kT}}, \quad (25)$$

где v_d — дрейфовая или средняя скорость нетеплового упорядоченного движения молекул в пучке. Нормировочная константа определяется условием $\int_0^\infty f(v) dv = 1$, из которого находится, что

$$A = \left(\frac{m}{\sqrt{2kT}} \right)^2 / \left(\left[1 + \frac{mv_d^2}{2kT} \right] e^{-\frac{mv_d^2}{2kT}} + \frac{3}{4} \sqrt{2\pi} \frac{\sqrt{m}v_d}{\sqrt{kT}} \times \left[1 + \frac{mv_d^2}{3kT} \right] \left[1 + \operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{m}{2kT}} v_d \right) \right] \right).$$

Для функции плотности распределения скорости в молекулярном пучке при $v_d = 0$ имеем

$$f(v) = \left(\frac{m}{\sqrt{2kT}} \right)^2 v^3 e^{-\frac{mv^2}{2kT}}. \quad (26)$$

В моделировании положено, что $v_d = 0$. Характерная скорость молекул водорода при 7 К для такого распределения составляет около 300 m/s.

Направление скорости $v = (v_x, v_y, v_z)$ молекулы, вылетающей из сопла источника, задается двумя направляющими углами и модулем скорости

$$\begin{cases} v_x = v_0 \sin(\theta) \cos(\psi) \\ v_y = v_0 \sin(\theta) \sin(\psi) \\ v_z = v_0 \cos(\theta) \end{cases}. \quad (27)$$

Угол ψ распределен равномерно на отрезке $[0; 2\pi]$, угол θ распределен согласно закону (20).

Модуль скорости может быть разложен на компоненты

$$v_0^2 = v_\perp^2 + v_z^2, \quad (28)$$

где

$$v_\perp^2 = v_r^2 + v_\varphi^2, \quad (29)$$

причем

$$\begin{cases} v_r = v_0 \sin(\theta) \cos(\varphi - \psi) \\ v_\varphi = v_0 \sin(\theta) \sin(\varphi - \psi) \end{cases}. \quad (30)$$

В области, свободной от магнитных полей, скорости v_x, v_y, v_z сохраняются. При наличии поля скорости v_r и $v_\varphi = r\dot{\varphi}$ определяются из соответствующих уравнений Лагранжа (6), а скорость v_z сохраняется. На границе двух областей при наличии магнитного поля и без него происходит „сшивка“ соответствующих компонент скоростей, направляющих углов и координат.

Расчет векторной ядерной поляризации молекул производится по формуле

$$P_z = (N_+ - N_-)/(N_+ + N_0 + N_-), \quad (31)$$

где N_+, N_0, N_- — число молекул с соответствующим знаком проекции магнитного момента m_I , которые попали в детектор после фокусировки магнитами.

В основе работы алгоритма разработанной программы лежит метод Монте–Карло. Начальные параметры процесса движения молекул задаются при помощи генератора случайных чисел. Запускается цикл по числу частиц, генерируются начальные параметры задачи (скорость, координаты, углы) согласно их заданным распределениям. Далее прослеживается траектория единственной частицы. Этот процесс повторяется многократно, а затем на основе полученной статистики вычисляются усредненные вероятностные характеристики решаемой задачи (пространственное распределение, число молекул, которые попали в детектор, поляризация и т.д.).

Результаты моделирования и обсуждение

Компьютерная программа позволяет графически представлять траектории молекул на пути через магнитную систему. В моделировании принято, что если молекула

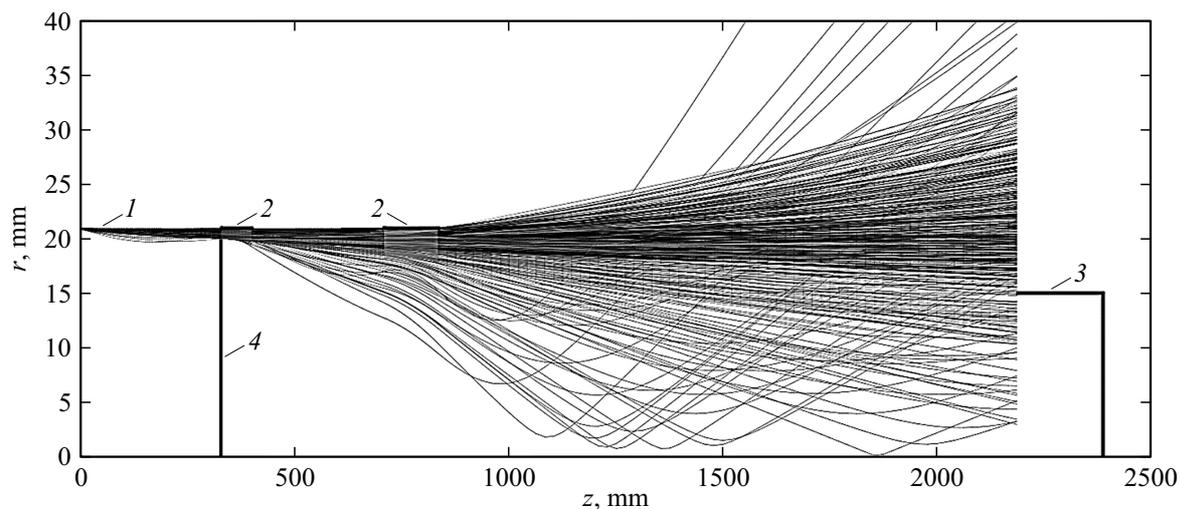


Рис. 5. Траектории молекул водорода в установке при включенных полях, зависимость координаты молекул $r(z)$: 1 — сопло источника молекул, 2 — два секступольных магнита, 3 — приемная трубка-детектор, 4 — диафрагма между соплом и входом в магнит. Показаны траектории только тех молекул, которые прошли всю магнитную систему (включая диафрагму) и не взаимодействовали с ее стенками.

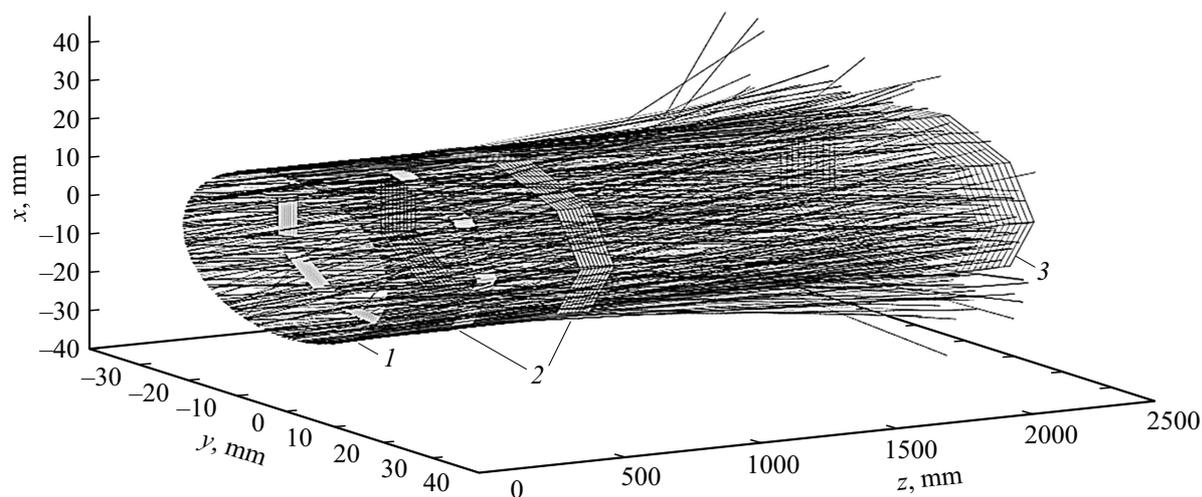


Рис. 6. Пространственные траектории молекул водорода в магнитной системе при включенных полях: 1 — сопло источника молекул, 2 — два секступольных магнита, 3 — приемная трубка-детектор.

ударилась о стенку вакуумной камеры или магнитов, то с вероятностью единица она поглотилась. По этой причине на графиках отображаются траектории только тех молекул, которые прошли через всю установку. На рис. 5 представлены траектории $r(z)$ молекул водорода вдоль установки. На рис. 6 показаны эти же траектории в пространственных координатах.

Распределения молекул водорода в плоскости расположения входного отверстия приемной трубки, полученные Монте-Карло моделированием при включенных и выключенных магнитах, приведены на рис. 7. В детектор попадают только сфокусированные молекулы с $m_l = -1$.

На рис. 8 представлены гистограммы пространственного распределения интенсивности пучка молекул водорода для каждой проекции $m_l = -1, 0, +1$ по от-

дельности и суммарные распределения для всех проекций, усредненные детектором. Усреднение происходит следующим образом: детектор-приемная трубка радиуса 15 мм перемещается поперек пучка и рассчитывается число частиц, которые попали в трубку при ее перемещении на определенное расстояние от оси установки.

Экспериментально измерялось пространственное распределение интенсивности пучка при выключенных и включенных магнитах. Гистограммы, полученные в результате моделирования, показаны на рис. 9. При отключенных полях (рис. 9, а) интенсивность пучка на оси магнитной системы ($R = 0$) близка к нулю. Это объясняется тем, что молекулы попадают в незначительной степени в приемную трубку-детектор, расположенную на оси магнитной системы. Однако измеряемое значение

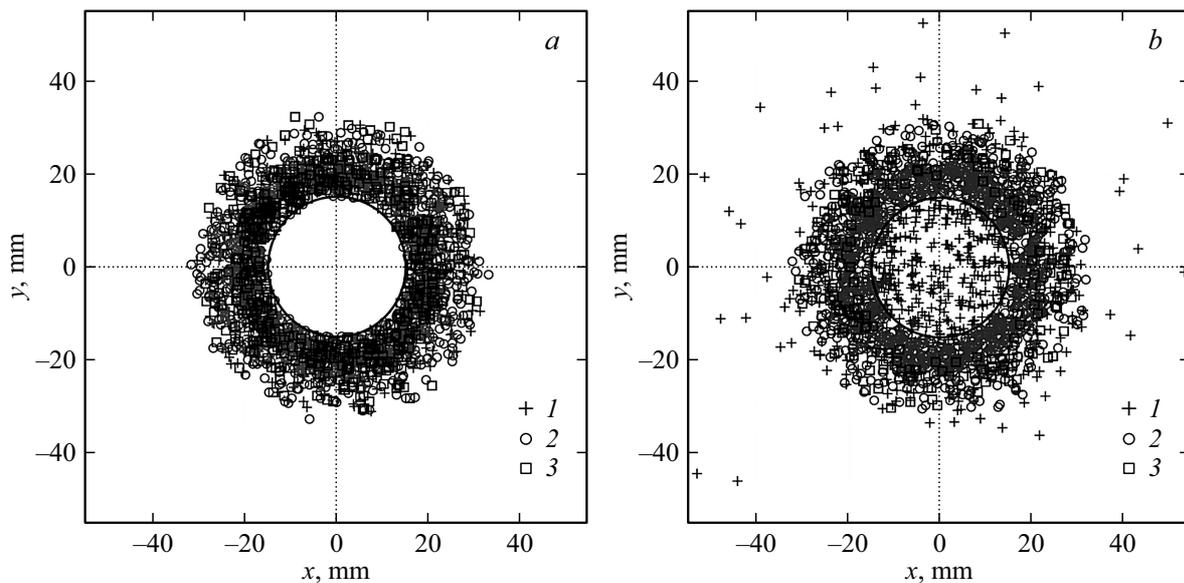


Рис. 7. Результаты Монте-Карло моделирования пространственного распределения молекул водорода в месте расположения входного отверстия приемной трубки: *a* — секступольные магниты выключены, молекулы не попадают в приемную трубку; *b* — магниты включены, молекулы инжектируются в трубку. 1 — молекулы, фокусируемые в магнитном поле ($m_l = -1$), 2 — свободно летящие ($m_l = 0$), 3 — дефокусируемые в магнитном поле ($m_l = +1$). Расчеты выполнены при индукции магнитного поля 3.7 Т и температуре 7 К.

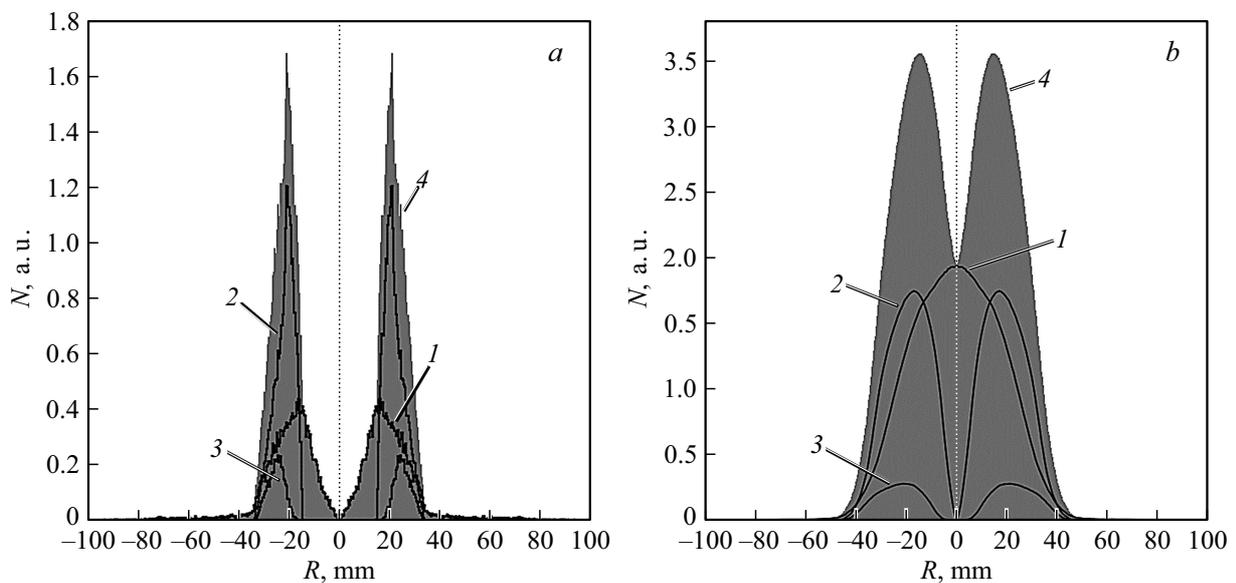


Рис. 8. Гистограммы пространственного распределения молекул водорода с различными проекциями магнитных моментов на расстоянии 2185 мм от сопла: *a* — неусредненная детектором гистограмма распределения; *b* — усредненная детектором гистограмма распределения. 1 — молекулы, фокусируемые в магнитном поле ($m_l = -1$), 2 — свободно летящие ($m_l = 0$), 3 — дефокусируемые в магнитном поле ($m_l = +1$), 4 — суммарное распределение для всех проекций. Расчеты выполнены при индукции магнитного поля 3.7 Т и температуре 7 К.

интенсивности на оси отлично от нуля, что противоречит предсказаниям моделирования. В моделировании не учитывается отражение молекул от стенок магнитов и перерасеяние молекул друг на друге, поэтому прямой баллистический поток из сопла не попадает в детектор. Но при наличии отражений молекулы могут попасть

в детектор. Доля сфокусированных в приемную трубку молекул, рассчитанных моделированием, не зависит от расхода газа. Однако экспериментально эта доля меняется в зависимости от расхода газа через сопло [9,10]. Расчетное значение лежит между экспериментальными значениями при малых и больших расходах. Стоит отме-

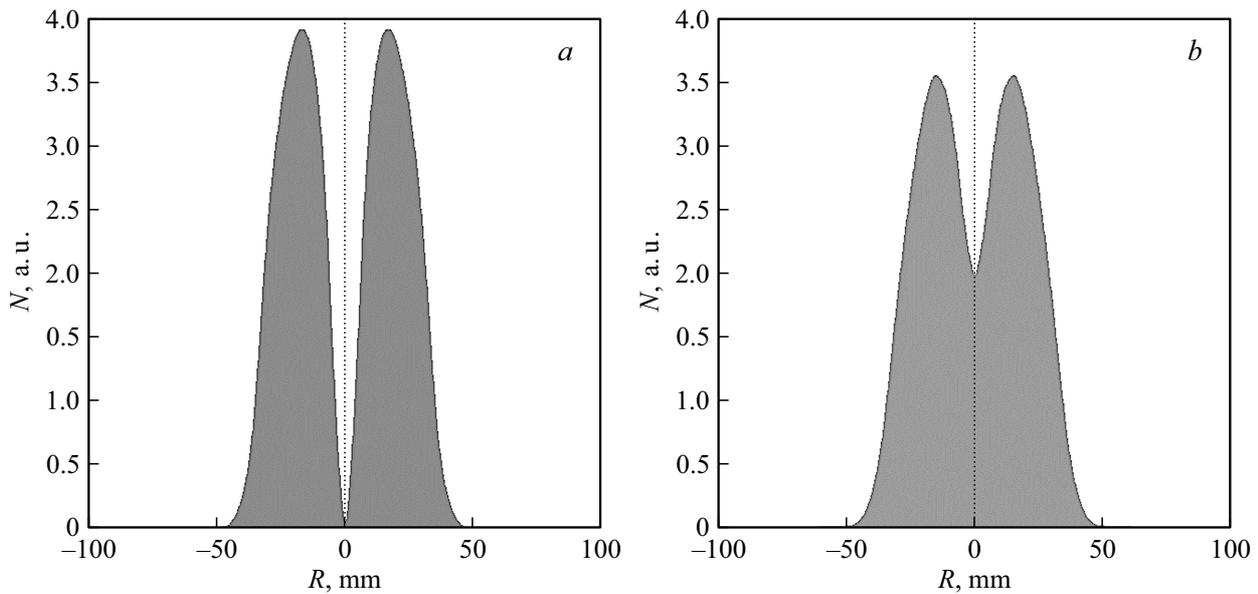


Рис. 9. Гистограммы пространственного распределения молекул водорода для всех проекций m_l на расстоянии 2185 mm от сопла, усредненные детектором: *a* — магнитное поле выключено; *b* — магнитное поле включено. Расчеты выполнены при индукции магнитного поля 3.7 Т. Распределение по скоростям молекул в пучке максвелловское при температуре 7 К.

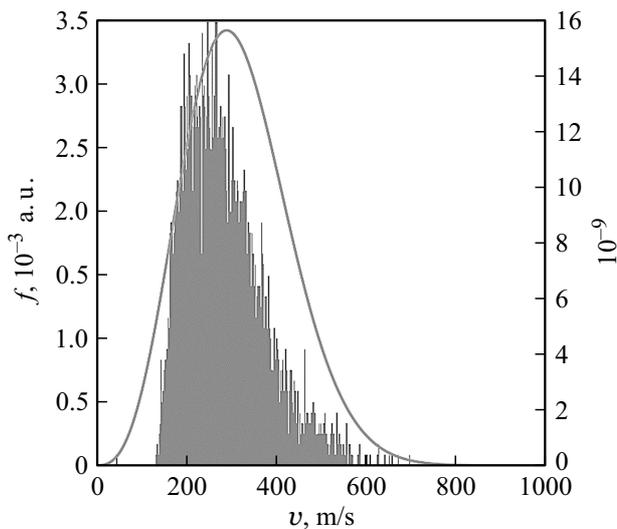


Рис. 10. Сравнение распределений по скоростям для молекул водорода, попавших в приемную трубку-детектор (гистограмма), и скоростей из сопла источника (кривая). Интеграл максвелловской функции (левая шкала) нормирован на единицу. Площадь гистограммы (правая шкала) нормирована на долю молекул $2.38 \cdot 10^{-6}$, которые попали в детектор по отношению к потоку из сопла.

тить, что положение характерных пиков на гистограммах рис. 9 согласуется с экспериментом. Учет ненулевого коэффициента отражения молекул от поверхностей и углового распределения отраженных молекул позволит произвести более точный расчет. Исследования в этом направлении будут проводиться и дальше.

Сравнение распределений по скоростям для молекул водорода, которые попали в детектор с распределением из сопла, показано на рис. 10. Медленные молекулы (со скоростью меньше 100 m/s) не сфокусировались в детектор, так как они были сильно отклонены магнитным полем (перифокусировка) и ударились о стенки вакуумной камеры. Время действия отклоняющей силы для быстрых молекул меньше, вследствие чего молекулы не успевают существенно отклониться после прохождения магнитов и не попадают в детектор.

Рис. 11 демонстрирует зависимость отношения потока молекул водорода, сфокусированных в приемную трубку, к полному потоку из сопла в зависимости от величины магнитного поля и температуры сопла. Из расчета следует, что при очень низких температурах (порядка 7 К) при больших полях (начиная с 10 Т) магниты сильно отклоняют молекулы к оси, т.е. происходит их перифокусировка, и они не попадают в приемную трубку. Молекулы с меньшей температурой имеют более низкую скорость, проводят большее время в магните и сильнее отклоняются. В эксперименте характерная величина магнитного поля на полюсе магнита 3.7 Т, что отмечено стрелкой на графике. Расчеты показывают, что при малых полях число сфокусированных молекул растет линейно с увеличением поля и растет с уменьшением температуры сопла. Из рис. 11 видно, что увеличение поля в данной геометрии установки не позволяет существенно выиграть в интенсивности сфокусированных молекул.

Экспериментальные измерения выполнены для разных температур сопла. Как и ожидалось, с понижением температуры газа (уменьшением скорости молекул) ко-

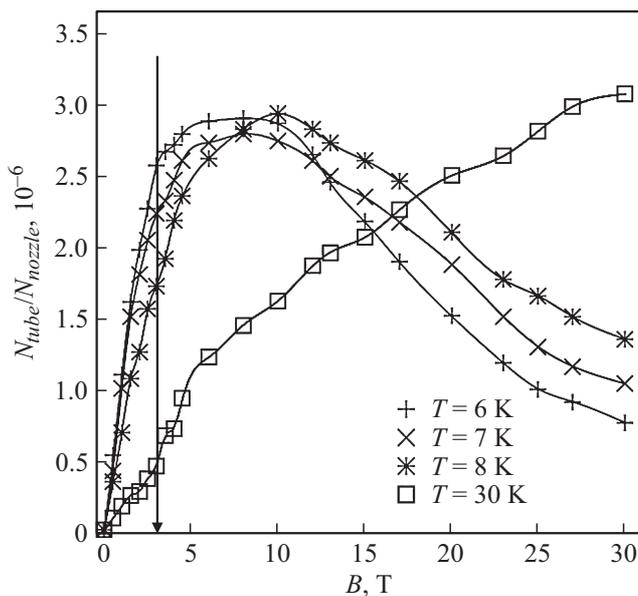


Рис. 11. Расчетная зависимость отношения числа молекул водорода, сфокусированных магнитным полем в трубку-детектор (N_{tube}), к полному числу частиц (N_{nozzle}), выпущенных из сопла при различных магнитных полях и разных температурах сопла источника. При более низких температурах при увеличении поля происходит перефокусировка молекул, и они не попадают в приемную трубку. Вертикальной линией со стрелкой показано значение магнитного поля, при котором выполнялись экспериментальные измерения.

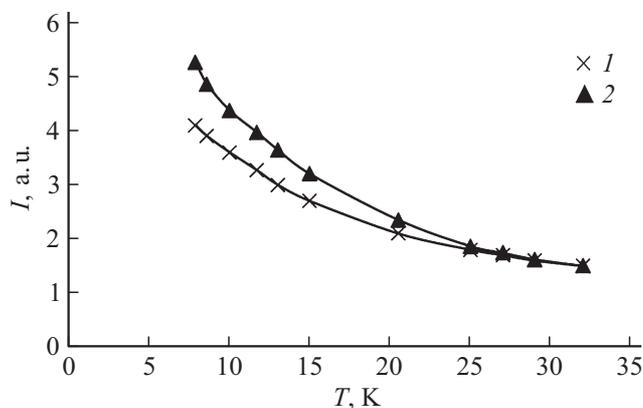


Рис. 12. Интенсивности сфокусированного пучка молекул водорода в зависимости от температуры сопла: 1 — измеренные экспериментально, 2 — полученные моделированием методом Монте-Карло. Данные совмещены при температуре сопла 32 К.

личество сфокусированных молекул растет, поскольку возрастает время действия отклоняющей силы. Тем не менее для данного расхода газа при температуре сопла ниже 6.5 К для водорода и 11 К для дейтерия начинается конденсация газа в камере сопла и дальнейшее понижение температуры невозможно. На рис. 12 приведены зависимости интенсивности сфокусированного пучка

от температуры сопла, измеренные экспериментально и полученные моделированием методом Монте-Карло. При температуре сопла 32 К данные были совмещены для демонстрации различного роста экспериментальной зависимости и зависимости, полученной в результате моделирования. С понижением температуры моделирование предсказывает более быстрый рост интенсивности пучка, чем наблюдается экспериментально. Возможно, это связано с увеличением рассеяния (потери) молекул пучка при понижении температуры, что не учитывалось при моделировании.

Достигнутый экспериментально максимальный поток поляризованных молекул водорода, сфокусированных магнитами в приемную трубку, равен $3 \cdot 10^{12}$ molecules/s при полном потоке газа через сопло $1.4 \cdot 10^{18}$ molecules/s. При дальнейшем увеличении расхода поток сфокусированных молекул уменьшается, возможно, из-за рассеяния на остаточном газе между соплом и диафрагмой или из-за изменения режима истечения из сопла. Отношение сфокусированных молекул в детектор к полному потоку из источника изменяется от $3.5 \cdot 10^{-6}$ до $1.2 \cdot 10^{-6}$ (при температуре около 7 К), уменьшаясь с увеличением расхода. Подробно с экспериментальными результатами можно ознакомиться в работах [8,9].

Монте-Карло моделирование, с приведенными выше значениями магнитных моментов для молекулы водорода, дает значение для отношения потока в детектор к потоку из сопла $(2.38 \pm 0.03) \cdot 10^{-6}$, что не противоречит результатам измерения. При этом моделирование показывает, что векторная ядерная поляризация в детекторе составляет $P_z = -(0.99 \pm 0.02)$. При малых расходах газа предсказания моделирования для интенсивности струи хорошо согласуются с экспериментом. Расхождение моделирования с экспериментом при увеличении расхода газа связано с изменением степени направленности потока из сопла и появлением перерасеяния молекул. В эксперименте закон распределения по углам может быть отличен от косинусного при больших расходах газа, вследствие этого функция распределения интенсивности по углам может иметь более выраженную направленность при $\theta = 0$, что не учитывалось в моделировании. Косинусный закон интенсивности (15) при $n = 1$ применим только в случае молекулярного истечения газа из сопла.

Для молекул дейтерия поток сфокусированных молекул, полученный в результате моделирования, меньше в 7.3 раза и составляет $(3.26 \pm 0.1) \cdot 10^{-7}$, поскольку их магнитные моменты существенно меньше таковых для молекул водорода и, кроме того, для молекул дейтерия, имеющих одинаковую проекцию ядерного спина, магнитные моменты сильно отличаются (ср. рис. 1 и 2, б). Также геометрические размеры установки были оптимизированы преимущественно для получения поляризованных молекул водорода. Расчет показывает, что для молекулы дейтерия поляризация в детекторе $P_z = -(0.99 \pm 0.02)$ близка к 100%.

Приведенные выше статистические ошибки уменьшаются с увеличением числа моделируемых траекторий как $1/\sqrt{N}$. Число частиц, при котором набрана статистика для расчета молекулярного водорода, составляет около $2.7 \cdot 10^9$ сгенерированных частиц из сопла (10^6 частиц на входе первого магнита). Для расчета молекулярного дейтерия статистика была увеличена в 3 раза. При написании кода компьютерной программы для ускорения скорости счета был использован открытый стандарт для распараллеливания задачи на многопоточность OpenMP. С его применением время выполнения расчетов удалось сократить примерно в 3 раза на четырехъядерном компьютере, чем при выполнении расчета в одном потоке.

Заключение

Как показывают экспериментальные результаты уже с имеющимися магнитами (не оптимальными для данной задачи), можно получать значительные потоки поляризованных по ядерному спину молекул водорода и дейтерия. Предсказания Монте-Карло расчетов в достаточной степени согласуются с экспериментальными данными. Поляризация сфокусированного молекулярного пучка близка к 100%. Разработанную компьютерную программу можно использовать при проектировании прототипа источника поляризованных молекул, обладающего существенно большей интенсивностью, чем у имеющегося [15]. Настоящая компьютерная программа позволяет считать траектории частиц в магнитной системе из семи магнитов. Это позволит проводить расчеты для атомного пучка в более сложной геометрии. Также программа может быть использована для оптимизации геометрии существующей установки с целью получения более интенсивной поляризованной струи.

Поскольку основным состоянием дейтерия при низких температурах является орто-дейтерий, то, по-видимому, можно получать твердый поляризованный дейтерий и использовать его в качестве топлива в инерциальных термоядерных реакциях и других исследованиях. Положительные результаты по исследованию сохранения поляризации в молекулах позволяют создавать внутренние поляризованные газовые мишени высокой плотности для проведения ядерно-физических экспериментов в накопителях заряженных частиц.

Понимание процессов истечения молекул из сопла, учет внутривпучкового рассеяния и ослабления струи на остаточном газе позволит предсказать интенсивность поляризованной струи в зависимости от потока газа. В свою очередь, понимание процессов отражения молекул от стенок магнитов позволит получить более точное описание экспериментальных результатов. В дальнейшем планируется усовершенствовать компьютерную программу для учета этих эффектов.

В будущем планируется экспериментальное изменение поляризации молекул с помощью Lamb-Shift-поляриметра, поставленного из Германии в рамках совместного гранта.

Благодарности

Авторы благодарны А.М. Рудневу и Р.Ш. Садыкову за обслуживание экспериментального стенда для получения поляризованных молекул водорода и дейтерия.

Планируемый эксперимент по измерению ядерной поляризации молекул будет выполнен при участии Ральфа Энгельса (Ralf Engels), Маркуса Бюшера (Markus Buscher) и Лукаса Хексолда (Lukas Huxold).

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (РНФ, проект № 16-42-01009), совместного с зарубежным грантом Немецкого научно-исследовательского общества (DFG, проект № BU 2227/1-1).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Авторский вклад

Компьютерная программа Монте-Карло моделирования была разработана и написана А.В. Юрченко. Все соавторы принимали участие в обсуждении результатов моделирования и внесли существенный вклад в анализ и интерпретацию данных, а также критический обзор рукописи.

Список литературы

- [1] *Ciullo G., Engels R., Büscher M., Vasilyev A.* // Springer Proc. Phys. 2016. Vol. 187. DOI: 10.1007/978-3-319-39471-8_1
- [2] *Leemann Ch., Bürgisser H., Huber P., Rohrer U., Paetz gen. Schieck H., Seiler F.* // Helv. Phys. Acta. 1971. Vol. 44. P. 141. DOI: 10.5169/seals-114273
- [3] *Steffens E., Haeberli W.* // Rep. Prog. Phys. 2003. Vol. 66. P. 1. DOI: 10.1088/0034-4885/66/11/R02
- [4] *Toporkov D.K.* // XV Int. Workshop on Polarized Sources, Targets, and Polarimetry. Charlottesville, Virginia, USA. 2013. P. 064.
- [5] *Shestakov Yu.V., Nikolenko D.M., Rachek I.A., Toporkov D.K., Dmitriev V.F.* // In: Proc. of 13th Int. Symp. on High Energy Spin Phys. Protvino: Russia, 1998. P. 415.
- [6] *Toporkov D.K., Gramolin A.V., Nikolenko D.M., Rachek I.A., Sadykov R.Sh., Shestakov Yu.V., Zevakov S.A.* // JETP Lett. 2017. Vol. 1050. P. 289. DOI: 10.1134/S0021364017050125
- [7] *Dyug M.V., Lazarenko B.A., Mishnev S.I., Nikolenko D.M., Rachek I.A., Sadykov R.Sh., Toporkov D.K., Zevakov S.A., Osipov A.V., Stibunov V.N.* // Nucl. Instrum. and Methods A. 2002. Vol. 495. P. 8. DOI: 0.1016/S0168-9002(02)01572-3
- [8] *Toporkov D.K., Zevakov S.A., Nikolenko D.M., Rachek I.A., Shestakov Yu.V., Yurchenko A.V.* // Instruments and Experimental Techniques. 2019. Vol. 62. N 1. P. 56. DOI: 10.1134/S0020441219010184

- [9] Toporkov D.K., Gramolin A.V., Nikolenko D.M., Rachek I.A., Sadykov R.Sh., Shestakov Yu.V., Yurchenko A.V., Zevakov S.A. // Nucl. Instrum. Method. A. 2017. Vol. 868. P. 15. DOI: 10.1016/j.nima.2017.06.038
- [10] Shestakov Yu.V., Nikolenko D.M., Rachek I.A., Sadykov R.Sh., Toporkov D.K., Yurchenko A.V., Zevakov S.A. // J. Phys.: Conf. Ser. 2017. Vol. 938. P. 012035. DOI: 10.1088/1742-6596/938/1/012035
- [11] Engels R., Gaißer M., Gorski R., Grigoryev K., Mikirtychyants M., Nass A., Rathmann F., Seyfarth H., Ströher H., Weiss P., Kochenda L., Kravtsov P., Trofimov V., Tschernov N., Vasilyev A., Vznuzdaev M., Paetz gen. Schieck H. // Phys. Rev. Lett. 2015. Vol. 115. P. 113007. DOI: 10.1103/PhysRevLett.115.113007
- [12] Frisch R., Stern O. // Z. Phys. 1933. Vol. 85. P. 4. DOI: 10.1007/BF01330773
- [13] Ramsey N.F. // Phys. Rev. 1952. Vol. 85. P. 60. DOI: 10.1103/PhysRev.85.60
- [14] Isaeva L.G., Lazarenko B.A., Mishnev S.I., Nikolenko D.M., Popov S.G., Rachek I.A., Shestakov Yu.V., Toporkov D.K., Vesnovsky D.K., Zevakov S.A. // Nucl. Instrum. Method. A. 1998. Vol. 411. P. 201. DOI: 10.1016/S0168-9002(98)00352-0
- [15] Yurchenko A.V., Nikolenko D.M., Rachek I.A., Shestakov Yu.V., Toporkov D.K., Zorin A.V. // J. Phys.: Conf. Ser. 2017. Vol. 938. P. 012023. DOI: 10.1088/1742-6596/938/1/012023