

ИЗУЧЕНИЕ ФАЗОВЫХ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ НАЧАЛЬНЫХ И КОНЕЧНЫХ СОСТОЯНИЙ МНОГОЧАСТИЧНЫХ СИСТЕМ В МЕТОДЕ КЛАССИЧЕСКИХ ТРАЕКТОРИЙ МОНТЕ-КАРЛО*

А.Э. Яновский

Обнинский институт атомной энергетики, г.Обнинск



В работе представлены результаты расчета фазовых распределений продуктов реакций, моделируемых в рамках трех- и четырехчастичных моделей метода классических траекторий.

ВВЕДЕНИЕ

В последние годы в связи с разработкой современных лазеров с ядерной накачкой возобновился интерес к изучению ядерно-возбуждаемой плазмы - особого состояния среды, которое образуется при прохождении многозарядных ионов через вещество. Для практических приложений детальное описание подобных процессов связано с задачей определения сечений ионизации и перезарядки осколками деления атомов инертных газов (He, Ar), используемых в качестве активных сред. Расчет данных сечений представляет собой достаточно сложную задачу. Одним из подходов, позволяющим получать достаточно точную оценку интегральных и дифференциальных сечений является метод классических траекторий Монте-Карло (МКТ) [1,2].

Несмотря на успешное применение данного метода и хорошее согласие между расчетными и экспериментальными данными, остается открытым вопрос о последовательном теоретическом описании заданного связанного квантового состояния в рамках классической механики. Как известно, традиционно используемая модель микроканонического ансамбля [1] неадекватно описывает плотность электронного облака моделируемого атома (иона) и имеет усеченный вид. Это обстоятельство имеет особое значение при модельном описании многоэлектронных атомов водородоподобными системами. Одновременно интерпретация конечных состояний системы, в частности, случаев перезарядки, непосредственно связана с используемой моделью описания (траектории) связанного состояния.

В настоящей работе был произведен расчет фазовых распределений конечных состояний для 3- 4- частичных моделей МКТ, используемых для моделирования ион-атомных и атом-атомных столкновений. Полученные результаты сопоставлялись с квантово-механическими распределениями для аналогичных систем и известны-

© А.Э. Яновский, 1999

*Доклад с Международного конгресса "Энергетика-3000"
(Обнинск, 12-16 октября 1998 г.)

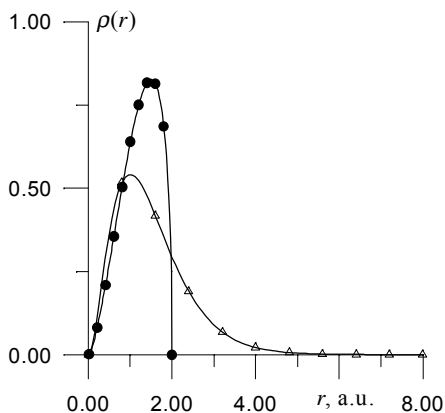


Рис.1. Радиальное распределение электрона в атоме: • - модель микроканонического ансамбля; Δ - квантово-механическая плотность для 1s-состояния

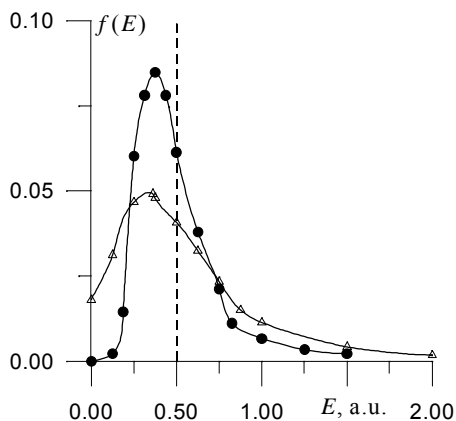


Рис.2. Энергетическое распределение электрона: • - метод классических фазовых распределений; Δ - метод Вигнера, - - - модель микроканонического ансамбля

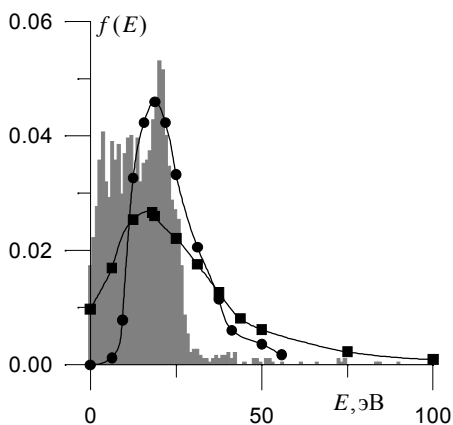


Рис. 3. Энергетическое распределение электрона в образовавшемся атоме, • - метод классических фазовых распределений; ■ - метод Вигнера

ми модельными распределениями для задания начального связанного состояния в рамках классической механики [3,4].

ТЕОРИЯ

Метод классических траекторий основан на имеющей место аналогии между квантовыми и классическими системами многих частиц с кулоновским взаимодействием. Основное его предположение состоит в том, что динамика квантовомеханической системы описывается классическими уравнениями движения. Стандартным условием применимости такого представления является малость де-Бройлевской длины волны частиц по сравнению с характерными размерами системы:

$$\lambda_i = \frac{\hbar}{p_i} \ll a_0,$$

где p_i - импульс i -ой частицы, a_0 - характерный размер системы.

Описание процесса столкновения в МКТ можно разделить на три этапа: задание начального состояния, временная эволюция и конечное состояние. Для задания начального состояния моделируемой связанной системы традиционно используется модель микроканонического ансамбля, которая заключается в задании всех возможных классических конфигураций системы с заданной энергией связи U . Плотность распределения по координатам и импульсам в этой модели определяется соотношением:

$$\rho(r, p, t = 0) = k\delta(E - H), \quad (1)$$

где E и H - энергия и Гамильтониан системы соответственно, k - нормировочная константа. Как уже было отмечено, основным недостатком данной модели является плохое воспроизведение пространственных характеристик моделируемой квантовой системы (рис. 1). Предлагаемые иные модели задания начального связанного состояния [3-4] основаны на идее построения такой функции распределения электрона по энергии, чтобы вычисляемые с ее помощью плотности распределения по координатам и импульсам были близки к квантовомеханическим для моделируемого состояния:

$$\begin{aligned} \int f(E)p^2 dp &\approx \rho_n(r), \\ \int f(E)r^2 dr &\approx \rho_n(p). \end{aligned} \quad (2)$$

Наиболее известные модели - это модель классических фазовых распределений [3] и модель, основанная на использовании функции Вигнера [4]. Функции распределения $f(E)$ для указанных моделей представлены на рис. 2. Следует отметить, что в рассматриваемых моделях система уравнений (2) не удовлетворяется точно.

Сохраняя общий формализм метода классических фазовых распределений и основываясь на так называемом классическом представлении для уравнения Шредингера [5], можно построить еще одну модель задания начального состояния атомной мишени в классическом представлении. Преимуществом данного подхода является возможность использования его результатов для интерпретации конечных состояний системы, образующихся при расчетах методом классических траекторий.

Поясним суть упомянутого классического представления для уравнения Шредингера на примере одночастичной одномерной задачи, обобщая результаты, где это возможно, на трехмерный случай движения электрона в поле ядра.

Задача состоит в том, чтобы представить некоторое квантовое состояние $|\psi_n\rangle$ как суперпозицию классических состояний в потенциале $V(x)$ распределенных по энергии E с некоторой плотностью вероятности $f_n(E)$. Вероятность обнаружить классическую частицу с энергией E в интервале dx пропорциональна времени, которое она в нем находится, откуда плотность вероятности:

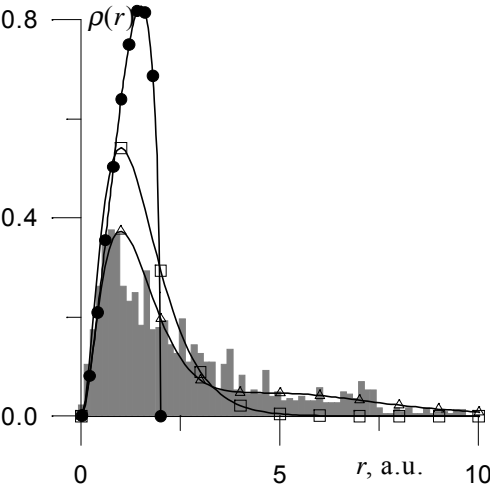


Рис. 5. Радиальное распределение электрона в образовавшемся атоме: • - микроканоническое распределение; □ - квантово-механическое распределение для 1s-состояния; Δ - суперпозиция квантово-механических распределений для 1s и 2s состояния (см. текст)

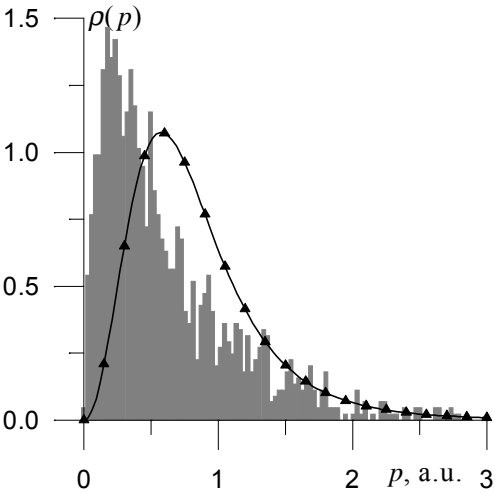


Рис. 4. Импульсное распределение электрона в образовавшемся атоме: Δ - квантово-механическое распределение

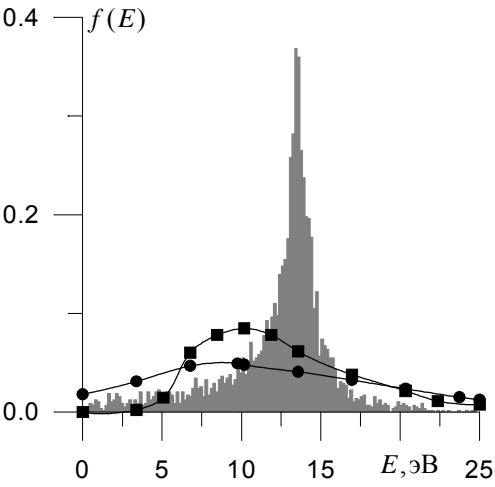


Рис. 6. Энергетическое распределение электрона в атоме мишени после неактивного взаимодействия: • - метод классических фазовых распределений; ■ - метод Вигнера.

$$W(E, x) = \frac{2}{T(E)} \frac{dt}{dx} = \frac{2}{T(E)} \left[\frac{2}{m} (E - V(x)) \right]^{-1/2},$$

где

$$T(E) = 2 \int_{x_1}^{x_2} dx \sqrt{\frac{2}{m} (E - V(x))}$$

- период колебаний, а x_1 и x_2 - классические точки поворота. Плотность вероятности в точке x для всего ансамбля получается усреднением $W(E, x)$ по распределению $f_n(E)$ в классически разрешенной области энергий $E \geq V(x)$:

$$\rho(x) = \int dE W(E, x) f_n(E) = \int dE \frac{\phi_n(E)}{\sqrt{E - V(x)}}, \quad (3)$$

где

$$\phi_n(E) = \sqrt{2m} \frac{f_n(E)}{T(E)},$$

а $\rho_n(x)$ определяется как квадрат волновой функции соответствующего квантового состояния. Аналогично для плоской кеплеровой задачи запишем:

$$W(E, r) = \frac{2}{T(E)} \frac{dt}{dr} = \frac{2}{T(E)} \left[\frac{2}{m} \left(E + \frac{\alpha}{r} - \frac{L^2}{2mr^2} \right) \right]^{-1/2}$$

$$\rho_n(r) = \int dE \frac{\phi_n(E)}{\sqrt{E - V_l(r)}}.$$

Здесь $V_l(r) = -\frac{\alpha}{r} + \frac{L^2}{2mr^2}$ - обозначен «эффективный потенциал», где L - орбитальный момент.

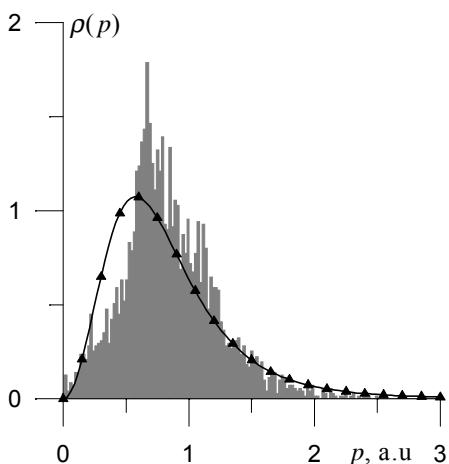


Рис. 7. Радиальное распределение электрона в атоме мишени после неактивного взаимодействия: Δ - квантово-механическое распределение

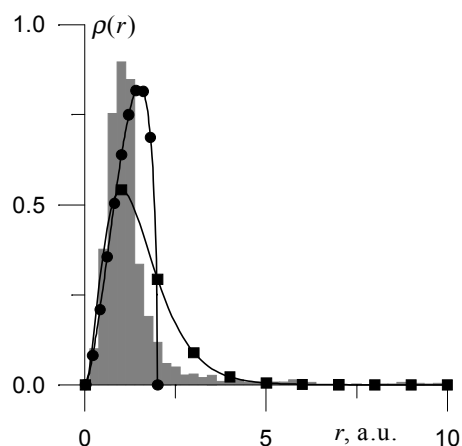


Рис. 8. Радиальное распределение электрона в атоме мишени после неактивного взаимодействия: \bullet - микроканоническое распределение; \blacksquare - квантово-механическое распределение

Далее, если рассматривать вместо x в качестве независимой переменной потенциал V , который однозначно связан с x на полуоси $x > 0$, можно, используя преобразование Абеля для интегрального уравнения (3), получить:

$$\phi_n(E) = -\frac{1}{\pi} \frac{d}{dE} \left(\int dV \frac{\rho(x(V))}{\sqrt{V-E}} \right) \quad (4.a)$$

или [5]:

$$\phi_n(E) = \frac{1}{\pi} \int \frac{dV}{\sqrt{V-E}} \frac{dp_n}{dV}. \quad (4.6)$$

Во всех вышеприведенных интегралах пределы интегрирования определяются областью классически разрешенного движения $E > V(x)$.

К сожалению, столь же простые аналитические выражения для случая кеплеровской задачи получить нельзя. Тем не менее, из выражений (4.a) и (4.6) ясно видна связь между квантовомеханическим состоянием с плотностью

$\rho_n(r) = |\psi_n(r)|^2$ и функцией распределения $f_n(E)$ для ансамбля классических орбит,

которым моделируется состояние Ψ_n . Кроме того, как было указано выше, появляется возможность интерпретации распределений конечного состояния, получаемого в расчетах, как суперпозиции отдельных квантовых состояний, моделируемых ансамблем классических орбит.

Рассматривая конечное распределение по энергии электрона в связанной системе $F_e^c(E)$, получаемое в результате численного эксперимента, как суперпозицию классических ансамблей, каждый из которых соответствует определенному квантовому состоянию, задаваемому соотношением (4):

$$F_e^c(E) = \sum_i C_i \phi_i(E), \quad (5)$$

можно определить «вероятности» с которыми в конечном состоянии образуются те или иные квантовомеханические состояния связанной системы. Используя свойство ортогональности распределения (4) [5], вычислим весовые коэффициенты C_i :

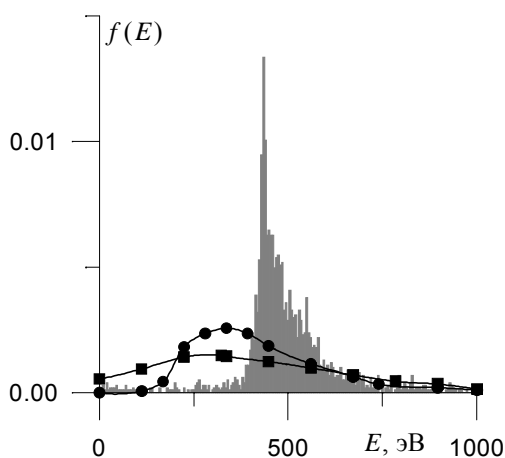


Рис. 9. Энергетическое распределение электрона налетающего иона в реакции захвата электрона мишени: • - метод классических фазовых распределений; ■ - метод Вигнера

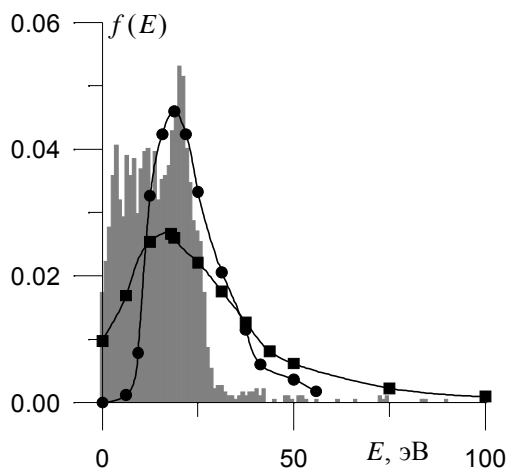


Рис. 10. Энергетическое распределение захваченного электрона в образовавшемся ионе: • - метод классических фазовых распределений; ■ - метод Вигнера

$$C_i = \int F_e^C(E) \phi_i^*(E) dE, \quad (6)$$

где $\phi_i^*(E)$ - образ $\phi_i(E)$ в сопряженном функциональном пространстве.

Описанный подход позволяет как задавать начальное состояние моделируемой квантовой системы, так и на его основе последовательно интерпретировать состояние в конечной конфигурации, выделяя при необходимости вклад отдельных классических ансамблей $\phi_n(E)$, соответствующих различным возбужденным квантовым состояниям.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Результаты компьютерного моделирования распределений конечных состояний в трехчастичной модели для случая перезарядки представлены на рис 3-5. Для данного типа реакции моделировалось рассеяние протона на атоме водорода, находящегося в основном состоянии. Начальное состояние мишени задавалось в рамках модели микроканонического ансамбля. Для случаев, когда в результате взаимодействия в выходном канале реакции образовывался атом водорода, состоящий из налетающего протона и электрона атома мишени, тестировались параметры образовавшейся связанной системы. На рис. 3 представлено распределение электрона по энергии. Здесь же приведены энергетические распределения модели классических фазовых распределений $f_r(e)$ и модели Вигнера $f_w(E)$, оба рассчитанные для 1s-состояния атома H. Из сравнения видно, что распределение, получаемое в результате численного эксперимента не совпадает ни с одним из указанных распределений. Среднее значение энергии в образовавшейся паре $\bar{U} = 8.5$ эВ. С учетом вышеизложенного подхода к интерпретации конечных состояний можно говорить, что данное распределение соответствует суперпозиции классических ансамблей, каждый из которых описывает одно из возбужденных состояний атома водорода.

Распределение по импульсу электрона в атоме для рассматриваемого случая приведено на рис. 4. Так как импульсное распределение в модели микрокано-

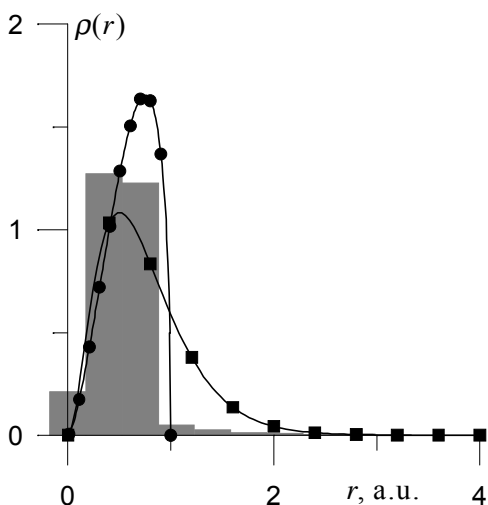


Рис. 11. Радиальное распределение электрона налетающего иона: • - распределение в модели микроканонического ансамбля; ■ - квантово-механическое распределение

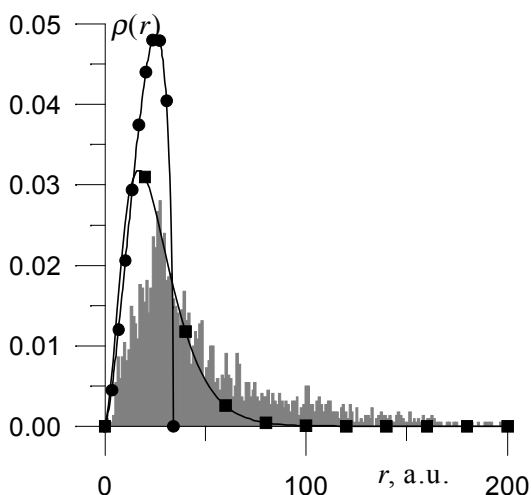


Рис. 12. Радиальное распределение захваченного электрона в образовавшемся ионе: • - распределение в модели микроканонического ансамбля; ■ - квантово-механическое распределение

ческого ансамбля совпадает с квантовомеханическим, можно ожидать хорошее совпадение для моделируемого распределения и его квантового аналога. Этот факт подтверждается рис. 4. Отличие в положении максимума распределения связано с тем, что квантовомеханическое распределение приведено для 1s-состояния, в то время как моделируемое состояние таковым не является.

На рис. 5 представлено радиальное распределение электрона в образовавшемся атоме. Сравнение данного распределения с микроканоническим и квантовомеханическим для 1s-состояния атома H свидетельствует о качественном совпадении формы моделируемого распределения с квантовомеханическим. В то же время моделируемое распределение медленнее квантовомеханического убывает на промежутке 4-8 а.е., что согласуется с большой вероятностью образования слабо-связанных (0-3 эВ) состояний, которым в классическом случае соответствуют эллиптические орбиты с большими пространственными размерами (большая полу-

ось эллипса - $a = e^2 / |E|$, эксцентриситет - $\varepsilon = \sqrt{1 - 2|E|L^2 / me^2}$). Здесь же приведено

распределение, построенное как суперпозиция квантовомеханических распределений для 1s и 2s-состояний атома водорода (энергия связи 2s-состояния $U_{2s} = 3.39$ эВ). Рассчитанные весовые коэффициенты данного распределения соответственно равны: $C_{1s}=0.67$ и $C_{2s}=0.23$. Следует отметить, что в данном случае трактовать рассчитанные коэффициенты как вероятности образования основного и возбужденного состояний атома водорода, моделируемых в рамках классической механики, не совсем верно, т.к. начальное состояние системы задавалось в модели микроканонического ансамбля, в то время как предлагаемая интерпретация (5)-(6) соответствует модели, использующей классическое представление для уравнения Шредингера.

Представляет интерес исследование временной эволюции фазовых распределений электрона мишени в случае нереактивного взаимодействия. В данном случае рассматриваются фазовые распределения электрона в атоме мишени после взаимодействия с налетающей частицей. Вычислительный эксперимент позволяет определить вид обсуждаемых распределений для классических моделей квантовых систем. Результаты расчета для столкновения $p + H$ представлены на рис. 6-8.

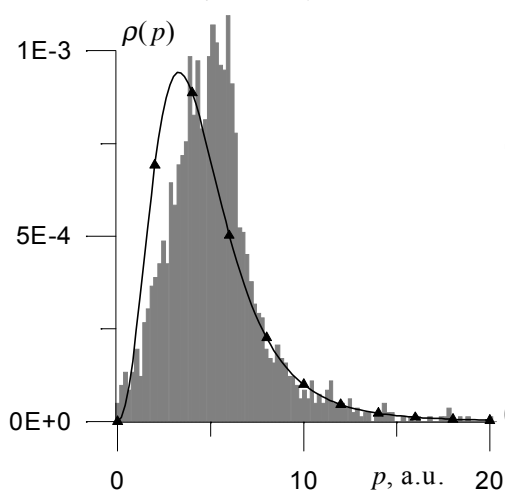


Рис. 13. Импульсное распределение электрона налетающего иона: Δ - квантово-механическое распределение

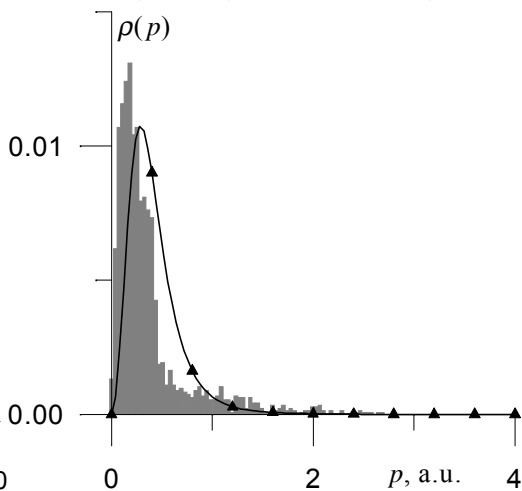


Рис. 14. Импульсное распределение захваченного электрона в образовавшемся ионе: Δ - квантово-механическое распределение

Распределение по энергии в начальном состоянии задавалось в рамках модели микроканонического ансамбля, т.е. энергия была жестко фиксирована. В результате взаимодействия атом мишени переходит в состояние с другой энергией связи, что в квантовомеханическом случае интерпретируется как переход в возбужденное состояние. На рис. 6 представлено энергетическое распределение электрона. Оно имеет острый пик в области энергии, равной начальной энергии связи атома. Сравнение полученного распределения с модельными распределениями [3,4], соответствующими $1s$ -состоянию атома водорода, свидетельствует о том, что формируемое в результате временной эволюции и под воздействием налетающего иона энергетическое распределение электрона не описывается указанными модельными распределениями.

Распределение импульса электрона (рис. 7) демонстрирует хорошее согласие с начальным распределением, которое, как известно, совпадает с квантовомеханическим.

Радиальное распределение электрона в атоме, представленное на рис. 8, также имеет форму, близкую к начальной - микроканоническому распределению. Одновременно, в связи с образованием состояний с энергией связи меньше начальной, наблюдается формирование орбит с большими пространственными размерами. В связи с этим, распределение отлично от нуля при значениях $r > 2$ а.е., т.е. его поведение становится близким к квантовомеханическому.

В рамках четырехчастичной модели МКТ моделировалось рассеяние многозарядного иона Z^{+21} на атоме гелия. Мишень - атом гелия - моделировался водородоподобной двухчастичной системой с эффективным зарядом ядра $Z_{\text{eff}}=1.7$, учитывающим влияние второго электрона. Для налетающего иона также использовалась двухчастичная модель, учитывающая экранировку ядра внутренними электронными оболочками. Моделируемое состояние электрона внешней электронной оболочки иона задавалось в предположении, что ион находится в основном состоянии. Наиболее интересным для изучения конечным состоянием в данной системе является конфигурация, соответствующая перезарядке атома мишени и образованию связанной трехчастичной системы - ядра налетающего иона и двух электронов. Фазовые распределения, рассчитанные для обсуждаемой конфигурации представлены на рис. 9-14.

На рис. 9 и 10 показаны распределения по энергии для электрона иона (рис. 9) и электрона, который был захвачен из атома мишени (рис. 10). Как и в случае возбуждения атома в результате взаимодействия с налетающей частицей (рис. 6), распределение электрона иона имеет острый пик вблизи начальной энергии $U=448.5$ эВ. В то же время "размывание" распределения происходит преимущественно в область больших (по модулю) энергий. Это соответствует в классической модели "прижиманию" электрона к ядру под воздействием захваченного на внешнюю орбиту электрона атома мишени. Состояние, в котором находится захваченный электрон описывается энергетическим распределением, представленным на рис. 10. Видно, что оно имеет ступенчатую форму, с небольшим максимумом в области 23 эВ. В трактовке классической механики такая форма может быть объяснена тем, что захваченный электрон не может иметь орбиту, пространственные размеры которой близки к размерам орбиты электрона иона - она должна быть больше, в силу взаимного отталкивания электронов.

Такая структура образующейся трехчастичной связанной системы в классической модели подтверждается распределениями электронов по радиусу, характеризующими пространственные размеры рассматриваемой системы. Соответствующие распределения приведены на рис. 11-12. Радиальное распределение для электро-

на иона мало отличается от начального - микроканонического (рис. 11), в то время как пространственное распределение захваченного электрона (рис. 12) по форме близко к квантовомеханическому, которое соответствовало бы основному состоянию водородоподобной системы с данным зарядом ядра и энергией связи $U=20.5$ эВ.

Распределения электронов по импульсу (рис. 13-14) демонстрируют как и в случае трехчастичной модели, хорошее совпадение с квантовомеханическими распределениями, построенными для основного состояния двухчастичной водородоподобной системы с параметрами, определенными зарядом ядра и моделируемой средней энергией в паре "ядро-электрон".

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенный в работе анализ конечных фазовых распределений продуктов ион-атомных столкновений, моделируемых в рамках трех- и четырехчастичных моделей метода классических траекторий показал, что получаемые в результате вычислительного эксперимента распределения неадекватно описываются известными модельными распределениями, применяемыми для задания начального состояния связанных систем. Следует отметить, что рассчитанные распределения по радиусу и импульсу электрона качественно близки к квантовомеханическим распределениям моделируемых систем. Предложен подход, основанный на классическом представлении для уравнения Шредингера, который позволяет последовательно описывать начальное и конечное состояния связанных квантовых систем, а также вычислять вероятности перехода в возбужденные состояния моделируемых атомов (ионов).

Список литературы

1. *Abrines R. and Percival I. C.* Classical theory of charge transfer and ionization of hydrogen atoms by protons // *Proceeding of Physical Society.* - 1966. - 88. - P.861.
2. *Abrines R. and Percival I. C.* A generalized correspondence principle and proton-hydrogen collisions // *Proceeding of Physical Society.* - 1966. - 88. - P.873.
3. *Cohen J. S.* Classical phase-space distributions for atomic hydrogen collisions // *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* - 1985. - 18. - P.1759
4. *Eichenauer D. et. al.,* Classical trajectory calculations for H^+-H collisions with the Wigner function as initial phase space distribution // *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* - 1981. - 14. - P. 3929
5. *Соловьев Е. А.* Классическое представление для одномерного уравнения Шредингера // *ЖЭТФ.* - 1993. - 103. - Вып. 6. - С.1891.

Поступила в редакцию 10.03.99.

interaction with atmospheric precipitation are chosen. Quantitative estimations of a ratio of these factors in the real atmosphere are given.

УДК 541.64:541.183

Study of Influence of Alkaline Hydrolysis Products in Production of Track Membranes on the Basis of Polyethyleneterephthalate Films \T.E. Laricheva, A.A. Machula, V.K. Milinchuk; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 1999. - 5 pages, 3 illustrations. - References, 10 titles.

The influence of ethyleneglycol (EG) and terephthalate ions (TPI), generated during an alkaline hydrolysis of polyethyleneterephthalate films, on the process of formation of track membranes is investigated. It is shown that TPI do not influence on the velocity of chemical etching polymer and of the latent tracks (LT). At the same time the kinetics of chemical etching polymer and of the LT essentially depends on the concentration of EG in etching solution. As a result accumulation of EG in the etching solution the selectivity of the process becomes worse along with the change of characteristics of track membranes.

УДК 539.172.8

Study of Phase Distribution of Initial and Final States of Multiparticle Systems in the Monte-Carlo Method of Classical Trajectories \A.E. Yanovsky; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 1999. - 9 pages, 14 illustrations. - References, 5 titles.

The results of calculation of phase distribution of reaction fragments simulated by three and four-particle models within the method of classical trajectories are represented in the paper.

УДК 621.039.525; 621.039.534.6

Universal Algorithm of the Monte-Carlo Method for Calculation of Blankets of Accelerator-Driven Systems \V.V. Korobeinikov; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 1999. - 7 pages, 2 illustrations. - References, 5 titles.

The universal algorithm for physical calculation of subcritical systems with an external source of neutrons by the Monte-Carlo method is developed. This algorithm is effective in calculation of accelerator-driven systems within a wide range of subcriticality. Description, theoretical evidence, method of realization, and results of testing of the algorithm for the test subcritical systems with an external neutron source are given in the paper.

УДК 621.039

On the Method of Determination of Physical Characteristics of a Nuclear Reactor under Slow Reactivity Perturbation \N.A. Vinogorov, D.N. Jukovsky; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 1999. - 5 pages, 3 illustrations. - References, 5 titles.

The method of determination of nuclear reactor characteristics under slow reactivity perturbation by means of measurement of the parameter providing the feedback is presented.

The application of the method is demonstrated by examples of estimation of the poisoning effect of xenon-135 and barometric reactivity coefficient for VVR.

УДК 621.039.553.34

Study of Dependence of Wall Temperature in the Technological Channel of the RBMK-Reactor on the Gas Clearance between the channels and Graphite Blocks \A.I. Trofimov, S.A. Vinogradov, I.A. Tchusov, V.I. Belozerov, M.A. Trofimov, I.A. Shvetsov; Editorial board of journal "Izvestia visshikh uchebnikh zavedeniy. Yadernaya energetika" (Communications of Higher Schools. Nuclear Power Engineering) - Obninsk, 1999. - 11 pages, 1 table, 15 illustrations. - References, 5 titles.

Theoretical and experimental proof of the usage of data on the temperature field distribution over the inner surface of a technological channel (TC) for evaluating the size of the gas clearance in RBMK-reactors are considered in the paper. The calculations performed using k- ϵ turbulence model, showed that the size of the gas clearance considerably affects the temperature distribution over the length of the TC.