

تعیین طیف زمانی نوترونها و طیف انرژی اتمهای میوندار در همجوشی کاتالیزور میونی با استفاده از روش مونت کارلو

سید ظفراله کلانتری^۱ و جعفر اسماعیلی

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان
۱. پست الکترونیکی: zafar@cc.iut.ac.ir

(دریافت مقاله: ۸۳/۲/۲۳ ؛ دریافت نسخه نهایی: ۸۳/۱۲/۲۳)

چکیده

بررسی چرخه μCF از دیدگاه شبیه‌سازی مونت کارلو جالب توجه است. در این مقاله چرخه واکنشهای کاتالیزور میونی توسط روش مونت کارلو شبیه‌سازی شده است. این شبیه‌سازی از زمانی که میون به مخلوط دوتریوم - تریتیوم وارد می‌شود شروع می‌گردد و با استفاده از سطوح مقطع فرآیندهایی که در چرخه μCF اتفاق می‌افتد، مسیر وقایعی که اتمهای میوندار در برخوردهای متوالی طی می‌کنند دنبال می‌شود. برای این منظور، کد کامپیوتری به زبان برنامه نویسی فورترن تهیه شده است. پارامتر زمان نیز در برنامه وارد گردیده، به طوری که طیف زمانی وقایع مختلفی که در چرخه μCF اتفاق می‌افتد به دست آمده است. از جمله طیف زمانی نوترونهای ناشی از همجوشی را استخراج کرده‌ایم. طیف انرژی اتمهای میوندار در زمانهای مختلف نیز محاسبه و به صورت نمودار ارائه شده است. با گسترش برنامه مونت کارلو، راهی برای تعیین بهره همجوشی (χ)، آهنگ چرخه (λ_c) و همچنین ضریب چسبندگی کل (W) در شرایط مختلف غلظت ایزوتوپی هیدروژن از طریق محاسبه مونت کارلو ارائه شده و نتایج با محاسبات از روشهای دیگر و نتایج تجربی مقایسه شده است.

واژه‌های کلیدی: همجوشی کاتالیزور میونی، روش مونت کارلو، طیف انرژی اتمهای میوندار، طیف زمانی نوترونهای همجوشی

۱. مقدمه

در چرخه μCF است برای جمعیت ذرات درگیر در چرخه نوشته شود و سپس حل گردد ولی باید توجه داشت که معادلات سینماتیکی در شرایط تعادل دمایی نوشته می‌شوند [۳ و ۴]. از طرفی فرآیندهای مختلفی باعث تولید اتمهای میوندار پرنرژی می‌گردند که انرژی جنبشی آنها بالاتر از انرژی متوسط دمایی ذرات محیط است [۸ و ۷]. فرآیندهایی مثل واکنجستگی کولنی، انتقال ایزوتوپی میون و وارونگی اسپینی از جمله فرآیندهای مهمی هستند که باعث تولید اتمهای فوق حرارتی می‌گردند. تشکیل مولکولهای میوندار که نقش اساسی در همجوشی کاتالیزور میونی دارند، به شدت به انرژی جنبشی

بررسی چرخه همجوشی کاتالیزور میونی (μCF) از جنبه‌های نظری، عملی و محاسباتی مورد توجه بوده است [۱، ۲ و ۳]. محاسبات چرخه μCF که بر پایه اطلاعات آزمایشگاهی از آهنگ فرآیندها انجام می‌شود، خود به تحلیل نتایج آزمایشگاهی μCF کمک می‌کند. علاوه بر این نتایج محاسبات راهنمای مناسبی برای آزمایشگران می‌باشد. در این خصوص روشهای حل سینماتیک چرخه [۴ و ۵] و روش مونت کارلو [۶، ۷ و ۸] مورد توجه هستند. در روش حل سینماتیک چرخه ابتدا باید یک سیستم معادله دیفرانسیل که توصیف کننده فرآیندهای زنجیره‌ای

لحظه ورود میون تا زمان همجوشی) و همچنین ضریب چسبندگی کل، W (احتمال کل چسبیدن میون به محصولات باردار ناشی از همجوشی) در شرایط مختلف غلظت ایزوتوپی هیدروژن از طریق محاسبه مونت کارلو ارائه شده و نتایج با محاسبات از روشهای دیگر مقایسه شده است.

۲. فرایندهای برخوردی اتمهای میوندار در مخلوط D/T

برای شبیه سازی چرخه μCF ، شناخت کامل فرایندهای برخوردی میونها و اتمهای میوندار با ذرات محیط و تعیین سطوح مقطع آنها ضروری است. میون در ابتدای ورود به محیطی از ایزوتوپهای هیدروژن کند می شود. منبع میون در چرخه همجوشی کاتالیزور میونی از دو طریق می باشد، یکی واپاشی پایونها که از برخورد هسته های سبک با انرژی بالا در شتابدهنده ها به دست می آید. این میونها دارای انرژی حدود 4.3 MeV هستند. منبع دیگر، میونهای هستند که از همجوشی آزاد می شوند. این میونها در حدود 10 keV انرژی دارند [۱]. میونهای هر دو منبع باید کند شوند تا قابلیت گیراندازی و تشکیل اتم میونی را پیدا کنند. فرایندهای اساسی شناخته شده برای کند شدن میونها برخوردهای غیرکشسان با اتمهای محیط و یونیزاسیون است که به سرعت انرژی میونها را کاهش می دهد ($\sim 10^{-13} \text{ s}$) [۱]. پس از آن میون سریعاً (10^{-12} s) در ترازهای بسیار برانگیخته اتمهای میونی $d\mu$ و $t\mu$ گیر می افتد. معمولاً شماره تراز مربوطه از عدد کوانتمی $n=14$ بیشتر است [۱۰ و ۱۱]. بعد از زمانی حدود 10^{-11} sec این اتمها به حالت پایه می رسند [۱۰ و ۱۲]. در جریان گذار به حالت پایه گذارهای تابش زا (radiative)، گذار اوژه (external Auger effect) و گذار کولنی (Coulomb transition) اتفاق می افتد [۱۰-۱۳]. در طی فرآیند کند شدن پیوسته اتم میونی در محیط توسط برخوردهای کشسان نیز صورت می گیرد. مسلماً همه این فرایندها با یکدیگر رقابت می نمایند و بر حسب شرایط محیطی، ممکن است آهنگ این رویدادها تغییر کند. به عبارت دیگر اهمیت نسبی آنها به شرایط فیزیکی از قبیل چگالی محیط

اتمهای میوندار وابسته است [۹]. در حل سینماتیک چرخه در شرایط تعادل دمایی، آهنگ تشکیل مولکول میوندار و فرایندهای دیگری که در چرخه μCF اتفاق می افتند در حقیقت یک متوسط گیری شده از آهنگ فرایندها روی توزیع انرژی جنبشی اتمهای میوندار است که براساس توزیع ماکسولوی حساب شده اند [۹]. بنابراین در این شرایط، وابستگی انرژی فرایندها در چرخه μCF در نظر گرفته نمی شود، به خصوص تشکیل مولکولهای $d\mu$ توسط اتمهای $t\mu$ فوق حرارتی لحاظ نمی شود.

بررسی چرخه μCF از دیدگاه شبیه سازی مونت کارلو جالب توجه است. در این مقاله چرخه واکنشهای کاتالیزور میونی توسط روش مونت کارلو شبیه سازی شده است. به نظر می رسد که با این شبیه سازی ما به شرایط واقعتر که در چرخه μCF اتفاق می افتد نزدیکتر شویم. این شبیه سازی از زمانی که میون به مخلوط دوتریوم - تریتیوم وارد می شود شروع می گردد و با استفاده از سطوح مقطع فرایندهایی که در چرخه μCF اتفاق می افتد، مسیر وقایعی که اتمهای میوندار در برخوردهای متوالی طی می کنند دنبال می شود. در نهایت زمانی که میون به ذرات باردار ناشی از همجوشی بچسبند یا واپاشی کند، سرنوشت آن میون خاتمه یافته و شبیه سازی برای میون دیگری شروع می شود. برای این منظور، کد کامپیوتری به زبان برنامه نویسی فورترن تهیه شده است. پارامتر زمان نیز در برنامه وارد گردیده، به طوری که طیف زمانی وقایع مختلفی که در چرخه μCF اتفاق می افتد به دست آمده است. به عبارت دیگر مشخص کرده ایم که در هر بازه زمانی، وقایع زنجیره ای در چرخه μCF با چه تعدادی انجام می شوند. از جمله طیف زمانی نوترونهای ناشی از همجوشی را استخراج کرده ایم. با وارد کردن پارامتر زمان، آنالیز کاملتری از وقایعی که در μCF اتفاق می افتد ارائه کرده ایم. طیف انرژی اتمهای میوندار در زمانهای مختلف نیز محاسبه و به صورت نمودار ارائه شده است. در ادامه با گسترش برنامه مونت کارلو، راهی برای تعیین بهره همجوشی، χ (تعداد همجوشیها به ازای یک میون) آهنگ چرخه، λ_c (عکس زمان متوسط طی کردن چرخه از

ب) وارونگی اسپین در اثر برخوردهای نامتقارن

$$d\mu \uparrow\uparrow + t \rightarrow d\mu \uparrow\downarrow + t \quad (7)$$

$$t\mu \uparrow\uparrow + d \rightarrow t\mu \uparrow\downarrow + d \quad (8)$$

۴- تشکیل مولکول میوندار که به صورت رزونانسی و

غیررزونانسی صورت می‌گیرد

$$d\mu + DA \rightarrow [(dd\mu)aee] \quad (A=D \text{ یا } T; a=d \text{ یا } t) \quad (9)$$

$$t\mu + DA \rightarrow [(dt\mu)aee] \quad (A=D \text{ یا } T; a=d \text{ یا } t) \quad (10)$$

همان‌گونه که مشخص است انتقال ایزوتوپی، میواتمهای

سریعی را تولید می‌نماید و انتقال فوق‌ریز نیز باعث افزایش

انرژی اتمهای میوندار می‌شود. برخوردهای کشسان نیز باعث

کاهش انرژی جنبشی آنها می‌گردد. به طوری که در برخوردهای

اتمهای میوندار و فرآیند حرارتی شدن، احتمال تشکیل

مولکولهای میوندار نیز وجود دارد که به صورت رزونانسی

می‌تواند صورت گیرد [۹ و ۱۰].

تشکیل مولکولهای میوندار وابستگی شدیدی به انرژی

برخوردی دارد. همچنین اسپین اتم میوندار نیز در آهنگ تشکیل

مولکول مؤثر است. آهنگ واکنشهای (۹ و ۱۰) به صورت تابعی

از انرژی جنبشی اتم μ در حالت‌های مختلف اسپینی در مخلوط

دوتایی، توسط فایفمن و پانومارف محاسبه شده است [۹].

معمولاً آهنگ متوسط تشکیل مولکول را با تقریب توزیع

ماکسولی انرژی جنبشی اتمهای μ به دست می‌آورند.

$$\lambda_{dt\mu}^F(T) = \int_0^\infty \lambda_{dt\mu-x}^F(E) f(E, T) dE \quad (11)$$

$$f(E, T) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{E}{T}\right)^{\frac{1}{2}} T^{\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{-E}{kT}\right)$$

که در آن F حالت اسپینی اتم $d\mu$ دمای محیط، x معرف d یا

t است. در این محاسبه فرض شده است که ابتدا اتم میونی با

محیط به تعادل حرارتی می‌رسد و سپس مولکول میونی تشکیل

می‌گردد. در محاسبات مربوط به سینماتیک چرخه در حقیقت

به طور اجتناب ناپذیری از این تقریب استفاده می‌شود. اما

چنانکه ذکر شد اتمهای میونی در حالت پایه الزاماً در تعادل

حرارتی با محیط نیستند. در این مقاله با توجه به این که در هر

مرحله، انرژی اتم میوندار محاسبه می‌گردد و از سطوح مقطع

فرآیندهای برخوردی که تابع انرژی است استفاده می‌گردد،

و غلظت ایزوتوپهای هیدروژن بستگی دارد. باید توجه داشت

که آهنگهای واکنجستگی حدود (10^{11} s^{-1}) است که 10^2 برابر

بیشتر از آهنگ گرمایی شدن اتمهای میوندار در حالت پایه

است، $\lambda_{th} \approx 10^9 \text{ s}^{-1}$ ، که در آن ϕ چگالی محیط بر حسب

چگالی هیدروژن مایع است ($\phi = N/N_0$ و $N_0 = 4/25 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$)

[۱]. از طرفی گرمایی شدن اتمهای میوندار در حالت‌های بر

انگیخته با سرعت بیشتری نسبت به گرمایی شدن در حالت پایه

صورت می‌گیرد، $\lambda_{th}^{ex} \approx 1/5 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ ، بنا بر این کسر بزرگی از

اتمهای میوندار که در حالت پایه به وجود می‌آیند فوق حرارتی

هستند و البته چون حالت‌های برانگیخته سریعاً حرارتی می‌شوند

توزیع انرژی آنها نزدیک به توزیع ماکسولی است و به دلیل

پیچیدگیهای موجود در فرآیندهای گذار که بعضی از آنها باعث

تولید اتمهای فوق حرارتی می‌شوند و بعضی نیز باعث کاهش

انرژی جنبشی می‌شوند و آهنگ آنها تابعی از انرژی جنبشی

است، نمی‌توان با دقت کامل توزیع انرژی اولیه اتمهای میوندار

را مشخص کرد [۷]. ولی معمولاً در تحلیلها، فرم ماکسولی

حول انرژیهای فوق حرارتی برای توزیع اولیه انرژی اتمهای

میوندار در نظر گرفته می‌شود. ما در این مقاله نیز از همین

تقریب استفاده کرده‌ایم.

فرآیندهای برخوردی اتمهای میوندار در یک مخلوط

دوتایی که باید شبیه‌سازی شوند عبارتند از:

۱- پراکندگی کشسان

$$(x\mu)_n + d, t \rightarrow (x\mu)_n + d, t \quad (1)$$

$$(x\mu)_n + D, T \rightarrow (x\mu)_n + D, T \quad (2)$$

$$(x\mu)_n + D_T, T_T \rightarrow (x\mu)_n + D_T, T_T \quad (3)$$

که در آن n عدد کوانتومی اصلی و x معرف d یا t است.

۲- انتقال ایزوتوپی

$$(d\mu)_n + t \rightarrow (t\mu)_n + d + \frac{4\lambda}{n^2} \text{ eV} \quad (4)$$

۳- انتقال فوق ریز

الف) وارونگی اسپین (Spin-flip) در اثر برخوردهای متقارن

$$d\mu \uparrow\uparrow + d \rightarrow d\mu \uparrow\downarrow + d + 0.49 \text{ eV} \quad (5)$$

$$t\mu \uparrow\uparrow + t \rightarrow t\mu \uparrow\downarrow + t + 0.24 \text{ eV} \quad (6)$$

دقت محاسبات بیشتر است.

برای انجام این شبیه سازی ابتدا نیاز به تعیین سطوح مقطع فرآیندهای (۱ تا ۱۰) می باشد. سطوح مقطع این رویدادها قبلاً توسط Adamczack [۱۴] محاسبه شده است و ما در این مقاله از آنها استفاده کرده ایم. همان طور که اشاره شد، سطوح مقطع واکنشهای مختلف اتمهای میوندار در برخورد با اتمها و مولکولهای محیط تابع انرژی است و در هر برخورد، انرژی اتم میوندار بعد از برخورد باید تعیین گردد تا بتوان سیر واکنشهای برخوردی را با استفاده از سطوح مقطع دنبال کرد.

در انرژیهای بالاتر از ۱ eV می توان برخورد مستقیم اتمهای میوندار را با هدفهای هسته ای در نظر گرفت [۱۵] و از اثرات پوششی الکترونها چشم پوشی کرد. سطوح مقطع تشکیل مولکول نیز از آهنگ تشکیل مولکول، $\lambda_{ij\mu}$ ، که از منابع در دست می باشد قابل محاسبه است [۹].

$$\lambda_{ij\mu} = \sigma_{ij\mu}(E)vN \quad (12)$$

که در آن $\lambda_{ij\mu}$ و $\sigma_{ij\mu}$ به ترتیب آهنگ و سطح مقطع تشکیل مولکول $i\mu$ است و v سرعت اتم میوندار و N چگالی اتمی محیط می باشد.

۳. شبیه سازی مونت کارلو

اگر از لحظه ورود میون به مخلوط D/T بتوان در یک برنامه کامپیوتری با استفاده از روش مونت کارلو تمام فرآیندهایی که اتفاق می افتند و در قسمت قبل توضیح داده شد، پله به پله دنبال کرد، در آن صورت می توان به شرایط واقعیتر در همجوشی کاتالیزور میونی دست یافت. برای رسیدن به این هدف، در این مقاله الگوریتمی تهیه گردید که بر اساس آن کد کامپیوتری به زبان فورترن تهیه شد.

میون وقتی وارد محیط D/T می گردد سریعاً در حالتی بسیار برانگیخته اتم میوندار جذب می شود و بر اساس فرآیندهای واکنشی که در قسمت ۲ توضیح داده شد به حالتی پایبتر گذار می کند. چون فرآیندهای واکنشی بسیار سریعتر از فرآیندهای دیگر در چرخه μCF اتفاق می افتند، در این مقاله، شبیه سازی از زمان بعد از رسیدن اتمهای میوندار به

حالت پایه شروع می شود و اثر فرآیندهای واکنشی را می توان از طریق اعمال توزیع انرژی جنبشی اتمهای میوندار در حالت پایه که وابسته به فرآیندهای واکنشی است و در نظر گرفتن پارامتر q_{15} وارد کرد. پارامتر q_{15} احتمال رسیدن اتم $d\mu$ به حالت پایه است. چون از حالتی برانگیخته اتم $d\mu$ میون با سرعت بیشتری به تریتیوم منتقل می شود، ممکن است قبل از رسیدن اتم $d\mu$ به حالت پایه، میون به تریتیوم منتقل شده باشد.

در این برنامه ابتدا غلظت ایزوتوپهای هیدروژن در مخلوط D/T (c_d و c_t) انتخاب می گردد، سپس با توجه به این که در نظر داریم این برنامه را به ازای تعداد زیادی میون مثلاً 10^6 ذره تکرار کنیم و از نتایج، متوسط گیری نماییم، با یک شمارنده تعیین می گردد که چندمین ذره میون در نظر گرفته شده است. براساس غلظت ایزوتوپی که در نظر گرفته شده است، احتمال برخورد میون با دوتریومها و تریتیومها متفاوت است. با تولید یک عدد کاتوره ای (r_1) و مقایسه آن با غلظت c_d و c_t با توجه به این که $c_d + c_t = 1$ است تعیین می گردد که چه اتم میوندار را تشکیل می شود. به عبارت دیگر اگر $r_1 \leq c_t$ باشد برخورد با تریتیوم و در غیر این صورت با دوتریوم خواهد بود. از این قسمت به بعد فرآیندهای مشابهی بر حسب این که اتم میوندار $d\mu$ یا $t\mu$ تشکیل گردد اتفاق خواهد افتاد که برای نمونه کانال مربوط به روند برخوردهای $t\mu$ را که مهمتر است توضیح می دهیم.

همان طور که در قسمت ۲ توضیح داده شد، اتم $t\mu$ برخوردهای متفاوتی می تواند با ذرات محیط (اتمها و مولکولهای ایزوتوپهای هیدروژن) انجام دهد و سطح مقطع بعضی از این برخوردها مثل برخورد غیرکشسان یا وارونگی اسپینی و تشکیل مولکول به اسپین اتم $t\mu$ (F)، که ۱ یا ۰ است بستگی دارد. پس قبل از هر چیز اسپین اتم $t\mu$ باید تعیین گردد. با توجه به وزن آماری حالتی اسپینی اتم $t\mu$ ($F+1$)، به ازای $F=1$ سه حالت و به ازای $F=0$ یک حالت وجود دارد، پس اتمهای $t\mu$ با احتمال $\frac{3}{4}$ با اسپین $F=1$ و با احتمال $\frac{1}{4}$ با

تعیین گردد تا در برخورد بعدی سطح مقطع مربوطه در نظر گرفته شود.

یک اتم $t\mu$ هنگام برخورد با ایزوتوپهای هیدروژن به دو صورت پراکنده خواهد شد. امکان دارد پراکندگی از نوع کشسان رخ دهد که در طی آن مجموع انرژی جنبشی ذرات قبل و بعد از برخورد تغییر نمی‌کند، همچنین اندازه سرعت نسبی قبل و بعد از برخورد باید یکسان باشد. یا ممکن است پراکندگی ناکشسان از نوع تغییر در ساختار فوق‌ریز اتم میوندار به وقوع پیوندد که در این صورت تغییر انرژی ناشی از اثرات فوق‌ریز، ΔE_{hfs} ، بر انرژی جنبشی ذرات پرتابه و سرعت نسبی پس از برخورد تأثیر می‌گذارد.

$$E_{t\mu} + E_{BC} = E'_{t\mu} + E'_{BC} + \Delta E_{hfs} \quad (14)$$

$$|\vec{V}'_{rel}| = |\vec{V}_{rel}| \sqrt{1 + \frac{\Delta E_{hfs}}{E}} \quad (15)$$

که در آن E انرژی جنبشی نسبی قبل از برخورد، \vec{V}_{rel} و \vec{V}'_{rel} به ترتیب سرعت نسبی قبل و بعد از برخورد است و BC معرف نوع مولکول مورد برخورد می‌باشد.

انتقال از حالت پایه فوق‌ریز به حالت برانگیخته، مستلزم صرف انرژی است، که مقدار این انرژی برابر اختلاف سطوح تراز در دو حالت مذکور، ΔE_{hfs} ، می‌باشد. برای اتم $t\mu$ $\Delta E_{hfs} \approx 24.0 \text{ meV}$ است [۱۶]. تنها انرژی جنبشی برخوردی است که می‌تواند این انرژی را تأمین کند. در نتیجه برای برخوردهایی که همراه با انرژی جنبشی نسبی کمتر از ۲۴۰ میلی‌الکترون‌ولت باشد، انتقال به حالت برانگیخته فوق‌ریز عملاً ممنوع است. سطح مقطع این فرآیند نیز یک آستانه انرژی را در همین محدوده نشان می‌دهد [۱۵].

تغییر در تکانه اتم میوندار پس از برخورد به‌طور عمده به زاویه بین امتداد حرکت اتم میوندار با محور اتصال دهنده دو هسته مولکول به یکدیگر بستگی دارد. برای یافتن تکانه اتم میوندار ناگزیر هستیم مسئله را به سیستم مختصات مرکز جرم منتقل کنیم. در صورتی که برخورد کشسان باشد، اندازه سرعت نسبی قبل و بعد از برخورد یکسان خواهد بود. ساچ و تلر نشان دادند که هدفهای مولکولی را می‌توان به‌عنوان جرم نقطه‌ای

اسپین صفر تشکیل می‌شوند. با تولید یک عدد کاتوره‌ای (Γ_i) و مقایسه آن با این احتمالات تعیین می‌گردد که اتم میوندار در چه حالت اسپینی قرار دارد.

مرحله بعد، تعیین نوع مولکولی است که اتم $t\mu$ با آن برخورد می‌کند، چون در محیط D/T مولکولهای D_2 و DT و T_2 موجود است. نسبت غلظت آنها براساس غلظتهای اتمی، معادل $c_i^2 : c_{d_i} : c_{t_i}$ است. با توجه به اینکه داریم $c_{d_i}^2 + c_{d_i}c_{t_i} + c_{t_i}^2 = 1$ ، می‌توان با تولید عدد کاتوره ای (Γ_i) و مقایسه آن با مقادیر $c_{d_i}^2$ ، $c_{d_i}c_{t_i}$ ، $c_{t_i}^2$ ، تعیین نمود که برخورد با کدام مولکول انجام شده است.

تشکیل مولکول $dt\mu$ از اهمیت خاصی برخوردار است، زیرا به‌طور رزونانسی و با آهنگ بالاتری نسبت به دیگر مولکولهای میوندار تشکیل می‌گردد و از طرفی ضریب چسبندگی میون بعد از همجوشی در آن مولکول کمتر است. تنها با برخورد با مولکولهای DT و D_2 است که مولکول $dt\mu$ می‌تواند تشکیل شود. ولی در برخورد اتم $t\mu$ با هر یک از این مولکولها، امکان برخورد کشسان و ارونگی اسپینی نیز وجود دارد، پس در صورتی که سطوح مقطع این برخوردها (σ_{sf} ، σ_{el} ، σ_{mol}) در دسترس باشد احتمال تشکیل مولکول را می‌توان از رابطه زیر به‌دست آورد.

$$P_{mol} = \frac{\sigma_{mol}}{\sigma_{mol} + \sigma_{el} + \sigma_{sf}} \quad (13)$$

و به‌طور مشابه با تولید عدد کاتوره ای (Γ_i) و مقایسه آن با P_{mol} تعیین نمود که آیا مولکول تشکیل می‌گردد یا خیر، اگر $\Gamma_i \leq P_{mol}$ باشد مولکول $dt\mu$ تشکیل خواهد شد، در این صورت انجام همجوش در این مولکول قطعی است و می‌توان پس از هر تشکیل مولکول یکی به شماره تعداد همجوشیها اضافه کرد. از طرفی اگر $\Gamma_i > P_{mol}$ به‌دست آید در آن صورت به‌طور مشابه احتمال برخورد کشسان و یا ارونگی اسپینی بررسی می‌گردد.

سطوح مقطع برخورد، وابسته به انرژی برخوردی است به‌همین دلیل در هر مرحله که اتم میوندار پیش می‌رود بسته به نوع برخوردی که انجام می‌دهد، انرژی بعد از برخورد باید

در صورتی که برخورد غیرکشسان باشد علاوه بر تغییر جهت اسپین، با به کار بردن محاسباتی براساس روابط (۱۵ و ۱۴) و در نظر گرفتن این نکته که مجموع انرژی بعد از برخورد در حالتی که اسپین اتم $t\mu$ از $F=1$ به $F=0$ تبدیل شود به اندازه 0.24eV افزایش می‌یابد، انرژی بعد از برخورد اتم $t\mu$ محاسبه می‌گردد.

پس از آن اتم $t\mu$ برای انجام برخورد بعدی به وضعیت تعیین نوع مولکول مورد برخورد باز می‌گردد و این فرآیند همچنان ادامه می‌یابد تا آنکه میون واپاشی کند و یا اتم $t\mu$ یکی از برخوردهای خود موفق به تشکیل مولکول $dt\mu$ شود و میون بعد از همجوشی در مولکول به ذره باردار ناشی از همجوشی بچسبد. مسلماً در هر بار که این فرآیندها تکرار می‌گردد، میون از مسیرهای مختلفی در برنامه عبور خواهد کرد که به دلیل ماهیت آماری مسئله است. در هر پله‌ای که میون یا اتم میوندار پیش می‌رود بر حسب نوع برخوردی که برنامه براساس مقایسه عدد کاتوره‌ای با سطوح مقطع تعیین می‌کند، با استفاده از آهنگ واکنش، زمان طی شده در آن برخورد محاسبه می‌گردد. زمان متوالی بین دو برخورد بستگی به انرژی برخورد دارد و باید محاسبه گردد.

در هر مرحله، برنامه تعیین می‌کند که در چه لحظه از زمان قرار داریم و انرژی اتم میوندار چقدر است. در مورد تعیین انرژی توضیح داده شد و در مورد تعیین زمان، در قسمت بعدی توضیح داده می‌شود. با توجه به اینکه میون ذره ناپایداری است و ثابت واپاشی آن $\lambda_0 = 4.545 \times 10^6 \text{s}^{-1}$ است، در هر مرحله از زمان باید چک شود که آیا میون واپاشی کرده است یا نه، بنابراین ابتدا به طور آماری برای هر میون یک زمان عمر تعیین می‌گردد، $\xi = -\frac{1}{\lambda} \ln \xi$ که در آن ξ یک عدد کاتوره‌ای بین صفر و یک است. سپس بعد از هر برخورد با محاسبه زمان، اولین چیزی که چک می‌شود، مقایسه یک زمان طی شده با عمر میون است. اگر $t \leq \tau$ باشد میون به کار خود ادامه می‌دهد در غیر این صورت میون واپاشی کرده و سرنوشت آن خاتمه می‌یابد. این فرآیند برای هر میون تاجایی تکرار می‌گردد که

فرضی در نظر گرفت که سرعت این نقطه فرضی با سرعت مولکول برابر است ولی دارای یک تانسور جرم است که به ساختار مولکول بستگی دارد. برای یک مولکول BC دو اتمی، وجود این تانسور جرم ما را به در نظر گرفتن جرم مؤثر هدف سوق خواهد داد که به صورت زیر به دست آمده است [۶].

$$m_B^{eff} = \frac{m_B + m_C}{1 + \frac{m_C}{m_B} \sin^2 \beta} \quad (16)$$

m_B و m_C جرمهای واقعی اتم در مولکول BC هستند، که برخورد اصلی اتم $t\mu$ با B در نظر گرفته می‌شود. β متوسط زاویه بین محور اتصال دهنده دو هسته و راستای سرعت پرتابه A هنگام برخورد است. می‌توان نشان داد که سرعت نهایی ذرات A و B با روابط زیر داده می‌شوند [۶]:

$$\vec{V}'_A = \vec{V}_{cm} + \gamma_B \vec{V}'_{rel} \quad (17)$$

$$\vec{V}'_B = \vec{V}_{cm} - \gamma_A \vec{V}'_{rel} \quad (18)$$

که در آن داریم،

$$\gamma_B = \frac{m_B^{eff}}{m_A + m_B^{eff}} \quad \text{و} \quad \gamma_A = \frac{m_A}{m_A + m_B^{eff}}$$

\vec{V}_{cm} بردار سرعت مرکز جرم است. پس با در دست داشتن اطلاعات فوق می‌توان سرعت نهایی یک ذره را با انتخاب حالت‌های تصادفی، توسط رهیافت زیر محاسبه کرد.

۱- در گام نخست نوع مولکول برخورد کننده با اتم میوندار تعیین می‌شود. همچنین هسته‌ای از مولکول مذکور که سهم بیشتری در پراکندگی ایفا می‌کند باید شناسایی شود که توسط انتخاب تصادفی ایزوتوپهای هیدروژن متناسب با درصد آن نوع ایزوتوپ تعیین می‌گردد.

۲- انرژی و تندی اولیه مولکول موجود در محیط را می‌توان به صورت تصادفی با توجه به تابع توزیع انرژی ذرات محیط، $f(E, T)$ ، مشخص نمود. احتمال قرار گرفتن انرژی ذره در بازه $[E, E + dE]$ را مساوی عدد تصادفی ξ قرار می‌دهیم و به صورت زیر E را به دست می‌آوریم.

$$\xi = \int_0^E f(E, T) dE = F(E) \quad (19)$$

$$E = F^{-1}(\xi) \quad (20)$$

میون به جایی از برنامه برسد که معرف واپاشی یا چسبیدن باشد و سپس برنامه، میون ورودی دیگری را انتخاب کرده و این الگوریتم دوباره تکرار می‌گردد. به ازای هر میون که برنامه را شروع می‌کند، در زمانی که سرنوشت آن خاتمه می‌یابد کمیتهای مهمی مثل تعداد همجوشیها یا زمان طی شده ثبت می‌گردد. برنامه تا جایی ادامه می‌یابد که تعداد تعیین شده برای میونها خاتمه یابد، در آن صورت تعداد متوسط کمیتهای مورد نظر ثبت می‌گردد و برنامه برای غلظت ایزوتوپی دیگری تکرار می‌گردد.

بنابراین زمان میانگین بین دو برخورد را با تولید عدد کاتوره‌ای ξ بین صفر و یک می‌توان به دست آورد

$$F(T) = \int_0^T \lambda e^{-\lambda t} dt = 1 - e^{-\lambda T} \quad (23)$$

تابع توزیع احتمال جمعی، $F(T)$ ، از رابطه زیر حساب می‌شود

$$T = -\frac{1}{\lambda} \ln \xi \quad (24)$$

با جمع زمانهای طی شده در زنجیره فرآیندهایی که پی در پی اتفاق می‌افتد، برنامه تعیین می‌کند که در چه لحظه‌ای از زمان قرار داریم. بنابراین زمان اولین تشکیل مولکول میوندار و انجام همجوشی که همان زمان طی کردن چرخه برای یک میون است، حساب می‌شود. با تکرار این محاسبات برای تعداد زیادی میون ورودی (n) و متوسط‌گیری از آن، زمان متوسط طی کردن چرخه محاسبه می‌شود

$$\bar{t} = \frac{\sum_i t_i}{n} \quad (25)$$

و از آنجا آهنگ چرخه حساب می‌شود $\lambda = \frac{1}{\bar{t}}$.

این محاسبات به ازای غلظتهای مختلف ایزوتوپیهای هیدروژن تکرار می‌شود که نتایج به صورت نمودار شکل ۱ ارائه شده است.

راهی که معمولاً در مقالات زیاد به آن اشاره می‌شود استفاده از فرمولی است که یک برآورد کلی از آهنگ چرخه را می‌دهد [۲۰]. در این رابطه بیشترین زمان توقف میون در چرخه را مربوط به انتقال میون از حالت پایه $d\mu$ به حالت پایه $t\mu$ (τ_d) و تشکیل مولکول $dt\mu$ توسط برخورد اتم $t\mu$ با مولکولهای D_2 یا DT (τ_t) در نظر می‌گیرند، به طوری که زمان متوسط طی کردن چرخه را به صورت زیر برآورد می‌کنند

$$\tau = \tau_d + \tau_t = \frac{q_{vs} c_d}{\lambda_{dt} \phi c_t} + \frac{1}{\lambda_{dt\mu} \phi c_d} \quad (26)$$

میون به جایی از برنامه برسد که معرف واپاشی یا چسبیدن باشد و سپس برنامه، میون ورودی دیگری را انتخاب کرده و این الگوریتم دوباره تکرار می‌گردد. به ازای هر میون که برنامه را شروع می‌کند، در زمانی که سرنوشت آن خاتمه می‌یابد کمیتهای مهمی مثل تعداد همجوشیها یا زمان طی شده ثبت می‌گردد. برنامه تا جایی ادامه می‌یابد که تعداد تعیین شده برای میونها خاتمه یابد، در آن صورت تعداد متوسط کمیتهای مورد نظر ثبت می‌گردد و برنامه برای غلظت ایزوتوپی دیگری تکرار می‌گردد.

۴. محاسبه آهنگ چرخه، ضریب چسبندگی کل و بهره همجوشی با استفاده از روش مونت کارلو

قابلیت برنامه‌ای که براساس روش مونت کارلو تهیه کرده‌ایم این توانایی را به ما می‌دهد که بتوان با تمهیداتی، کمیات مهمی مثل تعداد همجوشی کاتالیز شده به ازای یک میون که به آن بهره همجوشی می‌گوییم و با λ نمایش می‌دهیم و آهنگ چرخه، λ_c ، و ضریب چسبندگی کل، W ، را حساب کنیم. محاسبه این کمیتهای از روش مونت کارلو برای اولین بار انجام می‌گیرد.

۴.۱ محاسبه آهنگ چرخه

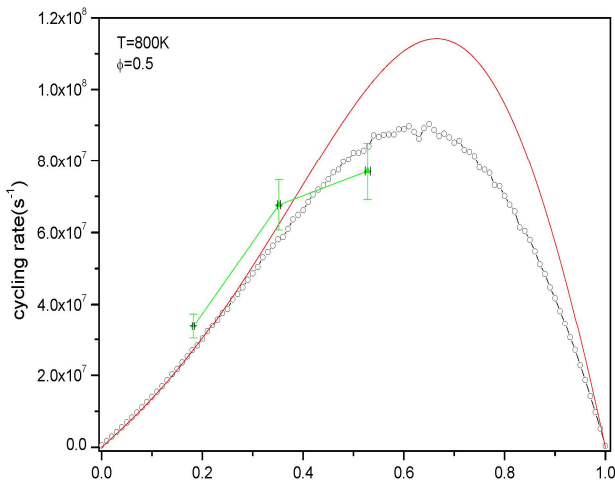
برای این منظور در هر پله که میون یا اتم میوندار پیش می‌رود بر حسب نوع برخوردی که برنامه براساس مقایسه عدد کاتوره‌ای با سطوح مقطع تعیین می‌کند، زمان طی شده در آن برخورد با استفاده از آهنگ واکنش، محاسبه می‌گردد. زمان متوالی بین دو برخورد بستگی به انرژی برخوردی دارد و باید محاسبه گردد. تابع چگالی احتمال برای برخورد در زمان t برابر است با:

$$f(t) = \lambda e^{-\lambda t} \quad (21)$$

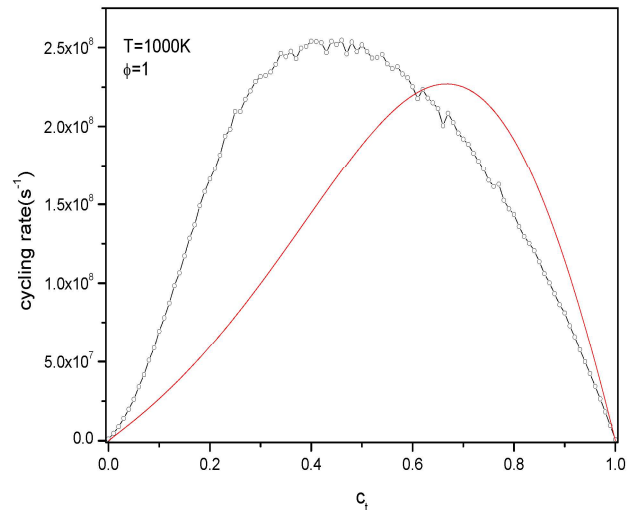
که در آن λ آهنگ برخورد است و برای تشکیل مولکول از منابع [۹۰] در اختیار است. و برای برخوردهای دیگر، λ براساس رابطه زیر از سطوح مقطع به دست می‌آید:

$$\lambda_{ij}^{BC} = N V_{rel} \sigma_{ij}^{BC} \quad (22)$$

که در آن N چگالی محیط، V_{rel} سرعت نسبی قبل از برخورد،



شکل ۲. مقایسه آهنگ چرخه استخراج شده از روش مونت کارلو (O) و منحنی فرمول (۲۷) با نتایج تجربی [۱۸] در شرایط $T=800\text{K}$ و $\phi=0.5$.



شکل ۱. مقایسه آهنگ چرخه استخراج شده از روش مونت کارلو (O) با منحنی فرمول (۲۷) در شرایط $T=1000\text{K}$ و $\phi=1$.

شکل ۱ مقایسه نتایج شبیه سازی مونت کارلو را با فرمول ۲۷ در شرایط $T=1000\text{K}$ و $\phi=1$ نشان می دهد. مشاهده می گردد که براساس فرمول ۲۷ مقدار λ_c تقریباً به طور خطی به ϕ وابسته است (البته مقدار q_{1s} وابسته به ϕ است ولی همان طور که شکل ۱ نشان می دهد اثر وابستگی λ_c به ϕ بیشتر به صورت خطی است). ولی محاسبات مونت کارلو در این مقاله نشان می دهد که شکل λ_c نسبت به c_f برحسب مقدار ϕ می تواند متفاوت باشد. در حقیقت فرآیند های برخوردی در محیط نقش اساسی در چرخه μCF دارند که نسبت به ϕ خطی نیستند و با شبیه سازی مونت کارلو به دقت در نظر گرفته می شوند.

۲.۴ محاسبه ضریب چسبندگی کل

میون از طریق چسبیدن به محصولات باردار ناشی از همجوشی در مولکولهای $dt\mu$ ، $dd\mu$ و $tt\mu$ از چرخه همجوشی کاتالیزور میونی خارج می شود. احتمال چسبندگی مؤثر پس از همجوشی در مولکولهای فوق به ترتیب $w_s = 0.43$ ، $w_{dd} = 0.12$ و $w_{tt} = 0.16$ [۱۶و۲] است و در مقالات یک برآورد کلی از این ضریب توسط فرمول زیر ارائه شده است [۱۹]:

که در آن λ_{dt} آهنگ انتقال میون از دوتریوم به تریتیوم در حالت پایه و $\lambda_{dt\mu}$ آهنگ تشکیل مولکول $dt\mu$ است. بنابراین داریم

$$\lambda_c^{-1} = \frac{q_{1s} c_d}{\lambda_{dt} \phi c_f} + \frac{1}{\lambda_{dt\mu} \phi c_d} \quad (27)$$

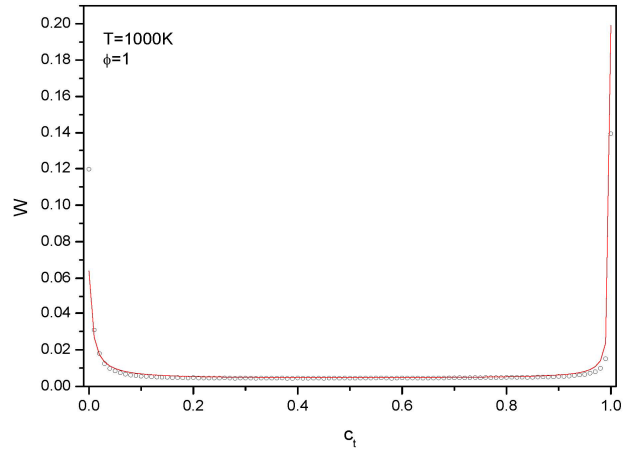
با قرار دادن مقادیر q_{1s} ، λ_{dt} و $\lambda_{dt\mu}$ از منابع [۱، ۹ و ۱۷] در محیط با چگالی هیدروژن مایع ($\phi=1$)، نتایج کار حاضر را با این فرمول در شکل ۱ مقایسه کرده ایم. هر چند که مرتبه بزرگی λ_c از دو روش یکسان است ولی مشاهده می گردد که تابعیت آهنگ چرخه نسبت به c_f با استفاده از روش مونت کارلو متفاوت است. با توجه به اینکه در روش مونت کارلو تمام جزئیات برخوردها و تابعیت انرژی و اسپین آنها در نظر گرفته می شود انتظار داریم که نتایج به واقعیت نزدیکتر باشد. مقایسه با نتایج تجربی موجود نیز این موضوع را تأیید می کند. در شکل ۲ نیز نتایج محاسبه مونت کارلو با نتایج تجربی برای λ_c در حالت $\phi=0.5$ و در دمای $T=800\text{K}$ [۱۸] مقایسه شده است. این مقایسه نشان می دهد که نتایج محاسبات ما به نتایج تجربی نزدیک است. از نظر عملی برای رسیدن به این دما و چگالی نیاز به فشارهای بالا (حدود ۱۵۰۰ bar) است. این شرایط در آزمایشگاههایی که روی این زمینه فعالیت می کنند قابل دسترسی است [۱۸].

میون ورودی بعدی را اجراء می‌کند.

محاسبات ما براساس روش مونت کارلو در غلظت‌های مختلف تریتیوم در شکل ۳ نشان داده شده است و با نتایج فرمول ۲۸ مقایسه شده است. مشاهده می‌گردد فرمول ۲۸ بر خلاف فرمول ۲۷ از دقت قابل قبولی برخوردار است. البته در شرایط حدی که c_d یا c_t خیلی کوچک باشند این فرمول درست نیست، ولی نتایج شبیه‌سازی مونت کارلو همان‌طور که انتظار داریم در c_t های بزرگ مقدار $W \approx w_{tt} = 14\%$ و در c_d های بزرگ مقدار $W \approx w_{dd} = 12\%$ را می‌دهد.

۳.۴ محاسبه بهره همجوشی

تعداد همجوشیهای کاتالیز شده به ازای یک میون را که همان بهره همجوشی است نیز از روش مونت کارلو حساب کرده‌ایم. برای این منظور وقایعی که از لحظه ورود میون به مخلوط D/T برای میونها و اتمهای میوندار اتفاق می‌افتد و در قسمتهای قبل توضیح داده شد با روش مونت کارلو دنبال می‌شود. زمانی که در این مسیر به نقطه‌ای می‌رسیم که مولکول $dt\mu$ یا $dd\mu$ یا $tt\mu$ تشکیل می‌شود، متعاقب آن همجوشی صورت می‌گیرد. در این لحظه یکی به شمارنده تعداد همجوشیها اضافه می‌گردد. پس از آن میون یا به ذره باردار ناشی از همجوشی (ذره α) می‌چسبد و برنامه برای آن میون خاتمه می‌یابد و میون بعدی کار خود را آغاز می‌کند و یا میون آزاد می‌گردد و برنامه را در مسیر دیگری تکرار می‌کند. در طی این فرآیندها، میون ممکن است واپاشی کند که در قسمت قبل به آن اشاره شد، بنابراین در زمانی که میون وارد محیط می‌گردد تا اینکه به ذره α بچسبد یا واپاشی کند، تعداد همجوشیها برای هر میون توسط شمارنده ثبت می‌گردد. البته این کمیت باید به ازای تعداد میونهای ورودی زیادی تکرار گردد و از نتایج به دست آمده برای هر میون نسبت به تعداد میونهای ورودی متوسط‌گیری گردد. برنامه را به ازای یک میلیون میون ورودی اجراء کردیم و آن را برای شرایط غلظت تریتیوم مختلف تکرار نمودیم. نتایج به صورت نمودار در شکل ۴ ارائه شده است.



شکل ۳. مقایسه ضریب چسبندگی کل محاسبه شده از روش مونت کارلو (O) با منحنی فرمول (۲۸) در شرایط $T=1000K$ و $\phi=1$.

(۲۸)

$$W = w_s + \frac{q_{vs}c_d}{\lambda_{dt}c_t + \lambda_{dd\mu}c_d} (\cdot / \delta \lambda_{dd\mu}c_d w_{dd}) + \frac{\lambda_{tt\mu}c_t w_{tt}}{\lambda_{dt\mu}c_d}$$

این فرمول در حقیقت از جمع چسبندگی‌ها در کانالهای مختلف تشکیل مولکول $dt\mu$ ، $dd\mu$ و $tt\mu$ براساس سهم آماری هر کانال در کل چرخه به دست آمده است [۲۰]. در این مقاله برای اولین بار ضریب چسبندگی از طریق محاسبه مونت کارلو حساب شده است. برای این منظور با دنبال کردن مسیر وقایعی که برای اتمهای میوندار تا لحظه تشکیل مولکول اتفاق می‌افتد، اگر پس از انجام همجوشی در هر یک از کانالهای تشکیل مولکول $dt\mu$ ، $dd\mu$ و $tt\mu$ میون به ذره باردار ناشی از همجوشی بچسبد یکی به شمارنده قرار داده شده در برنامه در هر یک از کانالهای مذکور اضافه می‌گردد. برنامه برای تعداد زیادی میون و روی (10^6 میون) اجراء شد و سپس تعداد کل میونهای چسبیده به تعداد کل میونهای ورودی ضریب چسبندگی کل را خواهد داد. لازم به ذکر است که چون میون پس از همجوشی ممکن است دوباره آزاد شود و در مسیر دیگری برنامه را تکرار کند، بالاخره در یکی از این مسیرها میون به ذره باردار می‌چسبد و در این صورت چسبندگی را یک یا نزدیک به یک به دست می‌آوریم. برای اجتناب از این مشکل، در برنامه به میون فقط اجازه یک بار عبور از مرحله تشکیل مولکول داده می‌شود و پس از اولین تشکیل مولکول، برنامه

میوندار فوق حرارتی یکسان نیست.

در هر صورت از طریق وارد کردن پارامتر η ، اثر اتمهای میوندار فوق حرارتی به طور متوسط وارد معادلات می شود. علاوه بر این در باقی فرآیندهای زنجیره ای چرخه، متوسط آهنگ واکنشها به کار می رود. به همین دلیل برای محاسبه کمیات مهمی مثل تعداد همجوشیها به ازای یک میون، روش حل سینماتیک چرخه در حالت تعادل، کاملاً دقیق نیست.

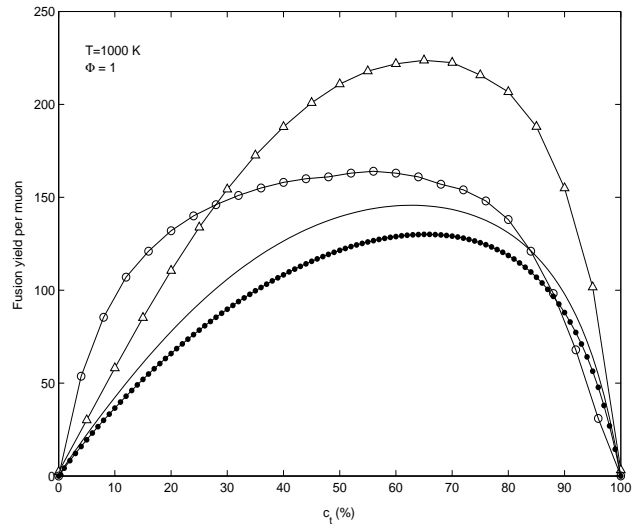
روش دیگر، استفاده از فرمولی است که بر اساس مفهوم بهره همجوشی یک برآورد کلی از χ را می دهد و معمولاً در مقالات زیاد به آن اشاره می شود [۱۶ و ۲].

$$\chi = \left(\frac{\lambda_c}{\lambda_c + W} \right)^{-1} \quad (29)$$

که در آن λ_c ثابت واپاشی میون، W ضریب چسبندگی کل (رابطه ۲۸) و λ_c آهنگ چرخه (رابطه ۲۷) است.

در شکل ۴ نتایج مربوط به روشهای مختلف را برای محاسبه χ ، با روش مونت کارلو در کار حاضر مقایسه کرده ایم. همان طور که انتظار داریم اتمهای فوق حرارتی به دلیل اینکه دارای سطح مقطع تشکیل مولکول $dt\mu$ بیشتری هستند، مقدار بهره را نسبت به حالتی که این اثرات را در نظر نگرفته ایم افزایش می دهد، ولی مشاهده می گردد که مقادیر بهره همجوشی حاصل از روش مونت کارلو، بین مقادیر حاصل از سینماتیک چرخه در دو حالت بدون اثرات فوق حرارتی و با اثرات فوق حرارتی قرار می گیرد. که دلایل آن را می توان به صورت زیر توضیح داد:

در محاسبه η در مرجع [۲۰]، انرژی اتمهای $t\mu$ فوق حرارتی حدود 60eV در نظر گرفته شد که باعث افزایش مقادیر η محاسبه شده، گردیده است. در صورتی که در عمل، اتمهای $t\mu$ فوق حرارتی دارای انرژی یکسانی نیستند و در یک طیف انرژی قرار می گیرند [۱۰]. به همین دلیل مقادیر بهره همجوشی در محاسبات مربوط به حل سینماتیک با در نظر گرفتن اثرات فوق حرارتی در مرجع [۲۰]، بیش از مقدار محاسبه شده در این مقاله به دست آمده است.



شکل ۴. مقایسه نمودار تغییرات تعداد همجوشی به ازای یک میون نسبت به غلظت تریتوم، از روشهای حل سینماتیک (●) [۴]، حل سینماتیک با در نظر گرفتن اثرات اتمهای فوق حرارتی (Δ) [۸]، منحنی فرمول (۲۹) و شبیه سازی مونت کارلو (○) (کار حاضر) در شرایط $T=1000\text{K}$ و $\Phi=1$.

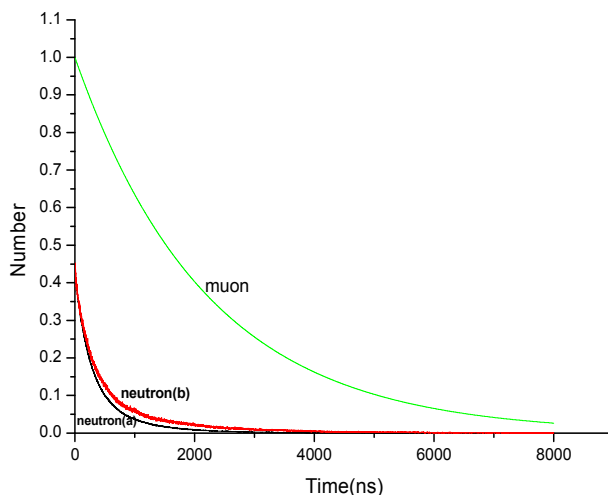
ما محاسبات مربوط به بهره همجوشی را که برای اولین بار توسط روش مونت کارلو انجام شده است را با نتایج روشهای دیگر نیز مقایسه کرده ایم. یکی از این روشها همان حل معادلات سینماتیکی است که نتایج آن را در جاهای دیگر ارائه کرده ایم [۸ و ۴].

باید توجه داشت که اتمهای $t\mu$ فوق حرارتی در طی حرارتی شدن می توانند موفق به تشکیل مولکولهای $dt\mu$ با آهنگ بیشتری شوند که این اثر در حل سینماتیک چرخه لحاظ نشده است. البته یک راه وارد کردن اثرات فوق حرارتی در سینماتیک چرخه، استفاده از پارامتر η است [۸]. عبارت است از کسری از اتمهای $t\mu$ فوق حرارتی که قبل از رسیدن به انرژی حرارتی، تشکیل مولکول $dt\mu$ بدهند. هر چند که وارد کردن پارامتر η در معادلات سینماتیک چرخه، چرخه μCF را کاملتر می کند ولی محاسبه این کمیت به نظر می رسد از دقت کافی برخوردار نباشد. زیرا اتمهای میوندار فوق حرارتی در محیط، با انرژیهای متفاوتی تولید می شوند و به همین دلیل امکان تشکیل فوق حرارتی مولکول $dt\mu$ برای تمام اتمهای

ماهیت آماری برخوردها در چرخه μCF نیز باعث می‌گردد تشکیل مولکولهای میوندار $dt\mu$ در زمانهای متفاوتی بعد از ورود میون به محیط اتفاق بیفتد. با شبیه‌سازی مونت‌کارلو و تعیین پارامتر زمان در طی شبیه‌سازی، طیف زمانی نوترونها ناشی از همجوشی به ازای یک میون استخراج شده است (شکل ۵). برای این منظور با تقسیم زمان به گامهای کوچک ($\Delta t \approx 2\text{ns}$) و استفاده از مطالب قسمت ۴.۱ برای تعیین زمان، به ازای هر میون ورودی، تعیین می‌گردد که انتهای مسیر (تشکیل مولکول میوندار) در چندمین گام زمانی قرار گرفته است و به شمارنده آن گام زمانی یکی اضافه می‌گردد. البته میون پس از آزادسازی و تکرار مسیر شبیه‌سازی، در گام زمانی دیگری مولکول $dt\mu$ را تشکیل می‌دهد. این الگوریتم برای 10^6 میون تکرار شد و از نتایج در هر گام متوسط‌گیری شده است.

علاوه بر این، نمودار واپاشی میون ($e^{-\lambda t}$) را در کنار طیف زمانی نوترونها همجوشی در شکل ۵ رسم کرده‌ایم. مشاهده می‌شود که سرعت کاهش تعداد نوترونها به ازای یک میون، بیشتر از سرعت واپاشی میون است. پس عوامل دیگری باید در کاهش تعداد نوترونها تولیدی نسبت به زمان دخیل باشند. این تفاوت را می‌توان به تاثیر محیط نسبت داد. مهمترین عامل، چسبندگی میونهاست. برای روشن شدن موضوع، طیف زمانی نوترونها تولیدی را با حذف واپاشی میون در برنامه در شکل ۵ رسم کردیم. بر خلاف انتظار تاثیر چندانی جز اندکی افزایش در تعداد نوترونها به دست نیامد. ما دلیل آن را همان چسبندگی میون می‌دانیم که با گذشت زمان و تکرار چرخه توسط میون، احتمال چسبیدن آن افزایش می‌یابد. به طوری که تا حدود $1\mu\text{s}$ اول اکثر میونها از طریق چسبندگی از دست می‌روند. این موضوع نشان می‌دهد که نقش چسبندگی در کاهش بهره بسیار مهمتر از نقش واپاشی میون است. این خود یکی از مزایای این شبیه‌سازی است که می‌توانیم نتایج آزمایشهایی که قادر به انجام آنها نیستیم، مثل حذف واپاشی میونها را محاسبه کنیم.

شکل ۶ تغییرات طیف زمانی نوترونها را در غلظتهای مختلف تریتیوم نشان می‌دهد. اطلاعات مربوط به طیف زمانی نوترونها برای آزمایشگر در آشکارسازی نوترونها راهنمای

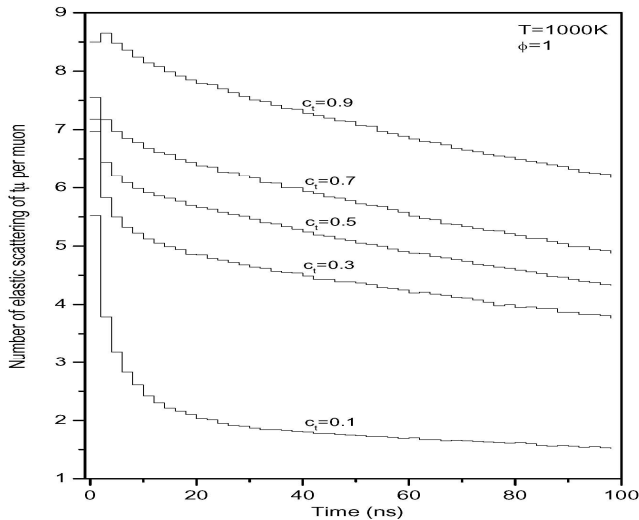


شکل ۵. طیف زمانی نوترونها همجوشی در شرایط $T=1000\text{K}$ و $\phi=1$ و $c_i=0.4$ در دو حالت با واپاشی میون (a) و بدون در نظر گرفتن واپاشی میون (b) و مقایسه آنها با نمودار واپاشی میون.

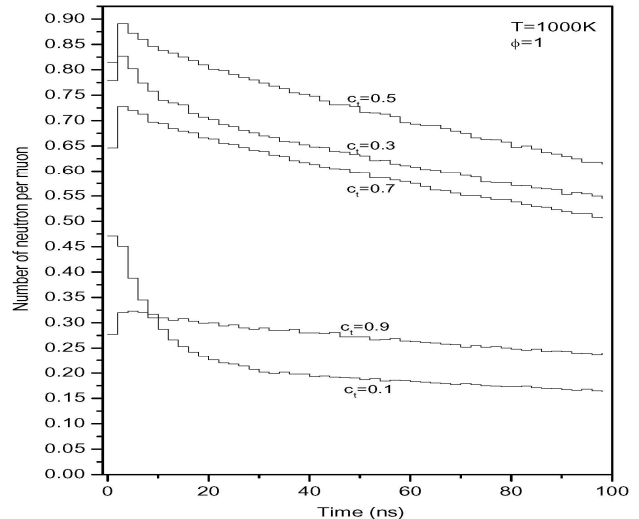
شایان ذکر است که در مقایسه غلظت زیاد تریتیوم، مقادیر شبیه‌سازی به مقادیر فرمول (۲۷) و نتایج حل سینماتیکی نزدیک می‌شوند. در قسمت بعد نشان خواهیم داد که در غلظتهای زیاد تریتیوم تعداد برخوردهای کشسان اتمهای $t\mu$ افزایش می‌یابد. افزایش برخوردهای کشسان به معنای افزایش سرعت حرارتی شدن اتمهای $t\mu$ است، ضمن آنکه در مقادیر زیاد تریتیوم تعداد انتقال میون و تولید اتمهای $t\mu$ فوق‌حرارتی کمتر می‌گردد. به عبارت دیگر اثرات فوق‌حرارتی در غلظتهای زیاد تریتیوم کوچک است و نتایج در حالت تعادل دمایی می‌توانند نتایج خوبی باشند. در مقادیر دیگر غلظت تریتیوم با توجه به اینکه روش مونت‌کارلو روش دقیقتری است و به خصوص اینکه جزئیات برخوردها در محاسبات وارد می‌شود، مقدار χ دقیقتر است.

۵. طیف زمانی نوترونها همجوشی و برخوردهای اتمهای میوندار

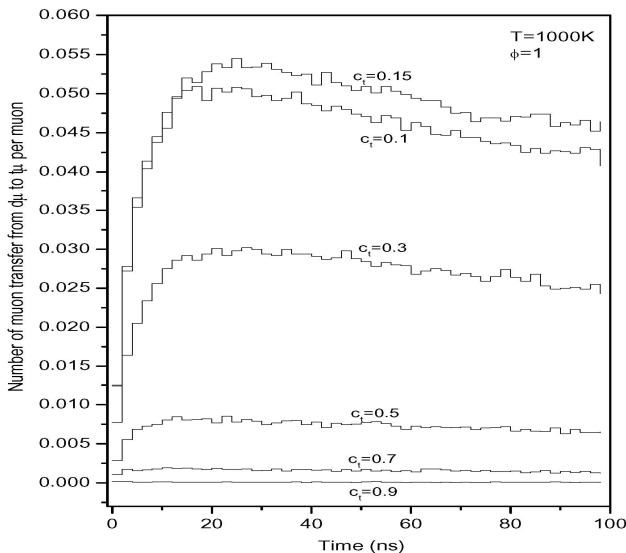
وقتی شاری از میونها وارد محیط D/T می‌شود و چرخه μCF آغاز می‌گردد مسلماً نوترونها ناشی از همجوشی در مولکولهای $dt\mu$ ، به‌طور همزمان از محیط خارج نمی‌شوند. علاوه بر این که میونها با تأخیر زمانی وارد محیط می‌گردند،



شکل ۷. طیف زمانی برخوردهای کشسان اتمهای $t\mu$ در غلظتهای مختلف تریتیوم در شرایط $T=1000\text{K}$ و $\phi=1$.



شکل ۶. طیف زمانی نوترونیهای همجوشی در غلظتهای مختلف تریتیوم در شرایط $T=1000\text{K}$ و $\phi=1$.



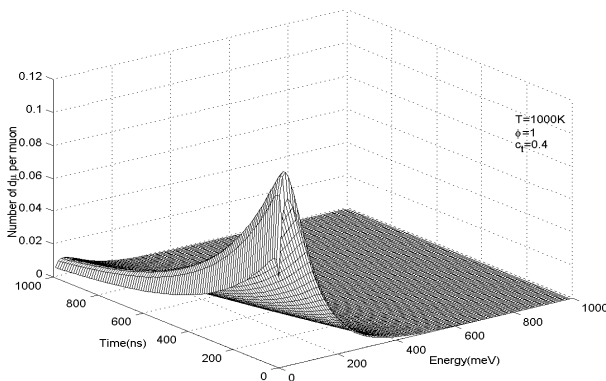
شکل ۸. طیف زمانی انتقال میون از $d\mu$ به t در غلظتهای مختلف تریتیوم در شرایط $T=1000\text{K}$ و $\phi=1$.

میوندار در حالت پایه تعیین می‌گردد. سپس با شبیه‌سازی مونت کارلو، مسیر اتفاقاتی که در برخوردهای اتمهای میوندار رخ می‌دهد دنبال می‌گردد. اگر برخورد از نوع انتقال میون باشد باعث تولید اتمهای $t\mu$ پراثری می‌گردد (رابطه ۴) و در صورتی که برخورد از نوع کشسان باشد باعث کاهش انرژی اتم میوندار می‌شود. البته برخوردهای وارونگی اسپینی نیز باعث افزایش انرژی می‌گردند. پس در هر لحظه انرژی اتم میوندار

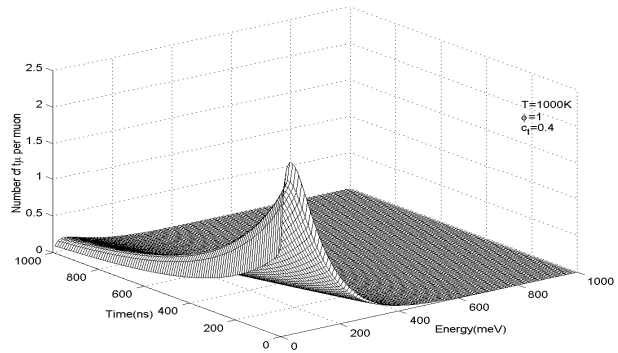
مفیدی است. علاوه بر این با روش مشابه، توزیع زمانی برخوردهای کشسان، ناکشسان و انتقال میون را برای اتمهای میوندار $d\mu$ و $t\mu$ در حالت‌های اسپینی مختلف در غلظتهای متفاوت تریتیوم محاسبه کرده‌ایم. بعضی از این نتایج در شکل‌های ۷ و ۸ ارائه شده است.

۶. تعیین طیف انرژی اتمهای میوندار

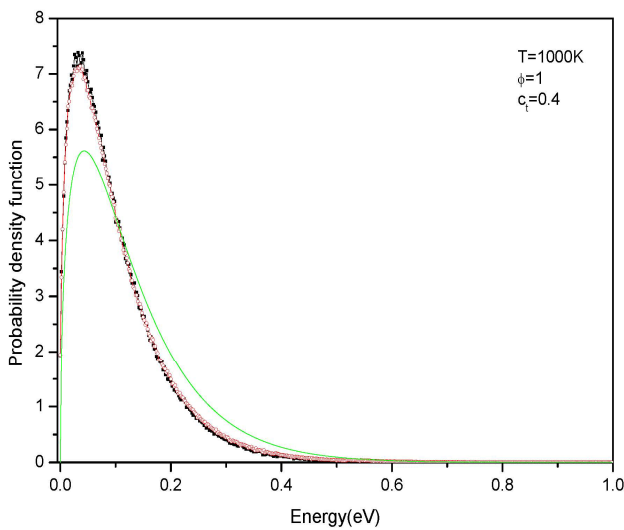
همان‌طور که در قسمت ۲ بیان شد اتمهای میوندار در زمان تشکیل در حالت‌های بسیار برانگیخته هستند ($n \sim 14$) که طی فرآیندهای آباری (Cascade) به حالت‌های پایینتر گذار می‌کنند. در طی این فرآیندها میون می‌تواند در حالت‌های برانگیخته از ایزوتوپ سبکتر به سنگینتر نیز منتقل شود. دو فرآیند برخوردی مهم یکی گذارهای کولنی و دیگری انتقال میون باعث تولید اتمهای میوندار فوق‌حرارتی می‌گردند. برخوردهای کشسان نیز باعث کند شدن اتمهای میوندار می‌شوند و توزیع انرژی اتمهای میوندار در حالت پایه وابسته به این فرآیندهاست [۱۰ و ۱۱]. در هر صورت یکی از تقریب‌هایی که برای توزیع اولیه اتمهای میوندار در حالت پایه می‌توان در نظر گرفت توزیع ماکسولی است که در این مقاله نیز از آن استفاده شده است [۷]. در این شبیه‌سازی براساس توزیع انرژی ماکسولی، انرژی اولیه اتم



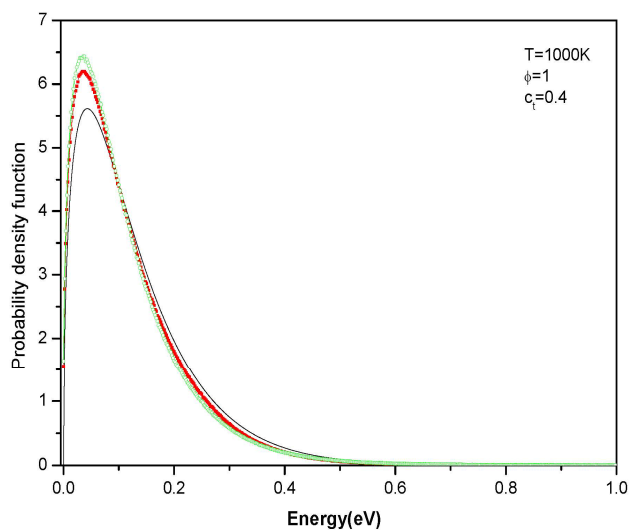
شکل ۱۰. تحول زمانی طیف انرژی اتمهای میوندار $d\mu$ در شرایط $T=1000\text{K}$ و $\phi=1$ و $c_i=0.4$.



شکل ۹. تحول زمانی طیف انرژی اتمهای میوندار $t\mu$ در شرایط $T=1000\text{K}$ و $\phi=1$ و $c_i=0.4$.



شکل ۱۲. مقایسه طیف انرژی اتمهای میوندار $d\mu^{7/2}$ (○) و $d\mu^{1/2}$ (■) در لحظه $t=150 \pm 1\text{ns}$ در شرایط $T=1000\text{K}$ و $\phi=1$ و $c_i=0.4$ با توزیع انرژی ماکسولی.

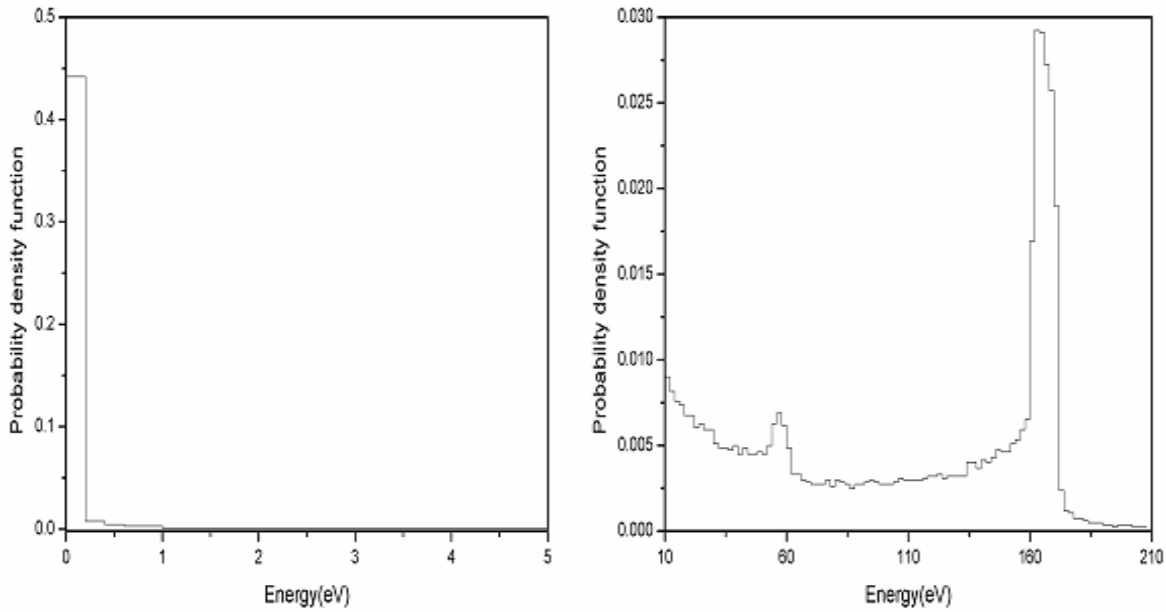


شکل ۱۱. مقایسه طیف انرژی اتمهای میوندار $t\mu^{\circ}$ (■) و $t\mu^1$ (○) در لحظه $t=150 \pm 1\text{ns}$ در شرایط $T=1000\text{K}$ و $\phi=1$ و $c_i=0.4$ با توزیع انرژی ماکسولی.

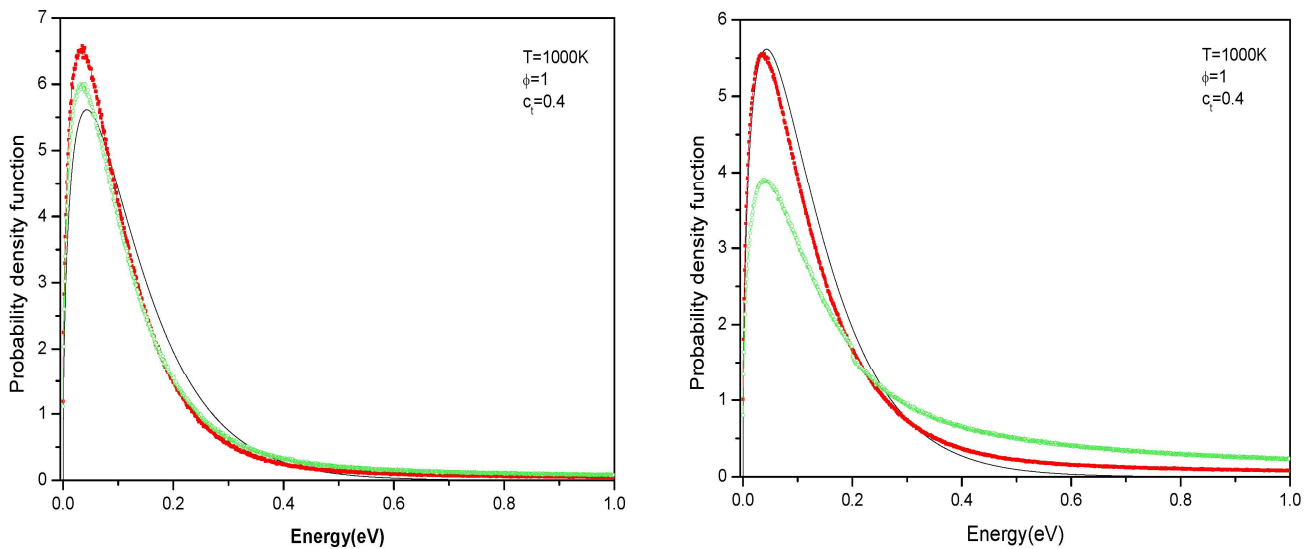
بنابراین در هر گام زمانی طیف انرژی اتمهای میوندار محاسبه می‌گردد. به عبارت دیگر به دلیل وابستگی زمانی که در شبیه‌سازی برخوردها لحاظ شده است، می‌توان تحول زمانی طیف انرژی اتمهای میوندار را به دست آورد. شکل‌های ۹ و ۱۰ تغییرات زمانی طیف انرژی اتمهای میوندار را در $c_i=0.4$ نشان می‌دهند.

به منظور اینکه طیف انرژی با وضوح بهتری مشخص گردد شکل دو بعدی آنها را در زمان $t=150 \pm 1\text{ns}$ نیز ترسیم کرده‌ایم (شکل‌های ۱۱ و ۱۲) مشاهده می‌گردد که طیف انرژی

تغییر می‌کند و در هر مرحله براساس مطالبی که در قسمت ۳ و ۴ بیان شد، زمان و انرژی اتم میوندار پس از برخورد ثبت می‌شود. این کار تا زمانی که میون واپاشی کند ادامه می‌یابد و سپس با میونهای بعدی تکرار می‌شود. در هر گام زمانی ($\Delta t=10\text{ns}$)، تعداد اتمهای میوندار که در گامهای انرژی مختلفی قرار می‌گیرند، شمارش می‌شود. در واقع برای هر اتم میوندار با اسپین معین یک آرایه دو بعدی در نظر گرفته شده است که ابعاد آن، گامهای انرژی و زمان می‌باشند. در پایان نسبت به تعداد میونهای ورودی به برنامه متوسط‌گیری می‌شود.



شکل ۱۳. توزیع انرژی جنبشی اتمهای میوندار در حالت پایه از مرجع [۱۰].



شکل ۱۵. طیف انرژی اتمهای میوندار $dt\mu^{1/2}$ (■) و $dt\mu^{3/2}$ (○) در لحظه $t=150 \pm 1 ns$ در شرایط $T=1000K$ ، $\phi=1$ و $c_i=0.4$ در شرایطی که انرژی اولیه اتمهای میوندار در حالت پایه ماکسولی نیست و از مرجع [۱۰] جایگزین شده باشد و مقایسه آن با توزیع انرژی ماکسولی.

شکل ۱۴. طیف انرژی اتمهای میوندار $t\mu^0$ (■) و $t\mu^1$ (○) در لحظه $t=150 \pm 1 ns$ در شرایط $T=1000K$ ، $\phi=1$ و $c_i=0.4$ در شرایطی که انرژی اولیه اتمهای میوندار در حالت پایه ماکسولی نیست و از مرجع [۱۰] جایگزین شده باشد و مقایسه آن با توزیع انرژی ماکسولی.

نزدیک است ولی به سمت مقادیر کمتر انرژی سوق پیدا کرده است. دلیل آن اثرات فوق حرارتی و تشکیل مولکول $dt\mu$ با آهنگ بالاتر توسط اتمهای $t\mu$ فوق حرارتی است که باعث

که در ابتدا ماکسولی در نظر گرفته شده بود تقریباً به شکل ماکسولی می ماند. همان طور که مشاهده می گردد طیف انرژی اتمهای $t\mu$ به طیف ماکسولی در دمای محیط ($T=1000K$)

فرآیندهای برخوردی که تابع انرژی هستند استفاده شده است، دقت محاسبات بیشتر است. نتایج کار حاضر با بعضی از نتایج آزمایشگاهی موجود و روشهای محاسباتی دیگر مقایسه گردید. در این قسمت بعضی از نتایج که از تحلیل این نمودارها به دست می آید ارائه می گردد.

نشان دادیم که از طریق فرمول (۲۷) فقط برآورد اولیه‌ای از آهنگ چرخه به دست می آید و وابستگی آن به چگالی محیط، φ ، پیچیده تر از فرمول (۲۷) است. نتایج مونت کارلو نشان داد که در چگالیهای بزرگ، نمودار λ_c به سمت c_l های کوچکتر سوق پیدا می کند به طوری که در $\varphi=1$ و $c_l=0.4$ مقدار λ_c محاسبه شده از روش مونت کارلو در عملاً حدود ۶۵٪ افزایش را نسبت به مقدار حاصل از فرمول (۲۷) نشان می دهد (شکل ۱). حتی بررسی چرخه μCF از روشهای حل سینماتیک نیز به دلیل اینکه وابستگی انرژی در فرآیندهای برخوردی به دقت در نظر گرفته نمی شود، با نتایج حاصل از روش مونت کارلو متفاوت است (شکل ۴). در غلظتهای زیاد تریتیم این تفاوت به حداقل می رسد، زیرا تعداد برخوردهای کشتان اتمهای $t\mu$ ، در مقایسه با دیگر برخوردها زیادتر است (شکل ۷)، ضمن آنکه در مقادیر زیادتر تریتیم تعداد انتقالهای میون از $d\mu$ به تریتیم و تولید اتمهای $t\mu$ پراثری کمتر اتفاق می افتد (شکل ۸). به عبارت دیگر اثرات فوق حرارتی در غلظتهای زیاد تریتیم قابل صرف نظر کردن است و نتایج در حالت تعادل دمایی می تواند نتایج خوبی باشند.

در غلظتهای تریتیم در بازه $[0.8-0.2]$ ، روش مونت کارلو نشان می دهد که تغییرات شدید برای بهره همجوشی نداریم (شکل ۴). بنابراین برای رسیدن به بهره بهینه، نیازی به غلظت بالای تریتیم نیست و پیشنهاد می گردد جهت صرفه جویی در مقدار تریتیم مصرفی که ماده رادیواکتیوی است و ذخایر آن کم است با غلظتهای کم تریتیم ($c_l \approx 0.3$) کار کرد.

طیف زمانی نوترونها ناشی از همجوشی، طیف انرژی اتمهای میوندار و تحول زمانی آنها نیز از روش مونت کارلو محاسبه و در قسمتهای ۵ و ۶ مورد تحلیل قرار گرفت. باید توجه داشت که این اطلاعات و نمودارهای مربوط به تعداد

کاهش تعداد اتمهای $t\mu$ در انرژیهای که آهنگ تشکیل مولکول بیشینه است شده است (۰/۵eV تا ۰/۱ ~ E). در شکل ۱۲ نیز مشاهده می گردد که اتمهای $d\mu$ با اسپین $\frac{1}{2}$ و $\frac{3}{2}$ نیز قدری از حالت توزیع ماکسولی به سمت انرژیهای کم خارج می گردند. در حقیقت در انرژیهای بین ۰/۱ تا ۰/۵ الکترون ولت، نسبت سطوح مقطع نشان می دهد که احتمال انتقال میون از $d\mu$ به تریتیم نسبت به احتمال فرآیندهای دیگر بیشتر است [۱۴]. بنابراین جمعیت اتمهای $d\mu$ در این انرژیها کاسته می شود و باعث می گردد که تابع توزیع آنها به سمت انرژیهای کمتر سوق پیدا کند.

لازم به ذکر است که حتی اگر طیف انرژی اولیه اتمهای میوندار در حالت پایه ماکسولی نباشد، در مدت کوتاهی به حالت ماکسولی نزدیک می شود. مثلاً طیف انرژی که در مرجع [۱۰] برای اتمهای میوندار ارائه شده است (شکل ۱۳) در محاسبات در نظر گرفته شد که نشان داده ایم پس از چندین نانو ثانیه به طیف ماکسولی نزدیک می شود. نتایج در این شرایط در شکلهای ۱۴ و ۱۵ ارائه شده است. به عبارت دیگر اثرات فوق حرارتی در چند نانو ثانیه اول مهم هستند و سپس به دلیل حرارتی شدن اتمهای میوندار اثر چندانی ندارند.

۷. نتیجه

در این مقاله چرخه واکنشهای همجوشی کاتالیزور میونی توسط روش مونت کارلو شبیه سازی شده است. برای این منظور کد کامپیوتری به زبان برنامه نویسی فورترن تهیه شد که پارامتر زمان نیز در آن وارد گردید. طیف زمانی وقایع مختلفی که در چرخه μCF اتفاق می افتد به دست آمد. به عبارت دیگر مشخص کرده ایم که در هر بازه زمانی، وقایع زنجیره ای در چرخه μCF با چه تعدادی انجام می شوند. از جمله طیف زمانی نوترونها ناشی از همجوشی را استخراج کرده ایم. طیف انرژی اتمهای میوندار در زمانهای مختلف نیز محاسبه و به صورت نمودار ارائه شد. در این مقاله با توجه به این که در هر مرحله، انرژی اتم میوندار محاسبه می گردد و از سطوح مقطع

نکته اشاره کرد که با توجه به نسبت سطوح مقطع در این ناحیه انرژی [۱۴]، احتمال انتقال ایزوتوپی بیشتر است و به همین دلیل طیف انرژی $d\mu$ نیز به سمت مقادیر کمتر انرژی سوق پیدا کرده است. شایان ذکر است که اطلاعات مربوط به طیف زمانی نوترونها برای آزمایشگر در آشکارسازی نوترونهای همجوشی راهنمای مفیدی خواهد بود.

قدردانی

بدین وسیله از معاونت محترم پژوهشی دانشگاه صنعتی اصفهان که این تحقیق با حمایت ایشان انجام شده است تشکر و قدردانی می‌شود.

متوسط برخوردهای مختلف اتمهای میوندار، مثل برخوردهای کشسان و انتقال ایزوتوپی میون (شکلهای ۷ و ۸) فقط از روش شبیه‌سازی مونت کارلو قابل محاسبه است. نشان دادیم که نقش چسبندگی میون در کاهش بهره بسیار مهمتر از نقش واپاشی میونهاست (شکل ۵).

مشاهده شد که اثرات فوق‌حرارتی فقط در چند نانو ثانیه اول مهم هستند و طیف انرژی اتمهای میوندار سریعاً به طیف ماکسولی نزدیک می‌شود. البته طیف انرژی مقداری به سمت انرژیهای کم سوق پیدا می‌کند. دلیل آن مصرف اتمهای میوندار فوق‌حرارتی $t\mu$ در تشکیل مولکول $dt\mu$ است که نسبت حضور اتمهای میوندار در این ناحیه انرژی را در محیط کمتر می‌کند. در مورد طیف انرژی اتمهای $d\mu$ نیز می‌توان به این

مراجع

1. P Froelich, *Adv. Phys.* **41** (1992)405.
2. C Petitjean, *Nucl. Phys. A* **543** (1992) 79c.
3. P Ackerbauer et al., *Nucl. Phys. A* **652** (1999) 311.
4. S Z Kalantari, *Hyperfine Interactions*, **128** (2000)481.
5. M R Eskandari et al., *Iranian Journal of Sci. & Tech. A* **25** (2001) 355.
6. J S Cohen, *Phys. Rev. A*, **34** (1986)2719.
7. M Jeitler et al., *Phys. Rev. A* **51** (1995)2881.
8. S Z Kalantari and V Tahani, *Hyperfine Interactions*, **142** (2002)627.
9. M P Faifman and L I Ponomarev, *Phys. Lett. B* **265** (1991) 201.
10. V E Markushin, *Phys. Rev. A* **50** (1994) 1137.
11. V E Markushin, *Hyperfine Interactions*, **119** (1999) 11-21.
12. L N Bogdanova et al., *JETP* **56** (1982)931.
13. V Bystritsky et al., *Eur. Phys. J. D.* **54** (1999)185.
14. A Adamczak, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **62** (1996)255.
15. S Cohen, *Phys. Rev. A* **43** (1991)3460; **43** (1991) 4668; **44** (1991) 2836.
16. L I Ponomarev, *Contemp. Phys.* **31**(1990)219.
17. W Czaplinski et al., *Phys. Rev. A* **50** (1994) 518 and 525.
18. V R Bom, et al., *Hyperfine Interactions*, **138** (2001)213.
19. S E Jones et al., *Phys. Rev. Lett.* **56** (1986)588.
20. S Z Kalantari and M Sohani, *Int. J. Mod. Phys. E* **11**(2002)539