

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



Ц840а
И-498

7 - 7226

В.И.Илющенко, В.И.Кочкин

УЗ72/2-73

ПРОГРАММА НА ЯЗЫКЕ ФОРТРАН
ДЛЯ РЕШЕНИЯ ПРЯМОЙ ЗАДАЧИ ИОНИЗАЦИИ
И РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ ДЛЯ ЭЛЕМЕНТОВ
С $Z = 6-10$

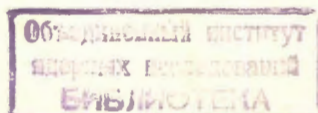
1973

ЛАБОРАТОРИЯ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

7 - 7226

В.И.Илющенко, В.И.Кочкин

ПРОГРАММА НА ЯЗЫКЕ ФОРТРАН
ДЛЯ РЕШЕНИЯ ПРЯМОЙ ЗАДАЧИ ИОНИЗАЦИИ
И РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛЕНИЙ ДЛЯ ЭЛЕМЕНТОВ
С $Z = 6-10$



Илющенко В.И., Кочкин В.И.

7-7226*

Программа на языке ФОРТРАН для решения прямой задачи ионизации и результаты вычислений для элементов с $Z=8-10$

Для решения прямой задачи последовательной ионизации, т.е. определения концентраций многозарядных ионов $q_i = q_i(t)$, где i - зарядность и t - время, разработана программа на языке ФОРТРАН "MOWGLI". Прямая задача решена при следующих начальных условиях:
 $q_0(0) = 1$, $\sum_{i=0} q_i(0) = 1$ для элементов от углерода до неона включительно.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований
Дубна, 1973

Введение

При разработке источника многозарядных ионов типа ИЭЛ [1] большое значение имеет оптимальный выбор его рабочих параметров: энергии первичных электронов E_e , плотности тока первичных электронов j_e , времени ионизации τ_i , режима инжекции и режима экстракции ионов. Инжекция и экстракция атомов и ионов рабочего вещества могут осуществляться импульсно и непрерывно.

Прямая задача ионизации заключается в том, чтобы, исходя из заданных выше параметров и расчетных сечений ионизации и потерь, определить спектр разрядностей в виде распределения концентраций многозарядных ионов $q_i = q_i(t)$ или $q_i = q(i)$, $i = \text{const}$, где q_i - доля или концентрация ионов с зарядностью i и t - время. Обратная задача ионизации заключается в определении сечений ионизации σ_i и сечений потерь σ_e из экспериментальных спектров $q_i = q_i(t)$.

Анализ экспериментальных данных показывает, что в пространстве ионизации ИЭЛ имеются ионы рабочего вещества, ионы остаточного газа /фон/, первичные быстрые электроны, быстрые вторичные электроны из области электронного коллектора и медленные вторичные электроны, возникающие в результате процесса ионизации.

Модели ионизации

Основными процессами ионизации являются: последовательная ионизация, ступенчатая ионизация и оже-ионизация электронным ударом, потери же возникают в основном под действием объемной рекомбинации и перезарядки.

В дальнейшем мы предполагаем, что последовательная ионизация заключается в удалении одного атомного электрона при однократном соударении первичного электрона с атомом или ионом мишени, причем вероятность процесса характеризуется $\sigma_{i \rightarrow i+1} / 2$.

Ступенчатая ионизация происходит при $E_e < E_i$, где E_i - потенциал ионизации. В процессе ступенчатой ионизации энергия атомного электрона повышается постепенно, и только после нескольких соударений происходит отрыв электрона. Эффективность ионизации увеличивается с ростом произведения $j_e \cdot \sigma_i$. Большую роль при этом играют метастабильные уровни с временами жизни $\tau > \tau_0$, где τ_0 - время жизни относительно дипольного электрического перехода $\approx 10^{-9}$ сек/.

Оже-ионизация и процесс "стригивания" внешних электронов в результате резкого изменения эффективного заряда ядра имеют место при выбивании атомных электронов из внутренних $n\ell$ -подоболочек. При каскадной оже-ионизации зарядность иона-продукта равна числу $n\ell$ -подоболочек, пересекаемых вылетающим атомным электроном. При радиационной оже-ионизации зарядность иона после одного соударения увеличивается на +1.

Модель ионизации МИ-1 характеризуется тем, что в предположении импульсной инжекции рабочего вещества $Q_0 = const$, где Q_0 - число атомов, инжектируемых за короткое время Δt в пространство ионизации/учитываются только парциальные вклады от одиночных внешних электронов. Процессами потерь мы пренебрегаем. Например, для азота с $N=7$ и электронной структурой $(1S)2(2S)2(2P)3$ сечения последовательной ионизации равны

$$\sigma_{0 \rightarrow 1} = 3 \cdot \sigma(E_1, 2P), \quad \sigma_{1 \rightarrow 2} = 2 \cdot \sigma(E_2, 2P),$$

$$\sigma_{2 \rightarrow 3} = 1 \cdot \sigma(E_3, 2P), \quad \sigma_{3 \rightarrow 4} = 2 \cdot \sigma(E_4, 2S),$$

$$\sigma_{4 \rightarrow 5} = 1 \cdot \sigma(E_5, 2S), \quad \sigma_{5 \rightarrow 6} = 2 \cdot \sigma(E_6, 1S), \quad \sigma_{6 \rightarrow 7} = 1 \cdot \sigma(E_7, 1S),$$

где E_{1-7} - ионизационные потенциалы. Модель не учитывает каскадную оже-ионизацию, радиационную оже-ионизацию и ступенчатую ионизацию.

В модели МИ-2 добавляется радиационная оже-ионизация, т.е. вклады в один акт ионизации от всех $n\ell$ -подоболочек, как внешних, так и внутренних, у которых $E_i \leq E_e / 3$.

В модели МИ-3 учитывается каскадная оже-ионизация /4/.

Введение непрерывной инжекции $Q_0 / i = const$ и учет потерь (σ_e), а также режимов экстракции приводит к наиболее полной модели, которая для некоторых частных случаев реализована в работе /4/.

Обратная задача ионизации решена в настоящее время только для наиболее простого случая равновесной плазмы, когда $dq_i / dt = 0$ /5/.

Ниже описана программа на языке ФОРТРАН для расчетов прямой задачи ионизации по моделям МИ-1 и МИ-2. Вычисления выполнены в рамках программы "MOWGLI".

Генерация электронной структуры

При расчете спектров последовательной ионизации в качестве исходных параметров вводятся E_e, j_e и расчетные сечения σ_i . В свою очередь, для нахождения σ_i необходимо определить соответствующий набор потенциалов ионизации E_i ионизируемого атома, который однозначно характеризуется атомным номером Z и электронной структурой. Электронная структура вводится с помощью подпрограммы GEN, а также оператором DATA. Для случая генерации структуры в соответствии с $n\ell$ -правилом заполнения вариант подпрограммы GEN приведен ниже. Так как при этом заполнение подоболочек происходит в последовательности $1S, 2S, 2P, 3S, 3P, 3D \dots 7P$, то правильная исходная структура получается только для элементов вплоть до $Z=18$ /аргон/. Структура остальных атомов с $Z=19-103$ вводится оператором DATA.

С другой стороны, предполагается, что распаковка электронной структуры при ионизации происходит точно в соответствии с обратным $n\ell$ -правилом заполнения.

Вычисление потенциалов ионизации

Расчет потенциалов ионизации осуществляется по модифицированному методу Слейтера /3/, который реализован в рамках подпрограммы *IP*, составными элементами которой являются подпрограммы *NS*, *NP*, *ND*, *NF*, *DEFIN* и *DEFI*. Первые четыре подпрограммы содержат описания процедур для нахождения постоянных экранирования S_{nl} и вкладов в величину ионизационного потенциала от *ns*-, *np*-, *nd*- и *nd*-подоболочек. *DEFIN* - это подпрограмма для определения N /главного квантового числа/ и L /дополнительного квантового числа/.

DEFI - подпрограмма для определения максимальной величины NL с ненулевым числом электронов, начиная с *7P*.

Расчет сечений ионизации

Вычисление сечений ионизации производится по формуле Бете:

$$\sigma_{i \rightarrow i+1} = \frac{\epsilon_i \cdot K}{E_e \cdot E_{i \rightarrow i+1}} \ln \frac{E_e}{E_{i \rightarrow i+1}}, \quad /1/$$

где ϵ_i - число эквивалентных электронов в данной nl -подоболочке, K - масштабный множитель.

В работе Шмидта и Бекера /6/ утверждается, что величина $K = 1,6282 \cdot 10^{-14}$ дает сечение в 10 раз меньше экспериментального. Этот вывод основан на результатах сравнения $\sigma_{0 \rightarrow 1}(Hg)$ и $\sigma_{0 \rightarrow 1}(Xe)$. Аналогичный вывод содержится неявным образом в работе Дарлинга и др. /4/.

Представляется более реалистичным значение $K = 4,5 \cdot 10^{-14}$ /8/, предложенное Лотцем, так как оно получено из сравнения гораздо большего количества экспериментальных данных с расчетными. Расчетная формула является элементом подпрограммы *LAPLAS*.

Необходимо сразу же отметить, что расчетные сечения являются заниженными, так как не учитывается фактор фокусировки кулоновским полем ядра

$$F = 1 + \frac{Z_{in} \cdot E_i^{1/2}}{E_e},$$

на который необходимо умножать сечение. Кроме этого,

не учтены процессы отрыва многих электронов в одном соударении, так как они не поддаются расчету /9/.

Подпрограмма *SIGM* производит суммирование парциальных сечений $\sigma_{i \rightarrow i+1}$.

Расчет спектров зарядностей

В предположении, что рабочее вещество с атомным номером Z инжектируется в виде 1 атома, спектры зарядностей в долях 1 определяются из решения системы кинематических уравнений следующего вида:

$$\dot{q}_i = j_e (\sigma_{i-1} q_{i-1} - \sigma_i q_i), \quad /2/$$

где q_i - доля ионов с зарядностью i при начальных условиях $q_0(0) = 1$, $\sum_{i=0}^Z q_i(0) = 1$.

Решение системы можно представить в виде:

$$q_1 = A_{11} \exp(-\lambda_1 t),$$

$$q_2 = A_{21} \exp(-\lambda_1 t) + A_{22} \exp(-\lambda_2 t),$$

$$q_k = A_{k1} \exp(-\lambda_1 t) + A_{k2} \exp(-\lambda_2 t) + \dots + A_{kk} \exp(-\lambda_k t)$$

с коэффициентами, которые определяются как

$$A_{ki} = A_{k-1} i \frac{\lambda_k - 1}{\lambda_k - \lambda_i} \quad \text{и} \quad q_k(0) = A_{k1} + A_{k2} + \dots + A_{kk}.$$

Результаты расчетов для элементов с $Z = 6 - 10$

Для $j\tau = 3 \cdot 10^{16} - 3 \cdot 10^{19}$ спектры зарядностей представлены на рис. 1-5. Сечения ионизации K -оболочки в обеих моделях, МИ-1 и МИ-2, получаются одинаковыми. Вероятно, их величины занижены по причинам, указанным

выше /см. также $1/2$ /. Тем не менее из полученных данных следует, что при $j\tau = 3 \cdot 10^{19}$ доля голых ядер достигает $q_i = 2,5 - 55\%$ при переходе от $Z=10$ к $Z=6$.

В заключение авторы считают своим приятным долгом выразить благодарность Е.Д.Донцу и Е.П.Жидкову за плодотворные дискуссии по затронутому вопросу.

Литература

1. Е.Д.Донец, В.И.Илющенко, В.А.Альперт. ОИЯИ, Р7-4124, Дубна, 1968.
2. Е.Д.Донец, В.И.Илющенко, В.А.Альперт. ОИЯИ, Р7-4469, Дубна, 1969.
3. В.И.Илющенко. ОИЯИ, 7-5560, Дубна, 1971.
4. R.L.Darling, D.L.McShan, R.H.Davis. RSI, 43, No. 3, 481-488 (1972).
5. T.Tauth. Nucl. Instr. & Meth., 107(2); 293-301 (1973).
6. W.Schmidt, R.Becker. GSI-Bericht, 71-3, s. 46-57 (1971).
7. J.D.Daugherty et al. Avco Everett Lab. Research Report. No. 333 (1969).
8. W.Lotz. Astrophys. J.Suppl., 14, 207 (1967).
9. M.R.H.Rudg . Rev.Mod.Phys., 40, No. 3; 564-590 (1969).

Рукопись поступила в издательский отдел
5 июня 1973 года.

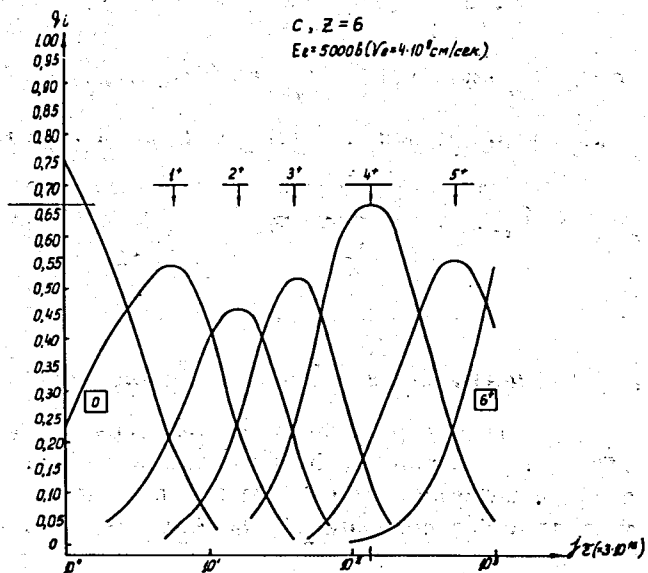


Рис. 1

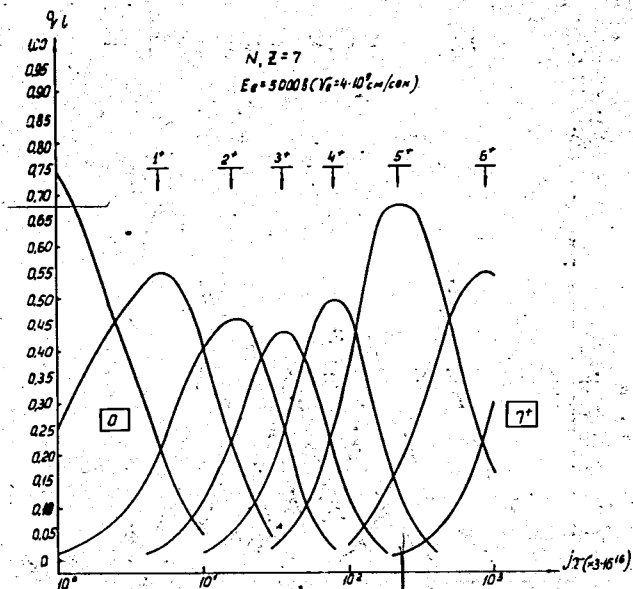


Рис. 2

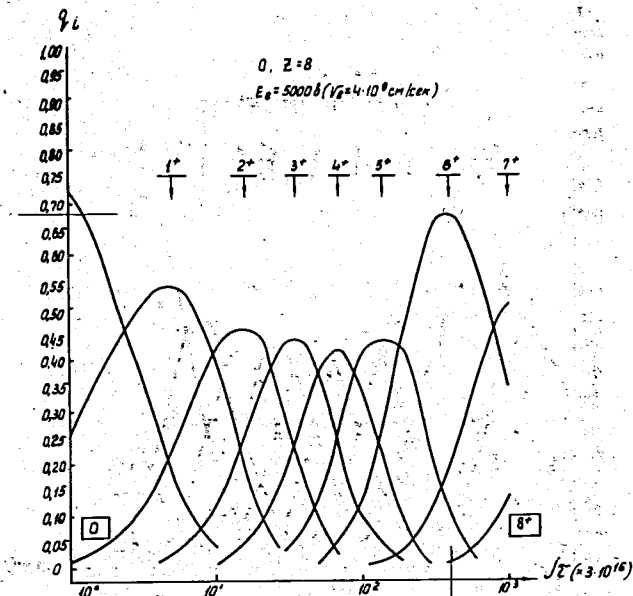


Рис. 3

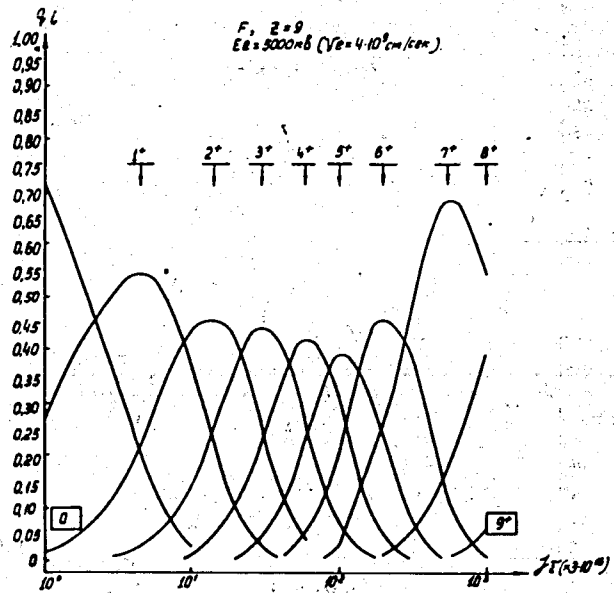


Рис. 4

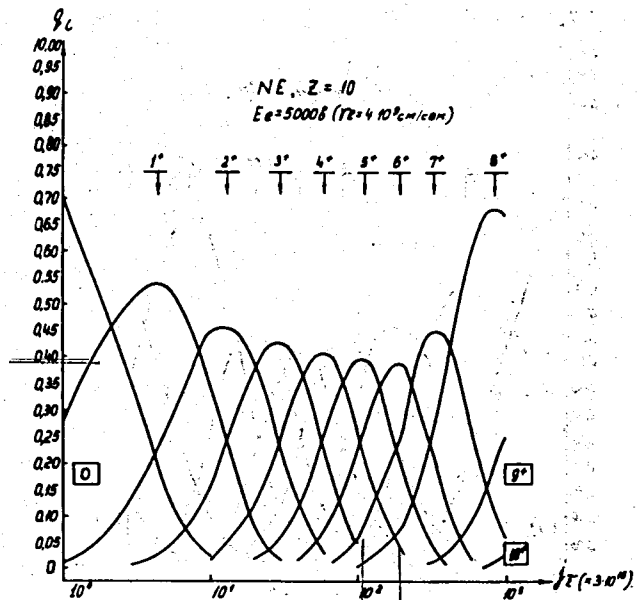


Рис. 5

Приложение

29.04.73

```

* O P I E A H
(ДВУХ), 07.04.73)
PROGRAM : HOUDEI
COMMON /VAR/ HA(5), AN(7)
COMMON /A/ SP(110), Z, NZ
COMMON /B/ Z(110), RZ(110)
COMMON /E/ EI, TI, TD, TK
E = 1000.
KA =
3 CONTINUE
PRINT S, I
9 FORMAT (2X, 3HEE#, P6"1)
Z = 4.
NZ = 4
1 K = 0
TI = 1.5 = 0.4
TD = 1.5 = 0.4
TK = 1.5 = 0.3
4 CONTINUE
CALL GEN
CALL LARLAS
TI = TI + 10.
TD = TD + 10.
TK = TK + 10.
K = K + 1
IF (K = 3) 6, 7, 7
7 CONTINUE
NZ = NZ + 1
Z = Z + 1.
IF (NZ = 10) 1, 1, 2
2 CONTINUE
KA = KA + 1
EI = EI + 1000.
IF (KA = 5) 3, 4, 4
4 CONTINUE
END

```

ВЫЗЫВАЕМЫЕ ФУНКЦИИ И ПОДПРОГРАММЫ

LARLAS GEN

```

:00001:00002:00004:00005:00011:00013:00015:00017:00021:00022:0002
:00047:00052:00056:00057:00061:00064:00070

```

25.04.73

```

* O P T P A H
(DVBHA, 07.04.73)
SUBROUTINE GEN
COMMON/VAR/NAIS(19),AN(7)
COMMON/A/EP5(110),Z,NZ
DIMENSION NAIS(19)
DATA(NAIS=2,3,6,2,6,10,2,6,10,14,2,6,10,19,2,6,10,2,6)
DO 20 K=1,19
NAIS(K)=0
20 CONTINUE
I=0
NSUM=0
DO 1 N=1,7
IF(N=3) 2,3,3
2 NN=N
GO TO 4
3 NN=9-N
4 DO 5 L=1,NN
I=I+1
NRES=NZ-NSUM
IF(NRES-NAIS(I)) 6,6,7
6 NAIS(I)=NRES
GO TO 12
7 NAIS(I)=NAIS(I)
NSUM=NSUM+NAIS(I)
5 CONTINUE
1 CONTINUE
12 PRINT 101,NZ
101 FORMAT(1X,2HZ=,13)
PRINT 100
100 FORMAT(2X,3H 15 25 35 45 55 65 75 85 95 105 ,
-20:5D-5F 6S 6P 6Q 7S 7P)
PRINT 102,NAIS
102 FORMAT(2X,19I3)
RETURN
END

```

:00001:00003 00005,00011:00013:00014:00016 00022 00024 00029:0003
00065 00073 00076:00112

25.04.73

```

* O P T P A H
(DVBHA, 07.04.73)
SUBROUTINE SIGM
COMMON/A/EP5(110),Z,NZ
COMMON/C/AL(110),SMN(110)
K=1
KM=1
4 SH=(K)=0
SMN(K)=SMN(K)+AL(KN)
DO 1 I=KN,NZ
IF(I=NZ+1) 6,7,7
6 IF(EP5(I)=1) 2,3,2
3 SMN(K)=SMN(K)+AL(I,1)
2 CONTINUE
7 CONTINUE
1 CONTINUE
KN=KN+1
KM=KM+1
IF(K=NZ+1) 4,5,5
5 CONTINUE
DO 110 I=1,NZ
PRINT 111,I,SMN(I)
111 FORMAT(2X,13,11HBIG LAMBDA=,E10.1)
110 CONTINUE
RETURN
END

```

:00001 00002 00003 00006 00011:00014 00021:00027:00034:00034:0003

25.06.73

```

* O P T E A H
(ДУВНА: 07.04.73)
SUBROUTINE LARLAS
COMMON/A/EP$(110),?NZ
COMMON/BB/IR(110),RZ(110)
COMMON/B/EI,II,TO,TK
COMMON/C/AL(110),SHN(110)
DIMENSION EXPL(110),Q(110)
DIMENSION A(52,105),R(105,52)
C ELECTRON FLUX CALCULATED
DO 201 I=1,52
DO 202 K=1,105
R(K,I)=0.
202 CONTINUE
201 CONTINUE
CALL IP
NNZ
DO 12 I=1,N
AL(I)=EP$(I)*(120./5.141593)*EI*(3./2.)/
*(R(1,RZ(I))+ALQC(2)/RZ(I))
12 CONTINUE
AL(N+1)=0.
CALL SIGN
DO 120 I=1,NZ
AL(I)=SHN(I)
120 CONTINUE
EF=0.8+0.9*EI*(3./2.)/(3.05.141593)
PRINT 300,EF
300 FORMAT(2X,10HEL PLUXAA=2=80 A=.E10.1)
A(111)=1.
K=2.
2 AK=D.
N=K.
DO 1 I=1,N
A(K,I)=A(K-1,I)+AL(K-1)/(AL(K)+AL(I))
AK=AK+A(K,I)
1 CONTINUE
A(K/K)=AK
K=K+.
IF(K=NZ) 2,2,3
3 CONTINUE
AK=1.
DO 4 I=1,NZ
A(NZ+1,I)=A(NZ,I)+AL(NZ)/(4-AL(I))
AK=AK+A(NZ+1,I)
4 CONTINUE
A(NZ+1,NZ+1)=AK
T=1
J=1
NNZ=1
DO 5 M=1,N
EXPL(M)=EXP4-AL(M).T
5 CONTINUE
K=1
7 Q(K)=0.
DO 8 I=1,K
Q(K)=A(K,I)*EXPL(I).Q(K)
8 CONTINUE
K=K+1
IF(K=NZ-1) 7,7,9
9 NNZ=1
DO 10 I=1,N
R(I,I)=R(I)
10 CONTINUE
J=J+1

```

```

I=T+TD
IF(T=TK) 6,6,11
11 CONTINUE
PRINT 22,T,TD,TK
22 FORMAT(2X,5MTIME=,SE12.2)
101 PRINT 101,((R(K,I),J),J=1,12),I=1,10)
101 FORMAT(2X,12E9.1)
111 PRINT 111
111 FORMAT(7X//)
END

```

ВЫЗЫВАЕМЫЕ ФУНКЦИИ И ПОДПРОГРАММЫ

EXP	SIGN	ALOG	IP
:00001:00004:00007	00011	00016	00023
:00023:00123:00130	00141	00174	00151
:00232:00236:00240	00243	00247	00256
	00272	00265	00272
	00274	00274	00274
	00032	00032	00032
	00054	00054	00054
	00162	00162	00162
	00161	00156	00161
	00162	00162	00162
	00274	00274	00274

```

* O P T E A H
(ДВВМА, 07.04.73)
SUBROUTINE IP
COMMON/A/EPS(110),Z,NZ
COMMON/BEG/ZR(110),RZ(110)
COMMON/VAR/NAIS(10),AW(7)
DATA(AW=1.,2.,3.,3.7,4.3,4.2,4.3)
DO 1 I=1,110
ZR(I)=0.
RZ(I)=0.
1 CONTINUE
DO 10 K=1,NZ
CALL DEFI(IMAX)
EPS(K)=NAIS(IMAX)
INN=IMAX
RES=0.
DO 11 L=1,1-AX
CALL DEFIN(INN,NA,NT)
N=NA
IF(NI-1) 13,12,13
12 CALL NS(Z,N,INN,SUM)
GO TO 19
13 IF(NI-2) 15,14,15
14 CALL NP(Z,N,INN,SUM)
GO TO 19
15 IF(NI-3) 17,16,17
16 CALL ND(Z,N,INN,SUM)
GO TO 19
17 IF(NI-4) 11,10,11
18 CALL NP(Z,N,INN,SUM)
19 RES=RES+SUM
INN=INN-1
11 CONTINUE
ZR(K)=RES
NAIS(IMAX)=NAIS(IMAX)-1
10 CONTINUE
DO 22 I=1,NZ
RZ(I)=ZR(I)-ZR(I)+1,
22 CONTINUE
DO 23 I=1,11
RZ(I)=RZ(I)*13.6
23 CONTINUE
SM=0.
DO 24 I=1,NZ
SM=SM+RZ(I)
24 CONTINUE
DO 11 I=1,NZ
PRINT 102,I,RZ(I)
102 FORMAT(2X,I6,E12.3)
101 CONTINUE
PRINT 104,SM
104 FORMAT(2X,6HSUMMA=,E12.3)
RETURN
END

```

ВЫЗОВАЕМЫЕ ФУНКЦИИ И ПОДПРОГРАММЫ

NP	ND	NP	NS	DEFIN
----	----	----	----	-------

```

:00001:00003 00005:00010 00013:00014:00021 00025:00027:00030:0003:
:00103 00101 00110 00117 00120 00122:00127 00131 00135 00142:0014:
:00205 00215 00227 00226

```