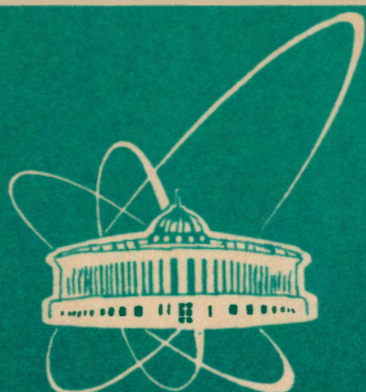


93-240



сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P9-93-240

Н.А.Токарева, Г.Д.Ширков

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ
В ESR-ИСТОЧНИКАХ
МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ

1993

1. ВВЕДЕНИЕ

ECR-источник ионов (ECRIS) представляет собой плазму, удерживаемую в открытой магнитной ловушке. Составляющие плазму электроны и ионы образуются в результате ионизации электронным ударом нейтральных атомов или молекул. Электроны, освободившиеся при ионизации, нагреваются высокочастотным полем и принимают участие в дальнейшей ионизации нейтралов и ионов, а ионы могут подвергаться последовательной ионизации до тех пор, пока они не будут потеряны из рабочей области источника. Зарядность ионов в ECRIS определяется плотностью электронной компоненты и временем жизни ионов в плазме.

Моделирование процессов, происходящих в ECR-источниках многозарядных ионов, выполнялось многими авторами [1-9]. При этом, как правило, рассматривались установившиеся физические процессы. В этом случае [4-6] расчет зарядового распределения ионов выполнялся решением нелинейных алгебраических уравнений баланса ионных зарядностей в плазме. В [7-9] соответствующая математическая модель описывалась системой нелинейных дифференциальных уравнений, а в [9] рассматривался импульсный режим работы ECR-источника. В настоящей работе эта модель развивается с учетом нарушения условия зарядовой нейтральности плазмы. Обсуждается применение известных математических методов для интегрирования полученной системы уравнений. На основании численных экспериментов предложен приближенный метод для рассматриваемой задачи.

2. УРАВНЕНИЯ БАЛАНСА

В общем случае процессы образования и перехода ионов из зарядности в зарядность описываются системой нелинейных дифференциальных уравнений баланса для всех ионных компонент:

$$\frac{dn}{dt} = S - n v_0 - n_0 \left(\sum_{i=2}^{\infty} \sigma_i^{ex} n_i v_i + \sum_{i=3}^{\infty} \sigma_i^{2ex} n_i v_i + (\sigma_1^1 + \sigma_1^{21}) n_0 v_0 \right),$$

$$\frac{dn_1}{dt^1} = n_0(\sigma_1^1 v_{\bullet} n_{\bullet} + \sigma_2^{ex} n_2 v_2 + \sigma_3^{2ex} n_3 v_3 + \sum_{i=2}^Z \sigma_1^{ex} n_1 v_1) -$$

$$- n_1(\sigma_2^1 v_{\bullet} n_{\bullet} + \sigma_2^{2i} v_{\bullet} n_{\bullet} + 1/\tau_1),$$

$$\frac{dn_2}{dt^2} = n_0(\sigma_1^{2i} v_{\bullet} n_{\bullet} + \sum_{i=3}^Z \sigma_1^{2ex} n_1 v_1) + n_1 \sigma_2^1 v_{\bullet} n_{\bullet} +$$

$$+ (\sigma_3^{ex} n_3 v_3 + \sigma_4^{2ex} n_4 v_4) n_0 -$$

$$- n_2((\sigma_3^1 + \sigma_3^{2i}) v_{\bullet} n_{\bullet} + (\sigma_2^{ex} + \sigma_2^{2ex}) v_2 n_0 + 1/\tau_2),$$

$$\frac{dn_i}{dt^i} = \sigma_1^i v_{\bullet} n_{\bullet} n_{i-1} + \sigma_2^{2i} v_{\bullet} n_{\bullet} n_{i-2} + (\sigma_{i+1}^{ex} n_{i+1} v_{i+1} +$$

$$+ \sigma_{i+2}^{2ex} n_{i+2} v_{i+2}) n_0 - n_i((\sigma_1^{ex} + \sigma_1^{2ex}) v_1 n_0 +$$

$$+ (\sigma_{i+1}^1 + \sigma_{i+2}^{2i}) v_{\bullet} n_{\bullet} + 1/\tau_i), \quad 3 \leq i \leq Z-2, \quad (1)$$

$$\frac{dn_{z-1}}{dt^{z-1}} = (\sigma_{z-1}^1 n_{z-2} + \sigma_{z-2}^{2i} n_{z-3}) v_{\bullet} n_{\bullet} + \sigma_z^{ex} n_z v_z n_0 -$$

$$- n_{z-1}(\sigma_z^1 v_{\bullet} n_{\bullet} + (\sigma_{z-1}^{ex} + \sigma_{z-1}^{2ex}) v_{z-1} n_0 + 1/\tau_{z-1}),$$

$$\frac{dn_z}{dt^z} = (\sigma_z^1 n_{z-1} + \sigma_{z-1}^{2i} n_{z-2}) v_{\bullet} n_{\bullet} - n_z((\sigma_z^{ex} + \sigma_z^{2ex}) v_z n_0 + 1/\tau_z).$$

Здесь: S и V - боковая поверхность и объем плазмы; n - плотность нейтралов вне плазмы; n_0, n_1 - плотности нейтралов и ионов i -й зарядности в плазме; n_{\bullet} - плотность электронов; v_0, v_1 и v_{\bullet} - средние скорости нейтралов, ионов и электронов соответственно; σ_1^1 и σ_1^{2i} - сечения одно- и двукратной ионизации; σ_1^{ex} и σ_1^{2ex} - сечения одно- и двукратной перезарядки; τ_1 - время жизни ионов в рабочей области источника; z - максимальная зарядность ионов.

Система (1) учитывает процессы одно- и двукратной ионизации, перезарядки, другие столкновительные процессы. Определение сечений ионизации и перезарядки, времени удержания ионов и электронов, температуры ионов, а также

плотности ионного тока на выходе из источника подробно рассмотрено в [4,9], где приведены соответствующие формулы.

3. УЧЕТ НАРУШЕНИЯ УСЛОВИЯ ЗАРЯДОВОЙ НЕЙТРАЛЬНОСТИ ПЛАЗМЫ

В предыдущих работах по расчету зарядовых распределений ионов в ECRIS предполагалось равномерное распределение по объему всех компонент в плазме, а потенциал плазмы определялся из условия равенства ионного и электронного тока из источника:

$$\sum_{i=1}^{\infty} i n_i / \tau_i = n_e / \tau_e, \quad (2)$$

где τ_e - время удержания электронов.

Условие (2) в стационарном случае приводило к условию нейтральности плазмы в источнике, которое в предположении о равномерной плотности частиц соответствует равенству:

$$\sum_{i=1}^{\infty} i n_i = n_e. \quad (3)$$

Однако отрицательный потенциал в центре в целом нейтральной плазмы может существовать только при существенном отличии пространственного распределения электронной и ионной компонент. Причем для отрицательного значения потенциала в центре рабочей области источника необходимо концентрирование электронов в центре, а ионов на периферии источника. Но при существовании отрицательного потенциала ионы будут совершать свое движение в центре источника, и их плотность там должна быть выше. Это противоречие показывает, что для существования отрицательного потенциала при движении ионов преимущественно в центре источника плазма не может быть полностью нейтральной, а должна иметь хотя бы небольшой отрицательный заряд. В этом случае потенциал плазмы будет определяться её зарядом или фактором нейтрализации:

$$f = \left(\sum_{i=1}^{\infty} i n_i - n_e \right) / n_e. \quad (4)$$

Для рабочей области источника цилиндрической формы длиной

1 и радиусом R глубина потенциальной ямы по оси источника может быть определена выражением :

$$U = \frac{\pi}{2} m c^2 r_0 n_0 R^2 f (1 + 2 \ln \frac{1}{R}), \quad (5)$$

где c - скорость света, а r_0 - классический радиус электрона. Необходимо отметить, что, устранив противоречие предыдущих моделей, мы тем не менее сохранили предположение о том, что плотности электронов и ионов, независимо друг от друга, распределены равномерно по объему плазмы.

Исключив из рассмотрения условие (3), мы должны для замкнутости системы уравнений дополнить задачу уравнением для определения плотности электронов. Наиболее естественно это сделать, используя уравнение баланса для электронной компоненты:

$$\frac{dn_0}{dt} = \left(\sum_{i=1}^z \sigma_1^i n_{i-1} + 2 \sum_{i=1}^{z-1} \sigma_1^{2i} n_{i-1} \right) n_0 v_0 - n_0 / \tau_0. \quad (6)$$

Здесь, аналогично (1), учтены образование электронов в результате одно- и двукратной ионизации нейтралов и ионов, а также потери электронов из источника.

Для решения системы дифференциальных уравнений баланса (1), (6) необходимы начальные условия. В предположении, что в начальный момент все ионы имеют минимальную зарядность, начальные условия могут быть выбраны, например, в следующем виде:

$$n_0 = n_0^0, \quad n_1 = n_0 = n_0^0, \quad n_i = 0, \quad i=2, \dots, z. \quad (7)$$

Таким образом, мы приходим к полной задаче Коши.

4. МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ИМПУЛЬСНОГО РЕЖИМА РАБОТЫ ECRIS

Импульсный режим работы ECRIS широко используется для значительного увеличения выхода многозарядных ионов. В импульсном режиме работы ECRIS происходит периодическое выключение ВЧ-нагрева электронной компоненты. При остывании электронов интенсивность их столкновений с ионами и между собой возрастает, они чаще попадают в конус потерь и теряются из источника. Уменьшение числа электронов вызывает нарушение зарядового баланса в плазме и исчезновение удерживающих ионы

отрицательного потенциала. Накопленные ионы перестают удерживаться и вылетают из источника. Это приводит к значительному увеличению выхода многозарядных ионов из источника. Длительность импульса многозарядных ионов зависит от скорости потерь остывающих электронов и определяется временем жизни электронов в магнитной ловушке, которое обычно составляет около 1 мс. После включения ВЧ-нагрева электронов вновь происходит образование и накопление в потенциальной яме ионов высоких зарядностей. Частота повторения отдельных импульсов при работе ECRIS в импульсном режиме определяется временем выхода всех параметров источника на стационар после каждого нового включения ВЧ-нагрева. Обычно оно равно нескольким десяткам миллисекунд. Зарядовое распределение импульса ионного тока на выходе из источника будет соответствовать тому распределению, которое имели ионы внутри ловушки, и для его определения может быть использована система уравнений баланса для всех компонент плазмы.

Таким образом, математическое моделирование импульсного режима работы ECRIS с учетом нарушения условия зарядовой нейтральности плазмы сводится к решению задачи Коши для системы нелинейных дифференциальных уравнений (1), (6) с начальными условиями (7). Включение в систему (1) уравнения (6) еще более увеличивает ее нелинейность и требует специального исследования для выбора численного метода интегрирования.

При выборе метода приближенного решения мы пытались удовлетворить следующим требованиям:

- решение с требуемой точностью должно быть получено с возможно меньшими вычислительными затратами, связанными, в основном, с вычислением правых частей уравнений на каждом шаге интегрирования;

- шаг интегрирования должен изменяться в процессе интегрирования и соответствовать характерному времени развития физического процесса.

Были рассмотрены широко распространенные методы Рунге-Кутты, многшаговые методы Адамса и схемы типа "прогноз-коррекция".

При использовании одношаговых методов последовательно вычисляются приближения к значениям точного решения на основе

известного приближения на предыдущем шаге. Для многошаговых методов решение на очередном шаге определяется через значения решения в нескольких предшествующих точках.

Обсудим далее применение этих методов к решению нашей задачи с точки зрения сформулированных требований.

Для вычисления решения по методу Рунге-Кутты четвертого порядка точности требуется четыре вычисления значений правых частей уравнений системы на каждом шаге интегрирования, что при малом шаге приводит к большим вычислительным затратам. Однако формулы Рунге-Кутты очень хорошо приспособлены для интегрирования с переменным шагом, так как они позволяют легко менять шаг интегрирования и при этом не требуют никаких дополнительных вычислений. Этим они выгодно отличаются от других методов.

Для проведения расчетов по методу Адамса четвертого порядка точности на каждом шаге интегрирования значения правых частей вычисляются только один раз, а в расчетные формулы входят значения правых частей в четырех предшествующих точках. Следовательно, можно ожидать получения решения с меньшими вычислительными затратами. Отметим также, что из теории вычислительных методов известно о сильной устойчивости метода Адамса при выполнении определенных ограничений на величину шага интегрирования и функции в правых частях уравнений. Успешно конкурируя с методом Рунге-Кутты в плане затрачиваемой вычислительной работы, метод Адамса теряет часть своих преимуществ при необходимости изменять шаг интегрирования в процессе вычислений, так как это требует дополнительного пересчета значений в предшествующих точках с новым шагом.

Вычислительные схемы методов прогноз-коррекция позволяют получить решение с помощью какого-либо одношагового метода, а затем уточнить решение с помощью итерационного процесса до получения требуемой точности. Эти методы могут оказаться полезными, если необходимая точность достигается за приемлемое число итераций и при этом не требуется очень малой величины шага интегрирования.

Аналитическая проверка условий устойчивости и сходимости указанных методов для нашей задачи не представляется возможной. Для определения наиболее подходящего метода

вычислений были проведены экспериментальные расчеты по интегрированию системы (1), (6). Выяснилось, что для сходимости итераций в методе прогноз-коррекция величина шага интегрирования должна иметь очень малое значение, что в результате не дает выигрыша в объеме вычислительной работы. Решение задачи по методу Адамса также привело к необходимости выбирать мелкий шаг интегрирования, чтобы обеспечить выполнение условия устойчивости, которое гарантирует ограниченность распространения локальных ошибок. При этом величина шага, необходимая для проведения вычислений, на порядок меньше, чем в методе Рунге-Кутты.

Поскольку для нашей задачи необходимость изменять шаг в процессе интегрирования, подстраивая его к реальному развитию физического процесса, очень существенна, а ожидаемого выигрыша в объеме вычислительных затрат метод Адамса не даёт, то более приемлемым в данном случае оказался метод Рунге-Кутты.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Вычисления проводились для импульсного режима работы ECRIS с размерами $l=24$ см, $d=7$ см, с начальной плотностью электронов $n_0=2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ для аргона и $n_0=10^{12} \text{ см}^{-3}$ для криптона, что приблизительно соответствует параметрам ECR-источника типа MINIMAFIOS [10].

При вычислениях предполагалось, что после выключения ВЧ-нагрева энергия электронов определяется скоростью потерь электронов и изменяется как:

$$n_0(dT_0/dt) = T_0(dn_0/dt) = -T_0 n_0 / \tau_0 .$$

Начальное значение $T_0 = 5000$ эВ.

До получения стационарного процесса в источнике интегрирование проводилось с постоянным шагом $h=2 \cdot 10^{-5}$ с. При расчете для импульсного режима интегрирование велось с переменным шагом. Величина каждого следующего шага интегрирования пересчитывалась в зависимости от значения τ_0 , так как характерное время длительности импульса ионного тока определяется скоростью потерь электронов и имеет величину, близкую к времени жизни электронов в источнике.

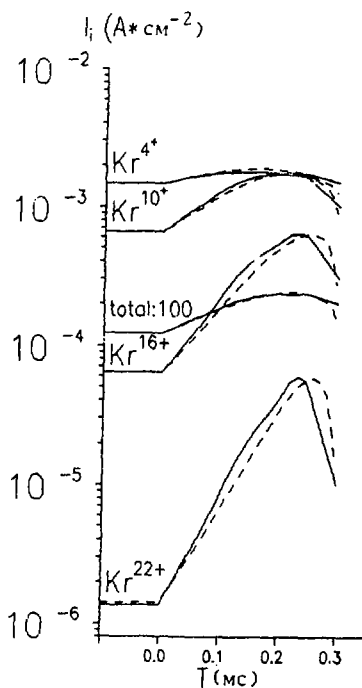


Рис. 1.

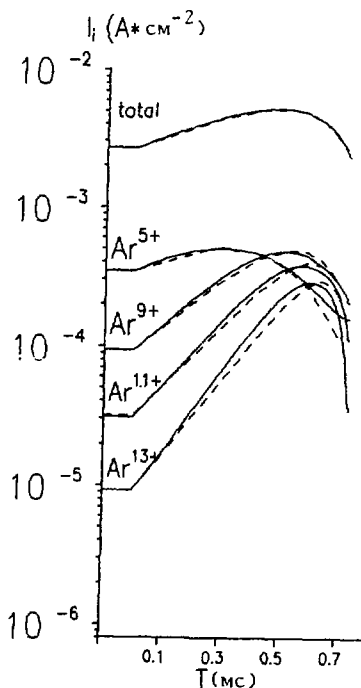


Рис. 2.

Расчетная временная зависимость для плотности тока ионов Kr^{4+} , Kr^{10+} , Kr^{16+} , Kr^{22+} (рис.1) и Ar^{5+} , Ar^{9+} , Ar^{11+} , Ar^{13+} (рис.2) и суммарная плотность тока всех зарядностей в импульсном режиме работы для ECRIS

Численные эксперименты, проведенные для ионов азота, аргона и криптона, показали, что этот шаг не может быть больше величины $h = \tau_e / 100000$. В расчетах эта величина изменялась от $3 \cdot 10^{-9}$ с до $9 \cdot 10^{-10}$ с.

На рис. 1 представлена расчетная временная зависимость для плотности тока ионов Kr^{4+} , Kr^{10+} , Kr^{16+} , Kr^{22+} и суммарной плотности тока всех зарядностей криптона в импульсном режиме работы для ECRIS. На рис. 2 аналогичная зависимость показана для ионов аргона Ar^{5+} , Ar^{9+} , Ar^{11+} , Ar^{13+} . Для сравнения штриховой линией приведены результаты расчетов, проведенных в [9].

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Общим недостатком всех существующих расчетов по ионизации плазмы в ECR-источниках ионов является предположение о равномерном распределении заряженных частиц в объеме источника. Наличие отрицательного потенциала в ECR-плазме при учете реального пространственного и энергетического распределения компонент плазмы должно приводить к некоторому нарушению в целом зарядовой нейтральности плазмы. Несомненно, решение полной самосогласованной задачи о состоянии плазмы в источнике—задача очень непростая. Построение математической модели процесса образования и накопления ионов, позволяющей учитывать нарушения зарядовой нейтральности плазмы,—первый шаг в этом направлении.

Таким образом, предложенная модель более соответствует реально происходящим физическим процессам, но имеет более сложную математическую постановку задачи. Поиск рационального численного метода для решения этой проблемы составил основную цель настоящей работы.

Наибольший интерес для проверки модели представляют динамические режимы работы ECRIS. Тестовые расчеты проводились для импульсного режима работы источника. Хорошее согласие настоящих расчетов с расчетами [9] доказывает правильность выбранной методики. Предполагается развитие рассмотренной модели для описания других процессов, позволяющих увеличивать выход многозарядных ионов в ECRIS, например, одновременного использования ионного охлаждения и импульсного режима работы источника.

ЛИТЕРАТУРА

1. Y.Jongen, LC 8001, Univer.Catholique de Lonvain (Belgium), 1980.
2. H.I.West,Jr., UCRL-53391, Lawrence Livermore National Laboratory, California, 1982.
3. Г.А. Ширков, препринт ОИЯИ Р9-89-600, Дубна, 1989.
4. Г.А. Ширков, препринт ОИЯИ Р9-90-581, Дубна, 1990; ЖТФ, т. 62, 1992, с. 94

5. G.D.Shirkov, C.Muhle, G.Musiol and G.Zschornack, NIM, A302 (1991) p.1.

6. V.B.Kutner and G.D.Shirkov, in: Atomic Physics of Highly Charged Ions (Proc. of 5th Int. Conf. on the Phys. of Highly Charged Ions) Springer-Verlag, Berlin, 1991, p.323.

7. G.Shirkov, I.Steinert, G.Zschornack; in: Proc. of 12 Arbeitsbericht Arbeitsgruppe Energiereiche Atomare Stosse, Riezlern, Germany, 1991, p.125.

8. I.Steinert, G.Shirkov, G.Zschornack; preprint TU Dresden NM-İKAP-03-1991; Nucl. Instrum. Methods A314, 1992, p.602.

9. G.Shirkov, preprint JINR E9-92-33, Dubna, 1992; Nucl. Instr. & Methods A322, pp.161-165, 1992.

10. R. Jeller, in: Proc. of Int. Conf. on the Physics of Multiple Charged Ions, Grenoble, France, 1988. Journal de Physique, C1, 50, VI. h. C1-887, 1989

Рукопись поступила в издательский отдел
29 июня 1993 года.