离子引出的二维 PIC-MCC 模拟*

熊家贵 王德武

(清华大学工程物理系 北京 100084) (2000年6月12日收到)

为探索用于原子蒸气激光同位素分离(AVLIS)的简单有效的离子引出方法,用二维 particle-in-cell with Monte Carlo collision(PIC-MCC)模拟比较了多种方法:平行板电场法,II型电极法,改进 M型电极法,radio frequency(RF) 共振法.模拟发现,磁场为零时的 RF 共振法不论从离子引出时间还是从碰撞损失率看都是几种方法中最好的;其 次是改进 M型电极法.II型电极法的模拟结果与2维电子平衡流体模型的结果相差悬殊.RF 共振法在有无磁场的 不同条件下,有着相当大的差别.磁场为零时,模拟中出现了强烈的共振;而在弱磁场条件下,模拟中没有发现明显的共振现象.这个结果与弱磁场条件下1维的 PIC 模拟中相当强的共振完全不同.就实际应用来看,磁场为零条件下的 RF 共振法和改进 M型电极法各有优缺点,需要综合考虑.

关键词:离子引出,原子蒸气激光同位素分离,PIC-MCC PACC:5265,5225F,5235

1 引 言

离子引出是原子蒸气激光同位素分离(AVLIS) 系统的重要组成部分.大功率电子枪轰击金属熔化 形成原子蒸气被激光选择性电离,产生的目标同位 素离子被离子引出系统快速低损耗地引出收集.为 达到离子快速低损耗引出的目标,已经有很多种离 子引出方法,比如平行板电场法,交替偏压平行板电 场法^[1]线状阳极对称电场法^[2],II型电极法^[3],M 型电极法^[4],radio frequency(FR)共振法^[5]等.同 时,各种实验的、理论解析的和计算机模拟的研究方 法被广泛用来对以上各种离子引出方法进行分析评 估.

本文采用 2D3V(位置空间 2 维,速度空间 3 维)的 particle-in-cell with Monte Carlo collision(PIC-MCC)方法^{6,7}对几种离子引出方法进行计算机模拟分析,同时将模拟结果与 2 维电子平衡流体模型数值计算的结果⁸¹进行了比较.

2 离子引出系统和 PIC – MCC 模拟 方法

2.1 离子引出系统

图 1 为几种离子引出系统的示意图. 平行板电 场法中,左右极板加上不同的电压,离子在静电场的 作用下,主要从右极板引出收集. II 型电极法中,左 右极板加上负电压,而上极板(又作为尾料收集板) 接地,离子对称地从左右极板引出收集. 改进 M 型 电极法中,左右极板的中间加上一个电极,以提高等 离子体的电位,加快离子从左右极板的引出收集. RF 共振法中,加在左右极板之间的电压为高频的 交流电压,调节其频率,使等离子体在其中发生鞘 层 - 等离子体共振(sheath-plasma resonance),以加 速离子的引出收集.

在 RF 共振法中,等离子体与电极板之间的鞘 层等效为电容 C_s ;而等离子体则等效为并联的电容 C_p 和电感 L_p ,再与电容 C_s 串联.等效电容和电感 分别为

$$C_{\rm s} = \varepsilon_0 \frac{A}{d-p} , \quad C_{\rm p} = \varepsilon_0 \frac{A}{p} ,$$
$$L_{\rm p} = \frac{p}{\varepsilon_0 A (\omega_{\rm pe}^2 + \omega_{\rm pi}^2)} , \quad (1)$$

^{*} 国家'九五'科技攻关项目(批准号 96-A18-01-02)资助的课题.



图 1 离子引出系统示意图 (a)为平行板电场法(b)为 Ⅱ型电极法(c)为改进 M型电极法(d)为 RF 共振法

其中 , ω_{pe} 为电子等离子体频率 , ω_{pi} 为离子等离子体 频率 ,d 为极板间距 ,p 为等离子体在 x 方向的宽 度.整个引出系统的等效阻抗

$$Z = (j\omega C_{s})^{-1} + (j\omega C_{p} + \frac{1}{j\omega L_{p}})^{-1}.$$
 (2)

调节 RF 源的频率,使整个电路发生串联共振,这时 电路的阻抗为零,等离子体中的 RF 电流成为最大 值,因此有望实现离子的快速引出.

在外磁场 B 为 0 时,通过等离子体的介电常量 公式^[9]

$$\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} = 1 - \frac{\omega_{\rm pe}^2}{\omega^2} - \frac{\omega_{\rm pi}^2}{\omega^2}$$
(3)

和串联共振条件 ,并且考虑到 ω_{pi}≪ω_{pe} ,可得共振频 率^[10]

$$\omega_{\rm r} = \omega_{\rm pe} \sqrt{\frac{d-p}{d}} , \qquad (4)$$

f_r=ω_r/2π通常在 100 MHz 量级.

在外磁场 B(z 方向)不为零的条件下,通过磁场条件下低温等离子体的介电常量公式⁵]

$$\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} = 1 - \cos^2 \varphi \, \frac{\omega_{\rm pe}^2}{\omega^2 - \omega_{\rm ce}^2} - \sin^2 \varphi \, \frac{\omega_{\rm pe}^2}{\omega^2} - \frac{\omega_{\rm pi}^2}{\omega^2} \, (5)$$

和串联共振条件,并且考虑到 $\omega_{pi} \ll \omega_{pe}$,可以求得共振频率 ω_{h} 和 $\omega_{pi}^{[5]}$

$$\frac{\omega_{\rm h\, J}^2}{\omega_{\rm ce}^2} = \frac{1}{2} (1 + \eta) \pm \sqrt{\frac{1}{4} (1 + \eta)^2 - \eta \sin^2 \varphi} , \qquad (6)$$

其中

$$\eta = rac{\omega_{
m pe}^2}{\omega_{
m ce}^2} rac{d-p}{d}$$
 ($\eta > 0$),

 $\varphi = \arctan(p/L)$, (7) 式中 ω_{ce} 为电子回旋频率 ,*L* 为极板在 z 方向的长 度 , φ 为磁场方向与 RF 共振方向之间的角度. ω_{h} 和 ω_{l} 分别为(6)式取正号和负号时的共振频率. $f_{h} = \omega_{h}/2\pi$ 在数值上与 f_{r} 相当 , $f_{l} = \omega_{l}/2\pi$ 通常为 10 MHz 量级. 随着离子的引出 ,等离子体的密度慢慢 降低,将会使 η 值减小,从而使共振的频率改变.从 (6)(7)式看出, ω_1 比 ω_h 对 η 的依赖要小得多, ω_h 随 η 减小而减小,而当 $\eta > 1$ 时,在离子引出过程 中, ω_1 几乎不变.值得注意,只有在磁场 B > 0时 ω_1 才存在.

2.2 PIC-MCC 模拟方法

PIC模拟(particle-in-cell simulation),又称 CIC 模拟(cloud-in-cell simulation),是模拟 Maxwell-Vlasov方程组描述系统演进的有效方法⁶¹.在空间 离散位置处(网格点)求得的场,通过插值到模拟粒 子所在位置而得到场作用到模拟粒子上的力;模拟 粒子的电荷和其运动产生的电流通过粒子的位置插 值到空间网格点而求得网格点上的场.上述两个过 程交替进行,就能很好地模拟无碰撞的带电粒子在 电磁场中的运动.

PIC-MCC 模拟是在 PIC 模拟的基础上增加了 带电粒子与中性粒子间的碰撞过程,而这个过程用 Monte Carlo 方法来模拟^[7].在一个时间步长 Δt 内, 第 *i* 个带电粒子与空间分布为 $n(x_i)$ 的中性粒子发 生碰撞的概率为

 $P_i = 1 - \exp[-\sigma(v_i)n_i(x_i)v_i\Delta t]$, (8) 其中 x_i 为第 i 个粒子所在的空间位置, v_i 为其速 度 $\sigma(v_i)$ 为第 i 个粒子可能发生的多种类型碰撞 的总碰撞截面.

如果一个在[0,1]上均匀分布的随机数 $R < P_i$,那么就认为第 i 个粒子在[t, $t + \Delta t$]的时间间隔内发生了一个碰撞,然后根据各种类型碰撞的碰撞截面及 $\sigma(v_i)$ 来决定碰撞的类型.上述过程需要在每个时间步上计算每个模拟粒子的 $\sigma(v_i)$ 和 P_i ,相当耗费计算量.当粒子在每个时间步长上的碰撞概率 P_i 很小的时候,采用零碰撞(null collision)技术^[11]来简化上述 MCC 的处理过程,能极大地减小计算量,提高计算效率.

等离子体中存在着多种粒子间的碰撞,如离子 与原子间的电荷交换,电子与原子间的碰撞电离,离 子与电子间的复合,以及带电粒子间的库仑 (Coulomb)碰撞等等.为了简化问题,并且就关心的 离子引出而言,离子与原子间的电荷交换是影响目 标同位素离子引出的最重要的碰撞类型,所以在模 拟中,只考虑电荷交换.电荷交换截面采用半经验公 式¹²]

 $\sigma = (a - b \log | v |)^{2} \times 10^{-16} \text{ cm}^{2}$, (9) 其中系数 *a*,*b* 主要由碰撞原子的电离能决定,在模 拟中取 *a* = 30,*b* = 3,*v* 为离子与原子相对速度(单 位为 cm·s⁻¹).

模拟采用的 2D3V 的 PIC-MCC 程序是在伯克 利(Berkeley)等离子体理论和模拟小组的 XPDP2 程序^[7]的基础上修改而成的.

3 模拟结果与分析讨论

3.1 模拟参量

等离子体和收集板的几何尺寸如图 2 所示,在 2 维模拟中,认为等离子体在 z 方向上无限均匀. $D_{px} \times D_{py}$ 为初始等离子体大小(设密度在空间均匀 分布),在电场作用下,离子被左右极板引出收集.平 行板电场法中,设左极板接地,右极板加上一个负高 压 U ;II 型电极法中,设上极板接地,左右极板加上 相同的负高压 U ;改进 M 型电极法中,设中间极板 和尾料板接地,左右极板加上相同的负高压 U ;RF 共振法中,左极板加振幅为 U 的高频交流电压,右 极板接地.如无特殊说明,在下面的模拟中,离子引 出系统的几何和物理参量取如下数值: $D_x = 2 \text{ cm}$, $D_y = 15$ cm , $D_{px} = 2$ cm , $D_{py} = 2$ cm , $X_0 = 1$ cm , $Y_0 = 6$ cm , $H_u = 3$ cm , $H_m = 1$ cm , $M_i = 3.93 \times 10^{-25}$ kg , $n_a = 1 \times 10^{19}$ m⁻³ , $kT_e = 1.0$ eV , $kT_i = 0.1$ eV ,目标同位素的丰度 C = 1% ,假设所有目标同位素全部被激光选择性电离 ,则等离子体初始密度为 $n_{i0} = n_a \times C = 1 \times 10^{17}$ m⁻³ ,外加电压幅值为 U = 1.0kV.



图 2 等离子体和收集版的几何尺寸

3.2 物理图象

图 3 为离子引出 50% 时不同的离子引出方法 所得到的不同电位分布图. 从图 3 中可以看出,在平 行板电场法中,电力线主要指向右极板,所以离子主 要向右极板运动,被右极板引出收集;而在 Π 型电 极法和改进 M 型电极法中,由于电压左右对称地施 加到电极板上,电力线的方向对称地指向左右极板. 图 3 中 RF 共振法是磁场为零,外加交流电压的相 位为 π/2 时的情况. 平行板电场法和改进 M 型电极 法的电位分布与 2 维电子平衡流体模型的数值计算 结果接近. 而 Π 型电极法的电位分布则与 2 维电子 平衡流体模型的计算结果有较大的差距^[8].



图 3 电位分布

图 4 为离子引出 50%时不同的离子引出方法 的离子速度矢量图.除平行板电场法中离子主要向 右极板运动外,其他三种方法的离子都是对称地从 左右极板引出. RF 共振法中,虽然电位分布随外加 电压的相位而变化,但由于离子惯性大,在一个极短 的电压变化周期中,离子速度在不同的相位之间并



图 4 速度矢量图

无显著的变化.

3.3 RF 方法

没有磁场的情况

在外部磁场为零的情况下,RF共振频率由(4) 式给出.由于在整个离子引出过程中,等离子体密度 和等离子体的宽度会随时间产生变化,所以共振频 率实际上也会产生变化.理想的情况是外加电压的 频率随等离子体的状况变化而变化,以使共振能够 在整个引出过程中持续. 但这要求能实时探测等离 子体的密度和宽度,以控制外加电源,这实际上是不 可能的. 为了简化引出系统,在模拟中使用了固定的 外加电压频率. 取 p = 0.9d, $n = n_{i0}$ 时的 f_r 值,为 898.0 MHz.

图 5 为离子数目为初始的 80% 时的电位分布, 可以看出在外加交流电压的相位为 – $\pi/2$ 和 $\pi/2$ 时 电场穿越了等离子体,电场的大小约为 $E = 80 \text{ kV} \cdot \text{m}^{-1}$.



图 5 外磁场为零时 ,RF 共振法一个周期内外加电压不同相位(a)(b)(c)时的电位分布 ;y=6cm 截面上,外加电压不同相位时的电位分布(d)

有磁场的情况

在外部磁场不为零的情况下,RF 共振频率由 (6)式给出.由于 f₁ 对等离子体的密度和等离子体 的宽度依赖较小,并且数值也较低,便于简化电源, 所以模拟中采用 f_1 ,取 B = 0.0050T, $\varphi = 5°$ 时的 值,即 $f_1 = 12.1$ MHz.

图 6 为离子数目为初始的 80 % 时的电位分布. 等离子体内没有电场穿越,实际上没有发生共振,这 个结果与磁场为零(图 5)时得到的结果是不同的, 也和1维的 PIC 模拟的结果^[13]不同.在 1D3V 的 PIC 模拟中,可以明显地看到电场随着外加电压相 位的变化周期的穿越等离子体,等离子体中的电场 最大时可达 100 kV·m⁻¹量级.



图 6 外磁场不为零时 ,RF 共振法一个周期内外加电压不同相位(a) (b) (c)时的电位分布 ;y = 6cm 截面上 ,外加 电压不同相位时的电位分布(d)

文献 14)分析了 1 维 PIC 模拟的结果,由于 *E* × *B* 漂移电子在y方向周期运动,极化漂移电子也 在x方向周期运动.电子在y方向的运动速度 v_y 可达 10⁶ m·s⁻¹量级,在x方向的运动速度 v_x 为 10⁴ m·s⁻¹量级.由于磁场较弱,离子回旋半径较大 (远大于极板间距),所以离子不会在y方向产生*E* × *B* 漂移.在 1 维的情况下,由于等离子体在y方向认为是无限均匀,所以电子在y方向上的漂移在 总体上不会产生电荷分离.2 维的情况就有所不同, 电子在y方向的漂移势必产生电荷分离,所以电子 在y方向的 $E \times B$ 漂移会被限制在离子附近,漂移 速度远小于 1 维的情况,以至于在模拟中观察不到明 显的周期变化电场穿越等离子体.实际的实验装置 比较接近 2 维的情况,所以在实验中测得的电场数



 3.4 离子引出时间和由电荷交换引起的碰撞损 失率

不同离子引出方法的引出效果如表 1 和表 2 所 示.在表 1 和表 2 中 , t_{10} 和 t_1 分别表示极板间离子 为初始离子数的 10% 和 1% 时所用的时间 ,与之相 对应 , s_{10} 和 s_1 表示两个不同时间目标同位素的碰 撞损失率 ; F_1 , F_u , F_r 分别为离子为 1% 时左极板 , 上极板 ,右极板的离子收集量.

表 1 不同方法的离子引出效果比较

方法	$t_{10}/\mu_{\rm s}$	s_{10}	t_1/μ_s	s_1	F_1	$F_{\rm u}$	$F_{\rm r}$
平行板	8.23	0.136	12.1	0.142	0.417	_	0.572
Ⅱ型	11.3	0.175	21.0	0.184	0.493	0.000	0.491
改进 M 型	4.83	0.104	6.71	0.112	0.489	0.011	0.489
RF 共振	1.10	0.074	1.99	0.082	0.494	_	0.494

注:RF 共振法中,外磁场为零,外加电压的频率 f=898.0 MHz.



(a)
 图 7 极板间离子数 S*(a)及引出离子流 Γ*(b)与时间 t 的关系

所有方法的离子引出时间 和 2 维电子平衡流 体模型的计算结果^[8]相比,都要小得多,这可能是 因为 PIC-MCC 模拟没有假设电子平衡而引起的. 尽管这两种模拟方法的结果在数值上有较大的差 异 但对于改进 M 型电极法和平行板电场法 两种 模拟方法所得的电位分布是相似的;这两种离子引 出方法的离子引出时间的相对值在两种模拟方法中 也是相当的.在 PIC-MCC 模拟中 改进 M 型电极法 的离子引出时间是平行板电场法的 55% ,而在电子 平衡流体模型中,这个比值为 58%,这表明改进 M 型电极法的离子引出效果确实比平行板电场法好得 多,对于∏型电极法,两种模拟方法存在着相当大 的差距:在 PIC-MCC 模拟中 Ⅱ型电极法的离子引 出时间是所有方法中最长的,而2维电子平衡流体 模型中 Ⅱ型电极法的离子引出时间与改进 M 型电 极法相当.可以认为 PIC-MCC 的结果更为可信,因 为 Ⅱ 型电极法中的上极板离等离子体的距离较远, 对等离子体的影响较小 从图 3 看出 等离子体的电 位与左右极板间的电位差是比较小的 离子引出实 际上主要靠双极扩散来完成,所以引出时间应该是 比较长的.对于平行板电场法,PIC-MCC模拟结果 显示有更多的离子被左极板引出收集。被左右极板 引出收集的离子分别占总数的 41.7% 和 57.2% 而 2 维电子平衡流体模型的结果表明被左右极板引出

收集的离子分别占总数的 32.3% 和 66.7%. PIC-MCC 模拟所得的等离子体区域的电位值由图 3 可 看出约为 100 多伏,比 2 维电子平衡流体模型几伏 的结果要高得多,所以在 PIC-MCC 模拟中有较多 的离子被左极板收集.

表 2 显示了 RF 共振法在不同条件下的离子引 出效果.这三种情况分别代表了没有磁场,弱磁场和 强磁场时,RF 共振法的离子引出效果.如前所述, 在弱磁场的条件下,RF 共振十分微弱以至 PIC-MCC 模拟观察不到,所以这时的离子引出时间相对 最长.在强磁场的条件下,离子也被磁化,在电场和 磁场作用下也会产生 y 方向上的 E × B 漂移,所以 不会出现弱磁场条件下电子的 E × B 漂移被固定 的离子所限制的情况,因而可以产生比弱磁场条件 下更大的共振,所以引出时间较短,但同样由于强磁 场使离子磁化,也限制了离子的快速引出.从表 2 和 图 8 看出,在强磁场条件下,离子数虽然很快(2.88 μs)就引出了 90%,但剩下的 10% 的引出却用了更 长的时间.

表 2 RF 共振法在不同条件下的离子引出效果比较

情况	B/T	φ /(°) <i>f</i> /MHz	$t_{10}/\mu s$	s_{10}	$t_1/\mu s$	s_1	F_1	$F_{\rm r}$
а	0	-	898.0	1.10	.074	1.99	.082	.494	.494
b	0.005	5	12.1	7.54	.131	11.2	.139	.494	.494
С	1.0	1	15.7	2.88	.093	7.86	.102	.493	.496



图 8 极板间离子数 S^* (a)及引出离子流 Γ^* (b)与时间的关系

4 结 论

本文用 2 维 PIC-MCC 模拟了几种不同的离子 引出方法.模拟结果显示,没有磁场时的 RF 共振法 不论从离子引出时间还是碰撞损失率看都是几种方 法中最好的.在几种静电场方法中,改进 M 型电极 法具有较短的引出时间和较低的碰撞损失率,这与 2 维电子平衡流体模型的结果是一致的. II 型电极 法的模拟结果则与 2 维电子平衡流体模型的结果相 差悬殊. RF 共振法在有无磁场的不同条件下,有着 相当大的差别.在弱磁场条件下,模拟中没有发现明 显的共振现象,这个结果与1维的 PIC 模拟中相当 强的共振完全不同.

就实际应用来看,磁场为零条件下的 RF 共振 法和改进 M 型电极法各有优缺点.磁场为零时的 RF 共振法虽然离子引出时间很短,但工作频率极 高,在模拟中接近 1 GHz,这对引出系统的电源和控 制系统提出了更高的要求;而改进 M 型电极法则相 对简单.

- [1] K. Yamada , T. Tetsuka J. Nucl. Sci. Technol. 31(4) 1994), 301.
- [2] K. Ogura ,T. Arisawa ,T. Shibata ,Japan J. Appl. Phys. ,Part 1 31(5A) 1992),1485.
- [3] K. Yamada, T. Tetsuka, Y. Deguchi, J. Appl. Phys., 69 (1991) 8064.
- [4] R. Nishio ,K. Yamada ,K. Suzuki et al. ,J. Nucl. Sci. Technol. 32 (3) 1995),180.
- [5] T. Matsui , K. Tsuchida , S. Tsuda , Phys. Plasma ,3(1996), 4367.
- [6] C. K. Birdsall, A. B. Langdon, Plasma Physics via Computer Simulation (McGraw-Hill Jnc. New York 1985).
- [7] C. K. Birdsall ,IEEE Trans. on Plasma Science ,19(2) (1991), 65.
- [8] J.G. Xiong, D.W. Wang, Journal of Tsinghua University (Science and Technology),40(2000) (to be published () in Chinese)[熊家贵、王德武,清华大学学报(自然科学版),40 (2000),待发表].

- [9] H.G. Booker, Waves in Cold Plasmas (Translator :Z. H. Liu, X. M. Liu) Science Press Beijing, 1985) in Chinese) [H.G.布 克 冷等离子体波,刘曾厚、刘选谋译(科学出版社,北京, 1985)].
- [10] V.P.T.Ku, B.A. Annaratone, J.E. Allen, J. Appl. Phys. ,84 (1998),6536.
- [11] V. Vahedi, M. Surendra, Comput. Phys. Commun., 87 (1995),179.
- [12] M. W. Grossman ,T A Shepp ,IEEE Trans. on Plasma Science , 19(1991),1114.
- [13] J.G. Xiong, D. W. Wang, Chinese Atomic Energy Science and Technology 34(4)(2000)(to be published)(in Chinese)[熊 家贵、王德武,原子能科学技术, 34(4)(2000),待发表].
- [14] T. Matsui, K. Tsuchida, S. Tsuda et al., Phys. Plasmas, 4 (1997), 3518.
- [15] T. Matsui, S. Tsuda, K. Tsuchida et al., Phys Plasmas, 4 (1997) 3527.

TWO-DIMENSIONAL PIC-MCC SIMULATION OF ION EXTRACTION*

XIONG JIA-GUI WANG DE-WU

(Department of Engineering Physics , Tsinghua University , Beijing 100084 , China)

(Received 12 June 2000)

Abstract

To explore more simple and efficient ion extraction methods used in atomic vapor laser isotope separation (AVLIS), two-dimensional (2D) PIC – MCC simulation code is used to simulate and compare several methods : parallel electrode method ,II type electrode method ,improved M type electrode method ,and radio frequency (RF) resonance method. The simulations show that ,the RF resonance method without magnetic field is the best among others ,then the improved M type electrode method is quite different from that calculated by 2D electron equilibrium model. The RF resonance method with or without magnetic field has guite different results. Strong resonance occurs in the simulation without magnetic field ,whereas no significant resonance occurs under weak magnetic field. And that is quite different from the strong resonance phenomena occurving in the 1D PIC simulation with weak magnetic field. As for practical applications ,the RF resonance method without magnetic field has pros and cons , compared with the M type electrode method.

Keywords : ion extraction , AVLIS , PIC-MCC PACC : 5265 , 5225F , 5235

 $^{^*}$ Project supported by the State Key Technology R & D Programme of China (Grant No. 96-A18-01-02).