

# 电子束离子阱中高价态离子演化过程的数值模拟

袁行球 陈重阳 李 辉 赵太泽 郭文康 须 平

(复旦大学现代物理研究所, 上海 200433)

(2002 年 3 月 31 日收到, 2002 年 6 月 28 日收到修改稿)

讨论了电子束离子阱(EBIT)中决定高价态离子演化过程的主要物理机制. 对 EBIT 中高价态离子的演化过程进行了详细的数值计算并与实验进行了比较. 讨论了 EBIT 各种不同的运行参数对平衡时高价态离子相对丰度和温度的影响.

关键词: 电子束离子阱, 高价态离子, 数值模拟

PACC: 3480D

## 1. 引言

电子束离子阱(EBIT)是利用受磁场高度压缩的高能电子束不断地电离离子(原子)来获得高价态离子(HCI). 高价态离子在 EBIT 中的静电势阱和强磁场的作用下能长时间、稳定地约束在 EBIT 中, 因此 EBIT 中可以产生和约束元素周期表中任何元素任何价态的高价态离子. 高价态离子在阱中的相对丰度由一套互相耦合的非线性电离平衡方程和能量平衡方程所决定<sup>[1]</sup>. 对决定高价态离子在 EBIT 中演化过程的参数进行详细研究, 既可以为 EBIT 的工程设计和实验选择参数, 同时也能对实验数据作进一步的处理.

美国劳伦斯利物摩国家实验室(LLNL)的 Penetrante<sup>[1]</sup>最早建立了一套 EBIT 中高价态离子演化过程的物理模型, 并且利用该物理模型计算了 Ar, Xe, Dy<sup>[2]</sup>的高价态离子在 EBIT 中的演化, 研究了 EBIT 的各种不同运行参数对高价态离子演化过程的影响. 随后, 在 Penetrante 工作的基础上, 英国牛津大学的 Margolis 对高价态离子在 EBIT 中的演化进行了详细的理论和实验研究<sup>[3]</sup>, 考虑了高能电子束的空间电荷积累效应对轴向势的修正, 同时对电离方程中的源项进行了修正. 利用该修正的物理模型计算了 Si, Ne 和 Pb 高价态离子的演化. 此外他还发展了一套求解该方程组的隐式算法, 这样大大减少了计算所用的机时. 在实验上, 利用光谱的方法详细地研究了 EBIT 中高价态离子的电离平衡. 然而上述物理模型的计算结果和实验之间还存在较大的误

差. 在文献 [1] 中, 为了与实验比较, 把轴向势由实验时的 100 V 换为计算时的 50 V, 电子束的电流也由 100 mA 变为了 75 mA.

本文在上述工作的基础上, 对文献 [1—3] 所用的物理模型作了以下几点修正: 1) 由于高价态离子在 EBIT 中的受强磁场的约束, 不考虑高价态离子的径向逃逸以及由此而带来的能量损失. 2) 考虑了 EBIT 中漂移管的几何位形、高能电子束的空间电荷积累效应以及由于电离而产生的二次电子和散射电子的累积对轴向势的修正. 3) 考虑电子束半径内不同位置电离时所具有的附加加热效果. 关于这几点修正, 我们在文献 [4] 中做了详细的讨论. 利用修正后的物理模型对 EBIT 中 Ar 离子的演化进行了详细的研究, 并与 LLNL 的实验结果进行了比较. 同时研究了 EBIT 的不同运行参数(如电子束电流强度、轴向势阱深度以及中性气体密度)对平衡时高价态离子的相对丰度和温度的影响. 结果表明, 上述修正对 EBIT 中平衡时高价态离子的相对丰度和温度有一定的影响.

## 2. EBIT 中的物理过程

图 1 是 EBIT 的核心部件漂移管的基本结构, 它由 3 个电极组成. 整个漂移管处于由超导亥姆赫兹线圈产生的均匀强磁场中, 磁场强度达到 3—5 T, 高能电子束在漂移管的轴线处射入(电子束能量一般在几千电子伏到几十万电子伏). 高价态离子在径向被强磁场和高能电子束产生的空间位阱约束, 轴向靠加在漂移管 3 个电极的不同电势而产生的轴向势

阱来约束.

高价态离子在阱中的电离平衡过程和能量平衡过程可以用以下互相耦合的非线性方程组来描写:

$$\begin{aligned} \frac{dN_i}{dt} &= R_{i-1 \rightarrow i}^{\text{ion}} N_{i-1} - (R_{i \rightarrow i+1}^{\text{ion}} \\ &\quad + R_{i \rightarrow i-1}^{\pi} + R_{i+1 \rightarrow i}^{\text{cx}}) N_i + (R_{i+1 \rightarrow i}^{\pi} \\ &\quad + R_{i+1 \rightarrow i}^{\text{cs}}) N_{i+1} - R_i^{\text{axesc}} + R_i^{\text{soc}}, \\ \frac{d(N_i k T_i)}{dt} &= \left[ \frac{d(N_i k T_i)}{dt} \right]^{\text{heat 1}} + \left[ \frac{d(N_i k T_i)}{dt} \right]^{\text{heat 2}} \\ &\quad + \sum_j \left[ \frac{d(N_i k T_i)}{dt} \right]_j^{\text{exch}} \\ &\quad - \left[ \frac{d(N_i k T_i)}{dt} \right]^{\text{axe}}, \end{aligned} \quad (1)$$

式中,  $N_i$  表示价态为  $i$  的离子的密度,  $R_{i \rightarrow i+1}^{\text{ion}}$  表示第  $i$  价离子电离到第  $i+1$  的有效电离率,  $R_{i+1 \rightarrow i}^{\pi}$  表示第  $i+1$  价离子电离俘获一个电子到第  $i$  价离子的有效辐射俘获率,  $R_{i+1 \rightarrow i}^{\text{cx}}$  是第  $i+1$  价离子和本底中性气体交换一个电子到第  $i$  价离子的电荷交换率, 这些项的具体表达式可以参见文献 [1]. 计算这些速率所需要的直接电离截面用 Lotz 经验公式<sup>[5,6]</sup>, 关于电子直接电离截面的计算可以参见文献 [7]. 辐射俘获截面的计算使用 Kim 和 Pratt 提出的经验公式<sup>[8]</sup>, 电荷交换截面的计算使用 Muller 和 Salzborn 经验公式<sup>[9]</sup>.

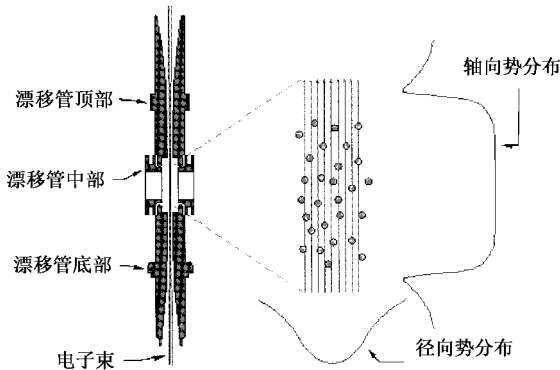


图 1 EBIT 结构示意图

$R_i^{\text{axesc}}$  是轴向逃逸项, 可以表示为<sup>[1]</sup>

$$R_i^{\text{axesc}} = -N_i \nu_i \left[ \frac{e^{-\omega_i}}{\omega_i} - \sqrt{\omega_i} (\text{erf}(\omega_i) - 1) \right], \quad (2)$$

式中  $\omega_i = \frac{q_i e V_w}{k T_i}$ ,  $\nu_i = \sum_j \nu_{ij}$  是离子和离子之间碰撞总的库仑碰撞频率. 与文献 [1,3] 不同的是, 我们在计算轴向势阱  $V_w$  的时候考虑了漂移管的几何位形、高能电子束的空间电荷累积效应以及由于电离而产

生的二次电子和散射电子在阱中的累积效果,  $R_i^{\text{soc}}$  是源项, 本计算中源项选取文献 [3] 的形式. 与文献 [1,3] 不同的是, 电离平衡方程不包括径向逃逸项.

能量平衡方程中,  $\left[ \frac{d(N_i k T_i)}{dt} \right]^{\text{heat 1}}$  表示由于库仑碰撞作用电子束和离子的能量交换率,  $\left[ \frac{d(N_i k T_i)}{dt} \right]_j^{\text{exch}}$  表示离子和离子之间由于库仑碰撞作用能量的交换率,  $\left[ \frac{d(N_i k T_i)}{dt} \right]^{\text{axe}}$  是由于粒子的轴向逃逸而产生的能量损失率, 这些项的具体表达式可以见文献 [3].

$\left[ \frac{d(N_i k T_i)}{dt} \right]^{\text{heat 2}}$  是由于高价态离子在不同位置电离时所具有的附加势能而引起的附加加热效果, 它可以表示为

$$\begin{aligned} &\left[ \frac{d(N_i k T_i)}{dt} \right]^{\text{heat 2}} \\ &= \int_0^{r_e} k j \sigma_{i \rightarrow i+1}^{\text{ion}} (r_e, r_i) \mathcal{V}(r_i) N_i e^{-z_i \mathcal{V}(r_i) / k T_i} dr_i \\ &\quad - \int_0^{r_e} [k j \sigma_{i+1 \rightarrow i}^{\pi} (r_e, r_{i+1}) \mathcal{V}(r_{i+1}) \\ &\quad \times N_{i+1} e^{-z_{i+1} \mathcal{V}(r_{i+1}) / k T_{i+1}}] dr_{i+1}. \end{aligned} \quad (3)$$

数值求解方程 (1), 可以得到 EBIT 中高价态离子密度和能量随时间的演化.

### 3. 参数研究以及与 LLNL 实验结果的比较

#### 3.1. 参数研究

##### 3.1.1. 电子束电流强度的影响

因为电离率和电子束电流密度成正比, 因此电流密度越大, 到达平衡电荷状态分布的时间也越短. 图 2、图 3 表示高价态离子的密度和温度与电子束电流密度的关系. 与文献 [1,3] 结果相似的是, 高价态离子的密度随电流密度的增加而减少, 而温度则随电子束电流密度的增加而增加. 这是因为高价态离子通过库仑碰撞从高能电子束获得的能量和电子束电流密度成正比, 高价态离子温度的增加使得它的逃逸速度大幅度增加, 而高价态离子的逃逸速度大于它的产生速度. 从图 3 可以看出, 价态低的离子温度几乎不增加甚至还有所减少, 这是因为考虑到电子束空间电荷的累积效果使得轴向势阱的深度随着电子束电流强度的增加而降低, 从而由低价态的离子的逃逸而带走的能量大于其通过库仑碰撞从高

能电子束获得的能量.

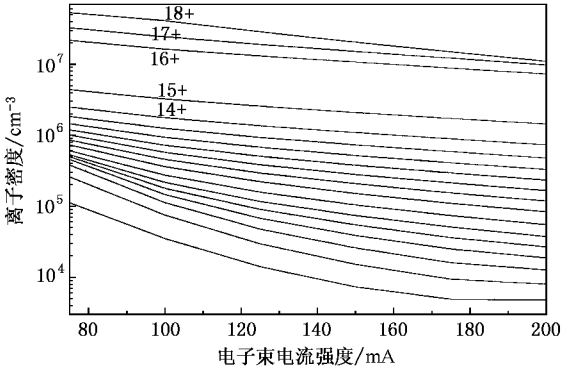


图 2 高价态 Ar 离子密度与电子束电流密度的关系( 计算参数 :  $E_e = 9 \text{ keV}$  ,  $B = 3 \text{ T}$  ,  $V_w = 100 \text{ V}$  ,  $N_0 = 2.0 \times 10^3 / \text{cm}^3$  )

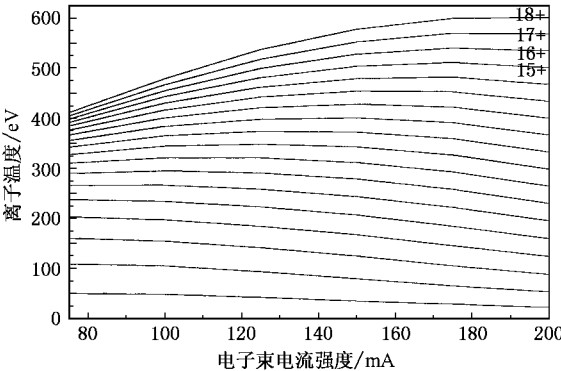


图 3 高价态 Ar 离子温度与电子束电流密度的关系( 计算参数 :  $E_e = 9 \text{ keV}$  ,  $B = 3 \text{ T}$  ,  $V_w = 100 \text{ V}$  ,  $N_0 = 2.0 \times 10^3 / \text{cm}^3$  )

3.1.2. 中性气体的影响

图 4、图 5 表示高价态离子的密度和温度与中性气体密度的关系. 计算结果表明, 中性气体的密度增加使得高价态离子的密度增加, 而温度则降低. 中性气体密度的增加使得高价态离子的密度增加, 从而使得离子之间的碰撞增加, 因此通过价态低的离子的逃逸而带走的能量增加. 同时, 随着中性气体密度的增加, 由于碰撞而产生的低能电子增加, 这样离子感受到的轴向势阱的深度降低, 也使得离子逃逸而带走的能量增加.

3.1.3. 轴向势阱深度的影响

EBIT 中轴向势阱主要有以下两个作用: 对于给定的离子温度, 轴向势阱越深, 高价态离子的速率越小, 然而轴向势阱越深, 高价态离子逃逸势阱所需要的能量越大, 因此高价态离子的温度越高.

图 6、图 7 表示高价态离子的密度和温度与轴向势阱深度的关系. 从图 6、图 7 可以看出, 轴向势

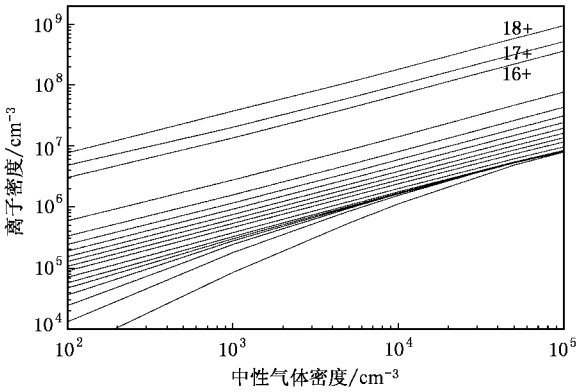


图 4 高价态 Ar 离子密度与中性气体密度的关系( 计算参数 :  $E_e = 9 \text{ keV}$  ,  $I = 100 \text{ mA}$  ,  $B = 3 \text{ T}$  ,  $V_w = 100 \text{ V}$  )

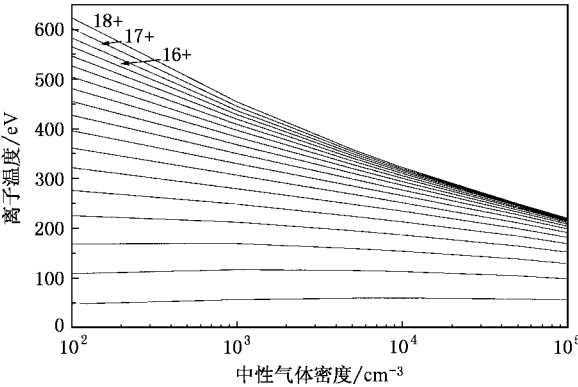


图 5 高价态 Ar 离子温度与中性气体密度的关系( 计算参数 :  $E_e = 9 \text{ keV}$  ,  $I = 100 \text{ mA}$  ,  $B = 3 \text{ T}$  ,  $V_w = 100 \text{ V}$  )

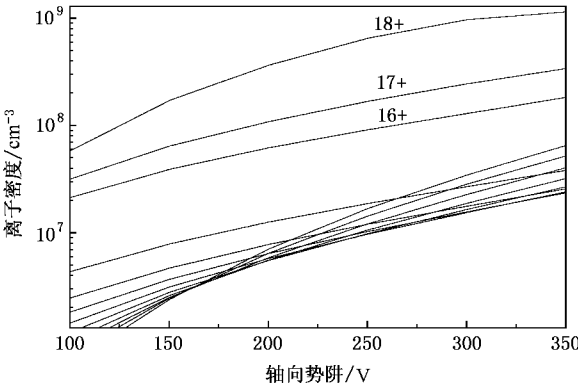


图 6 高价态 Ar 离子密度与轴向势阱深度的关系( 计算参数 :  $E_e = 9 \text{ keV}$  ,  $B = 3 \text{ T}$  ,  $I = 100 \text{ mA}$  ,  $N_0 = 2.0 \times 10^3 / \text{cm}^3$  )

阱越深, 高价态离子的密度和温度就越高. 离子的温度越高, 谱线的多普勒展宽越大, 这样就不利于光谱线的测量. 因此, 在实际运用中我们希望得到高密度低温度的高价态离子.

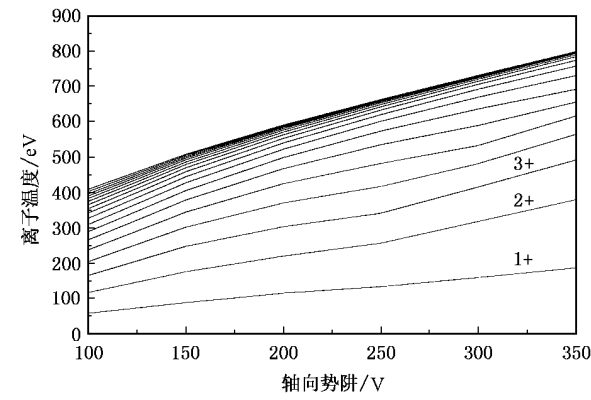


图 7 高价态 Ar 离子温度随轴向势阱深度的关系( 计算参数 : $E_e = 9 \text{ keV}$  , $B = 3 \text{ T}$  , $I = 100 \text{ mA}$  , $N_0 = 2.0 \times 10^3 / \text{cm}^3$  )

3.2 与 LLNL 实验结果的比较

严格而言 ,同一参数下的理论计算结果和实验结果才能进行比较 .然而 ,我们采用了经验公式来计算电离截面、辐射俘获截面和电荷交换截面 ,理论计算与真实值有较大的误差 ,电子束电流密度的测量也存在约 20% 的误差 ,还有实验中不可避免地存在杂质 .然而 ,更为重要的是 Penetrante 的物理模型<sup>[1]</sup> 还有许多因素没有被考虑 ,尽管 Margolis<sup>[2]</sup> 对它进行了修正 ,但还是有很多不完善的地方 .本工作的目的就是尽可能地考虑到所有影响平衡时高价态离子相对丰度分布的因素 ,使得在同一参数下的计算结果能够和实验结果一致 ,甚至能够预言实验 .

图 8、图 9 分别给出了 LLNL 的实验测量结果和我们的计算结果 ,两者大致上还是比较相符的 .与文献 [1] 相比 ,考虑到我们所做的几点修正后所用的计算参数更为合理 .

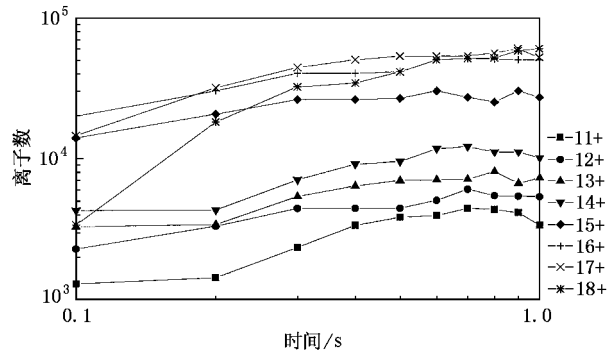


图 8 LLNL 实验测量得到的 Ar 离子随时间的演化( 实验参数 : $E_e = 9 \text{ keV}$  , $I = 100 \text{ mA}$  , $V_w = 100 \text{ V}$  , $B = 3 \text{ T}$  )

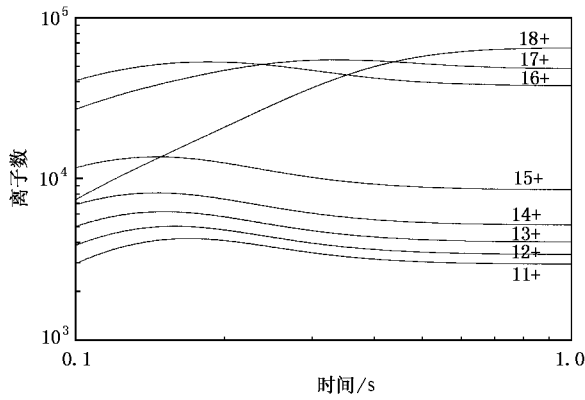


图 9 计算得到的 Ar 离子随时间的演化( 计算参数 : $E_e = 9 \text{ keV}$  , $I = 100 \text{ mA}$  , $V_w = 100 \text{ V}$  , $B = 3 \text{ T}$  )

温度、平衡时 Ar 离子的产生和消失有效速率以及能量的获得和损失的速率 .从图中可以看出 ,对于核电荷数比较低的 Ar 离子粒子数的平衡主要是直接电离和轴向逃逸之间的平衡 .

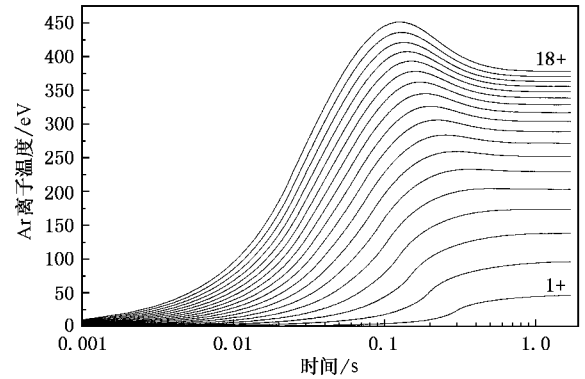


图 10 Ar 离子温度随时间的演化( 计算参数 : $E_e = 9 \text{ keV}$  , $I = 75 \text{ mA}$  , $V_w = 100 \text{ V}$  , $B = 3 \text{ T}$  )

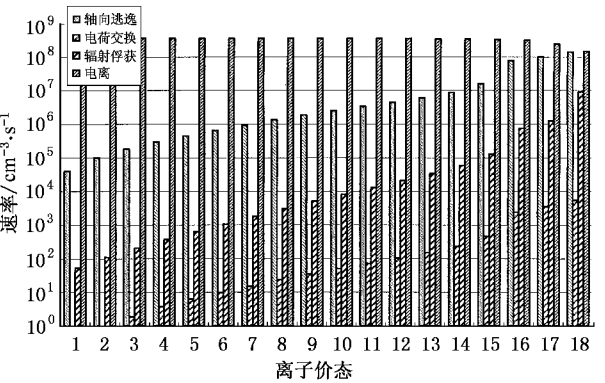


图 11 平衡时 Ar 离子的产生和消失速率的比较( 计算参数 : $E_e = 9 \text{ keV}$  , $I = 75 \text{ mA}$  , $V_w = 100 \text{ V}$  , $B = 3 \text{ T}$  )

图 10、图 11、图 12 分别表示相应的高价态离子

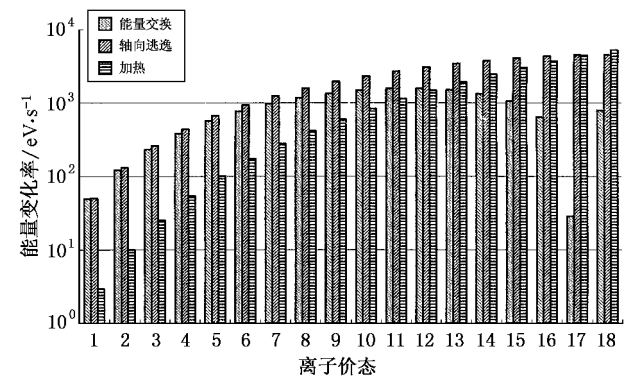


图 12 平衡时 Ar 离子能量的获得和损失速率的比较( 计算参数 : $E_e = 9\text{ keV}$  , $I = 75\text{ mA}$  , $V_w = 100\text{ V}$  , $B = 3\text{ T}$  )

4. 讨 论

从计算结果来看 ,我们提出的几点修正对平衡时高价态离子的相对丰度分布和温度有较大的影响 ,考虑了上述修正后的计算结果与实验测量结果比较相符 .对 EBIT 参数研究结果表明 ,EBIT 的不同运行参数对平衡时高价态离子的相对丰度影响很大 .因此 ,要获得相对丰度足够大的高价态离子来进行实验 ,对实验参数进行数值模拟显得极为重要 .对于核电荷数较低的 Ar 离子而言 ,决定平衡时相对丰度分布的主要因素是直接电离和轴向逃逸之间的平衡 .

感谢中路-玻尔奖学金、中国工程物理奖学金及三星奖学金对本课题的资助 .

[ 1 ]

Penetrante B M , Bardsley J N , De Witt D 1991 *Phys . Rev . A* **43** 4861

[ 2 ]

Penetrante B M , Bardsley J N , Levine M A 1991 *Phys . Rev . A* **43** 4873

[ 3 ]

Margolis H S 1994 *Ph . D . Thesis* ( Oxford :Pembroke College )

[ 4 ]

Yuan X Q , Guo W K , Chen C Y submitted to *J . Physical B*

[ 5 ]

Lotz W 1967 *Z . Phys .* **206** 205

[ 6 ]

Lotz W 1968 *Z . Phys .* **216** 241

[ 7 ]

Jia X F , Yang W 1998 *Acta Phys . Sin .* **47** 1783 [ in Chinese ] 贾祥福、杨 威 1998 *物理学报* **47** 1783 ]

[ 8 ]

Kim Y S , Pratt R H 1983 *Phys . Rev . A* **27** 2913

[ 9 ]

Muller A , Salzborn E 1977 *Phys . Lett . A* **62** 391

Numerical simulation of the evolution of highly charged ions in an electron-beam ion trap

Yuan Xing-Qiu    Chen Chong-Yang    Li Hui    Zhao Tai-Zhe    Guo Wen-Kang    Xu Ping  
( *Institute of Modern Physics , Fudan University , Shanghai 200433 ,China* )  
( Received 31 March 2002 ; revised manuscript received 28 June 2002 )

Abstract

The physical mechanism which determines the evolution of highly charged ions in an electron-beam ion trap is presented. The numerical simulation of the evolution of highly charged ions was performed , and the comparison of the result with experiments was carried out . Finally , parameter study was made .

**Keywords :** electron-beam ion trap , highly charged ions , numerical simulation  
**PACC :** 3480D