

负氢离子源中电子能量沉积三维数值模拟研究*

杨超[†] 刘大刚 刘腊群 夏蒙重 王辉辉 王小敏

(电子科技大学物理电子学院, 成都 610054)

(2011年11月4日收到; 2011年11月21日收到修改稿)

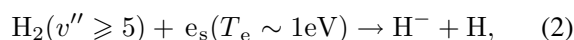
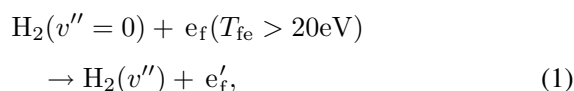
本文理论计算了多峰离子源永磁体, 采用二体碰撞模型 (binary collision) 处理电子之间的库仑碰撞, 采用空碰撞 (null-collision) 方法处理电子与氢元素相关粒子, 开发了全三维 PIC-MCC 模拟算法, 并利用该算法模拟了多峰离子源中电子沉积过程, 分析了多峰磁场对电子的空间和能量分布影响, 结果显示: 电子的非均匀分布起源于高能电子在引出区的 $B \times \nabla B$ 漂移.

关键词: 负氢离子源, 多峰磁场, 电子能量分布函数 (EEDF)

PACS: 52.65.Pp, 52.50.Dg

1 引言

目前, 基于全球 ITER 计划, 大量关于中性束注入 (NBI) 等离子体热核研究正在各国进行中. 由于负氢离子的中性化效率高, 因而备受国内外热核研究者的青睐 (如 Camembert III, JAERI 10 A)^[1-7]. 负氢离子源放电过程起源于电子沉积, 沉积过程包括电子的空间分布和能量分布两方面. 一方面, 由于负氢离子是由电子与氢分子碰撞而来, 因而电子的空间分布将影响负氢离子空间分布特性, 如果负氢离子空间分布不均匀, 将会影响离子束光学效应, 从而改变等离子体加热路径, 偏离预期目标. 因此, 分析电子的空间分布十分必要; 另一方面, 负氢离子的产生包括体积产生和表面产生过程, 其中, 体积产生过程如下^[8]:



其中, e_f 是初级快电子, e'_f 是次级快电子, e_s 是慢电子, T_{fe} 是初级快电子的温度, T_e 是慢电子的温

度. e_f 对于提高负离子的产生率起着重要作用, 即通过反应 (1) 产生高浓度的 $\text{H}_2(v'')$, 再通过反应 (2) 提高负离子产生率. 因此, 要提高负氢离子的产生率必须分析电子的能量分布情况.

基于以上两方面原因, 本文采用自主开发的全三维 PIC-MCC 软件, 对 JAERI 10 A 离子源放电过程中的电子沉积物理情景进行数值模拟研究, 为离子源开发奠定理论基础.

2 PIC-MCC 流程

在负氢离子源的模拟过程中, 影响粒子运动状态的因素包括: 粒子之间的碰撞和电磁场对其的洛伦兹力推动作用. 反过来带电粒子的运动也会影响电磁场. 在模拟时间步长较小的情况下能将两者分别处理. 鉴于此, 本文采用时间步进的方法, 在一个时间步长 Δt 内, 运用 Boris-Buneman^[1] 蛙跳网格方法, 利用时域有限差分 (FDTD) 方法求解带电粒子与电磁场之间相互作用, 利用蒙特卡罗方法处理粒子的碰撞, 总的处理流程图如图 1 所示^[9,10].

* 国家重点基础研究发展计划 (973) 项目 (批准号: 2007CB310401) 资助的课题.

[†] E-mail: ychao@uestc.edu.cn

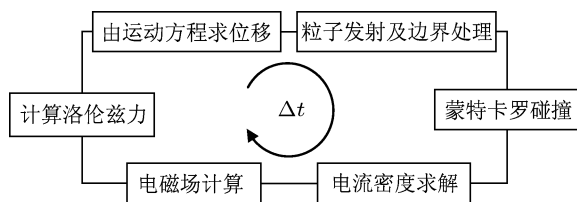


图1 PIC-MCC 模型流程图

3 碰撞与边界处理方法

电子与其他粒子碰撞具体处理方法: 首先计算 P_i , 比较 P_i 与均匀随机数的大小来决定是否发生碰撞, 碰撞发生后, 根据各反应类型的分概率大小 P_j 与另一个均匀随机数的大小关系, 以决定发生何种类型的反应, 根据各反应类型的碰撞动力学理论处理碰撞后粒子的速度变化, 以及旧粒子的消亡与新粒子的产生.

电子之间的库仑碰撞动力处理方法: 首先, 随机地选取粒子对, 并计算其相对速度 $u = v_i - v_j$; 然后, 计算质心系下散射角 χ 和散射角向角 Φ , $\tan \frac{\chi}{2}$ 遵循高斯分布且期望值为 0, 方差为 $\frac{n_e e^4 \ln \Lambda \Delta t}{8\pi \epsilon_0^2 m_e u^3}$, $\Phi = 2\pi R$ 且 R 为 $[0, 1]$ 之间的均匀随机数; 其次, 根据散射角计算相对速度的变化量; 最后, 计算每个粒子碰撞后的速度,

$$V_{sh} = (kT_e/2e) \ln[(1/2\pi) \cdot (m_{ion}/m_e)], \quad (3)$$

其中 V_{sh} 为等离子体势, m_{ion} 为离子质量, m_e 为电子质量, kT_e 为电子能量. 当电子接触边界时根据 (3) 计算边界势垒 [9], 若电子能量小于 V_{sh} 则发射, 大于则湮没.

4 永磁体计算

如图 2 所示的矩形永磁体, 其沿 Z 方向均匀磁化, X, Y, Z 三个方向的大小为 a, b, h , 由安培分子环流知, 永磁体外部空间某点的磁场由内部所有分子电流产生, 另外, 由于均匀磁化, 其内部分子电流互相抵消, 因此, 只需求解表面电流产生的磁场. 对于环路 $ABCD$, 若总电流为 I , 则与平行于 XOY 的任一平面的面电流密度为 $J = I/h$. 对于永磁体内某点 (x_0, y_0, z_0) , 讨论 $z_0 \rightarrow z_0 + dz_0$ 薄层内的

分子电流在外部任意点 $P(x, y, z)$ 产生的磁场, 其中, 环 $A'B'C'D'$ 的电流强度为 Jdz_0 , 产生的磁场为 dB , 则总场为

$$B = B_x i + B_y j + B_z k = \int_0^h (dB_x i + dB_y j + dB_z k), \quad (4)$$

其中, dB_x, dB_y, dB_z 分别为环 $A'B'C'D'$ 产生的 X, Y, Z 三个方向的磁场分量. 将环 $A'B'C'D'$ 拆成直线电流 $A'B', B'C', C'D'$ 和 $D'A'$, 运用毕奥 - 萨伐尔定律分别对此四条直线电流积分并求和, 再代入 (4) 式即可得磁体外任意点的磁场.

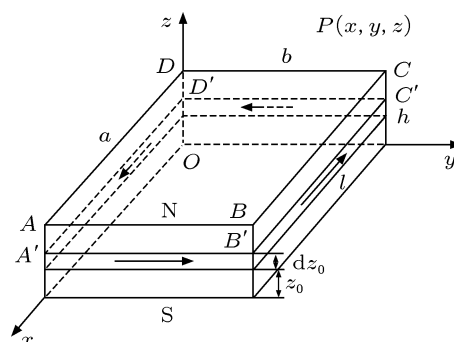


图2 单个磁体模型

5 数值模拟

5.1 模型描述及参数设置

图 3 是离子源模拟模型的结构图, 永磁体如图所示放置, 其中 XZ 平面磁场如图 4 所示, $-120 \text{ mm} < X < 120 \text{ mm}$, $-240 \text{ mm} < Y < 240 \text{ mm}$, $0 \text{ mm} < Z < 203 \text{ mm}$, 每隔 10^{-8} s 从 $X = 0, Y = 0, Z = 100 \text{ mm}$ 处发射 100 个宏粒子, 初始能量为 60 eV. PIC 中时间步长设为 10^{-10} s , 电子与中性粒子间碰撞以及电子之间的库仑碰撞时间步长都设为 10^{-8} s . 氢分子的温度设为 300 K, H_2^+ 数密度为 $1.0 \times 10^8 \text{ mm}^{-3}$, H_3^+ 数密度为 $5.0 \times 10^8 \text{ mm}^{-3}$, 氢原子与氢气分子粒子数之比为 10:1 [9], 电子与上述各粒子之间的反应类型如表 1 所示.

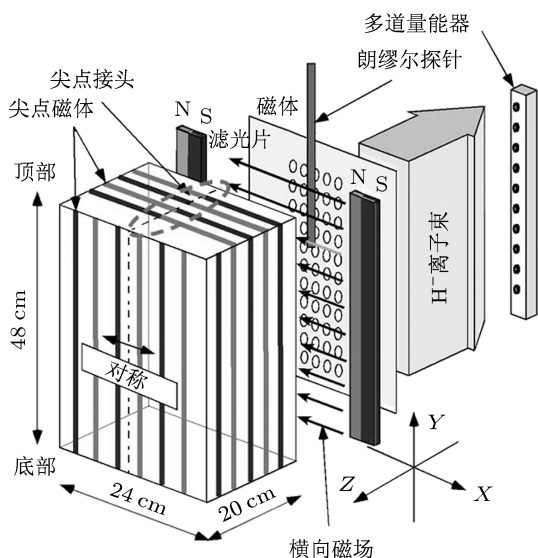


图3 JAERI 10 A 离子源模拟模型结构图

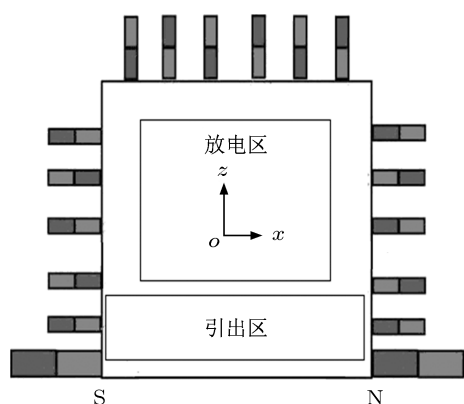


图4 XZ 平面磁体设置图

表1 模拟所考虑的反应类型

Index	反应类型	反应前	反应后
1	激发	$e + H(1s)$	$e + H^*(2p)$
2	电离	$e_1 + H(1s)$	$e_1 + e_2 + H^+$
3	振动激发	$e + H_2(v = 0)$	$e + H_2(v = 1)$
4	电子激发	$e + H_2(X^1\Sigma_g^+)$	$e + H_2^*(B^1\Sigma_u^+ 2p\Sigma)$
5	电子激发	$e + H_2(X^1\Sigma_g^+)$	$e + H_2^*(b^3\Sigma_u^+)$ $e + H_2^*(a^3\Sigma_g^+)$ $e + H_2^*(c^3\Pi_u^+)$
6	离解	$e + H_2(X^1\Sigma_g^+)$	$e + H(1s) + H^*(2s)$
7	电离	$e + H_2(X^1\Sigma_g^+)$	$e + H_2(v)^+ + e$
8	离解复合	$e + H_2^+(0 \leq v \leq 9)$	$H(1s) + H^*(n \geq 2)$
9	离解复合	$e + H_3^+$	$H + H + H$
10	弹性	$e + H_2$	$e + H_2$

5.2 模拟结果与分析

图5所示为电子的时间演化,从图5可知, 4×10^{-5} ns 时模拟到达稳态,且电子的数密度为 $6 \times 10^{17} \text{ m}^{-3}$. 图6为 $Y = 0$ 平面磁场分布图,由图6可知,电子在引出区存在 $B \times \nabla B$ 漂移,该漂移方向垂直纸面向外(即 $-Y$ 方向).

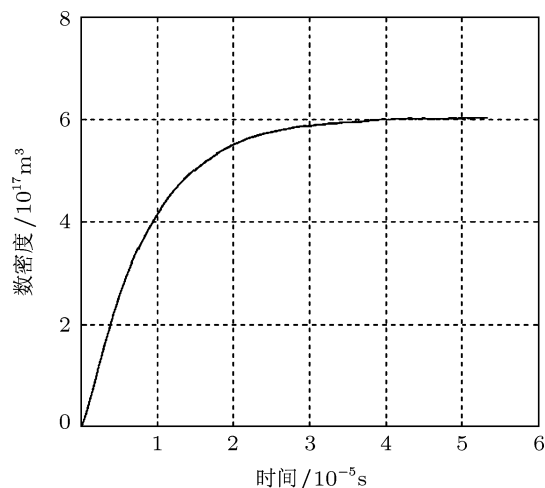


图5 电子数密度随时间演化图

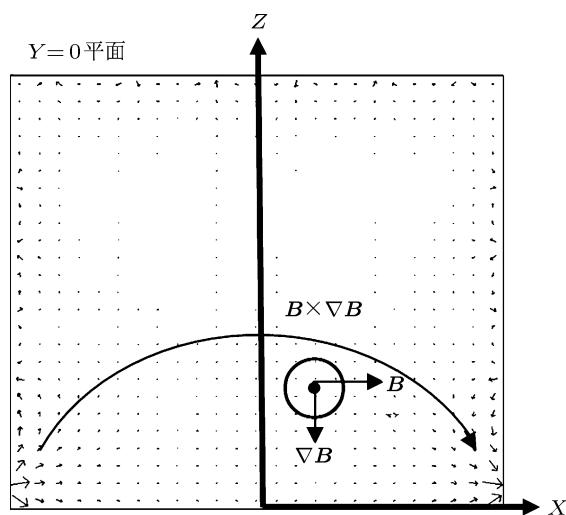


图6 XZ 平面磁场矢量图

准三维(即二维空间三维速度)模拟中无法同时得到 XZ 和 YZ 平面分布,只能观察其一,因此,既要分析 XZ 平面的多峰状磁场对电子的影响,又要推断磁漂移的方向,必需采用全三维(即三维空间三维速度)数值模拟. 本文是在三维 CHIPIC 软

件平台下, 开发的全三维 PIC-MCC 算法, 待程序运行到 5×10^{-5} ns 时, 得到离子源中电子的分布情况. 图 7 显示了 XZ 平面电子分布, 由图 7 可知电子的运动轨迹符合图 6 所示的磁场分布规律, 呈现了边缘多峰值状, 起到约束电子效果. 图 8 为电子在 YZ 平面的分布, 从图 8 可知电子呈现了 $-Y$ 漂移, 且引出区的漂移更突出, 表明了多峰磁场的分布决定了电子分布横向非均匀性.

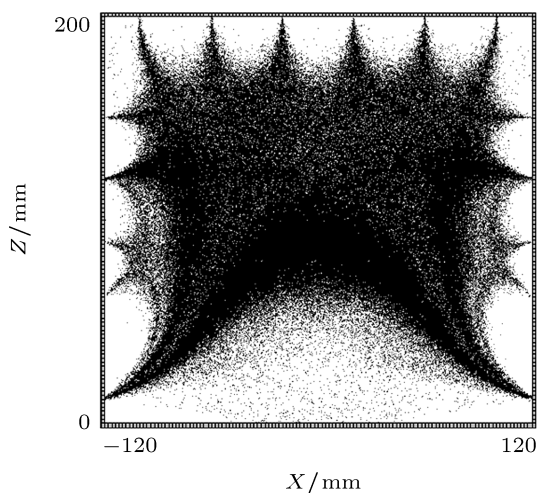


图 7 电子在 XZ 平面分布图

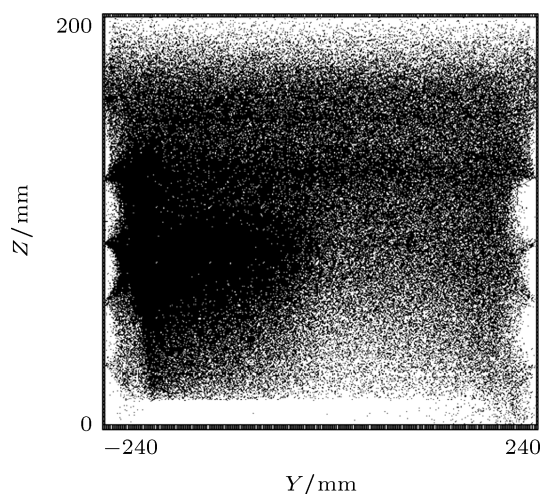


图 8 电子在 YZ 平面分布图

图 9 为整个模拟空间电子的能量分布, 由图 9 知电子呈双温态, 分别为 19.42 eV(实线) 和 3.05 eV(虚线). 图 10 为放电区和引出区的电子能量分布, 其中虚线表示放电区, 实线为引出区. 对比图 9 可知图 10 中, 两个区域内电子都呈双稳态, 且都呈现了高能尾.

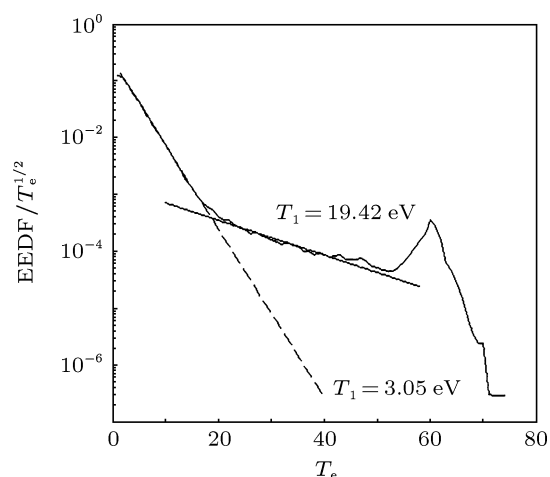


图 9 整个模拟空间电子能量归一化分布

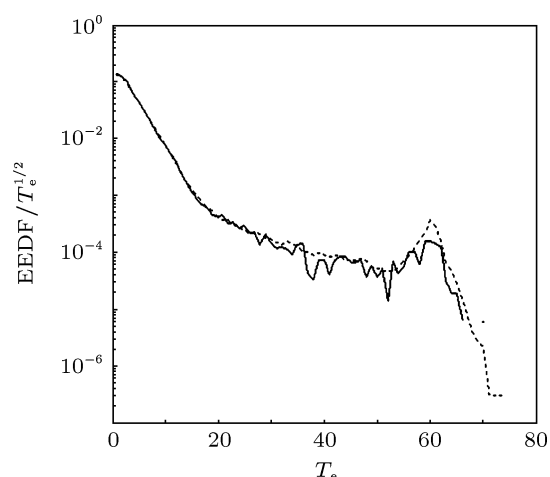


图 10 引出和放电区电子能量归一化分布

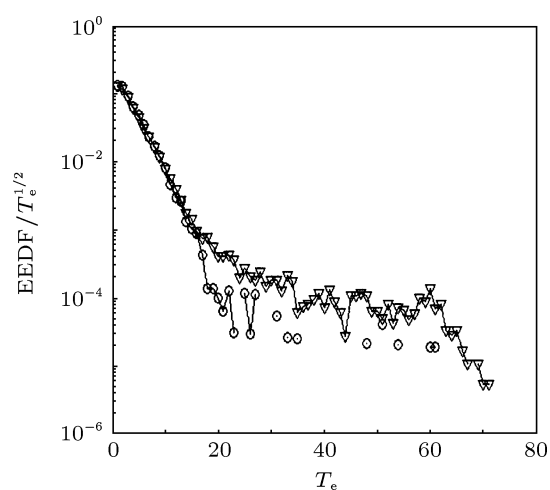


图 11 Y 方向电子能量归一化分布

图 11 中, 圆圈图案组成的图形为 $Y = 210$ — 220 mm 区域电子的能量归一化分布, 三角形

为 $Y = -220$ — -210 mm 区域能量分布. 由图 11 知, 电子在 $-Y$ 区域电子较多, 特别是高能电子漂移显著. 图 12 中, 三角形图案组成的图形为 $Z = 150$ — 160 mm 区域内电子能量分布, 圆圈

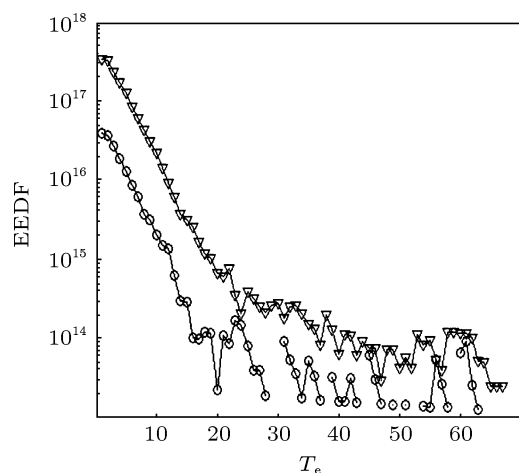


图 12 Z 方向电子能量分布

为 $Y = 10$ — 20 mm 区域能量分布. 从图 12 可知,

$Z = 150$ — 160 mm 区域高能电子远多于 $Y = 10$ — 20 mm 区域. 由于电子的回旋半径 $R = \frac{mv}{qB}$, 通常放电区域的磁场约为几十高斯 (Gs, $1 \text{ Gs} = 10^4 \text{ T}$), 对于 60 eV 的电子而言, 其回旋半径也只有 20 mm , 因此电子较易被磁场约束, 然而, 在引出区 X 方向设置的磁体较大 (如图 4 所示), 即 X 方向磁场较大且梯度变化大 (如图 6 所示), 因此, $B \times \nabla B$ 漂移较大, 而高能电子的回旋半径相对较大, 受到 $B \times \nabla B$ 影响后往 $-Y$ 方向迁移.

综上所述, 电子的空间非均匀起源于高能粒子的 $B \times \nabla B$ 漂移.

6 结论

本文阐述了全 3 维 PIC-MCC 模拟算法和碰撞处理方法, 理论推导了矩形永磁体的磁场公式, 对大型离子源进行数值模拟, 并结合电子的能量和空间分布分析了多峰磁场形态对电子运动的影响, 为离子源的设计提供了可靠依据.

- [1] Terasaki R, Fujino I, Hatayama A 2010 *Review of Scientific Instruments* **81** 02A703
- [2] Hu M, Wan S D, Zhong L, Liu H, Wan H 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 045201 (in Chinese) [胡明, 万树德, 钟雷, 刘昊, 汪海 2012 物理学报 **61** 045201]
- [3] Shen W L, Ma Z B, Tan B S 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 105204 (in Chinese) [沈武林, 马志斌, 谭必松等 2011 物理学报 **60** 105204]
- [4] Katoh K, Takado N, Hatayama A 2006 *Review of Scientific Instruments* **77** 03A535
- [5] Hanada M, Seki T, Takado N 2006 *Review of Scientific Instruments* **77** 03A515
- [6] Jin X L, Yang Z H 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5774 (in Chinese) [金晓林, 杨中海 2006 物理学报 **55** 5930]
- [7] Jin X L, Yang Z H 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 5774 (in Chinese) [金晓林, 杨中海 2006 物理学报 **55** 5935]
- [8] Shigefumi M, Fukumasa O 2008 *Review of Scientific Instruments* **79** 02A526
- [9] Yang C, Liu D G, Wang X M, Liu L Q, Wang X Q, Liu S G 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 045204 (in Chinese) [杨超, 刘大刚, 王小敏, 刘腊群, 王学琼, 刘盛纲 2012 物理学报 **61** 045204]
- [10] Yang C, Liu D G, Wang X Q, Wang X M, Xia M Z, Peng K 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 105204 [杨超, 刘大刚, 王学琼, 王小敏, 夏蒙重, 彭凯 2012 物理学报 **61** 105204]

3D simulation of the electron energy distribution in negative hydrogen ion source*

Yang Chao[†] Liu Da-Gang Liu La-Qun Xia Meng-Zhong
Wang Hui-Hui Wang Xiao-Ming

(University of electronic Science and Technology of China, Chengdu 610054, China)

(Received 4 November 2011; revised manuscript received 21 November 2011)

Abstract

In this paper, we calculate permanent magnet theoretically for a multicusp ion source. Coulomb collision between electrons is treated with the “binary collision” model and collisions between the electrons and hydrogen species are treated with the “null-collision” method. A 3D PIC-MCC simulation algorithm is developed, and based on this algorithm the electron deposition process in multicusp ion source is simulated, and the multicusp magnetic field effects on the electron energy distribution and spatial distribution are analyzed. The results show that the spatial non-uniformity of electron distribution comes from high energy electron $B \times \nabla B$ drift in the filter field.

Keywords: negative hydrogen ion source, multicusp magnetic field, electron energy distribution function

PACS: 52.65.Pp, 52.50.Dg

* Project supported by the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2007CB310401).

[†] E-mail: ychao@uestc.edu.cn