

## Ta 及 Nanbu 库仑碰撞模型数值对比研究\*

王辉辉<sup>†</sup> 杨超 刘大刚 蒙林 刘腊群 夏蒙重

(电子科技大学物理电子学院, 成都 610054)

(2012年5月5日收到; 2012年5月15日收到修改稿)

深入研究库仑碰撞, 对两种库仑碰撞模型——Ta 模型与 Nanbu 模型在理论上进行了对比分析, 详细阐述了两种模型中散射角大小的区别. 在已有的采用 Ta 模型的全三维粒子模拟/蒙特卡罗 (PIC/MCC) 算法基础上, 采用 Nanbu 模型对电子间库仑碰撞计算模块重新进行了算法设计. 分别应用 Ta 模型、Nanbu 模型和无库仑碰撞的全三维 PIC/MCC 算法对国外热门负氢离子源 JAEA 10 A 中的电子能量沉积进行了模拟分析. 模拟结果与实验结果的对比分析发现: 1) 库仑碰撞使电子能量分布更接近于麦克斯韦分布; 2) 相对于传统的 Ta 模型, Nanbu 模型的散射角考虑了多体碰撞的累加效果从而具有更高的期望值, 按其模拟得到的电子温度具有更高的精度. 这些为国内外学者设计相关算法指明了方向.

**关键词:** 库仑碰撞, Ta 模型和 Nanbu 模型, 负氢离子源, 电子能量沉积

**PACS:** 52.65.Pp, 52.50.Dg

**DOI:** 10.7498/aps.62.015206

## 1 引言

在国际热核聚变实验堆计划的推动下, 世界各国学者对负氢离子源展开了深入广泛的研究 [1–6]. 但负氢离子源内部物理过程复杂, 理论研究困难, 仅靠实验研究会造成大量资源浪费. 近年来, 随着计算机性能的快速提升, 负氢离子源数值模拟对理论和实验的有效指导作用得到了各国学者的重视 [7–10]. 目前, 对负氢离子源的数值模拟主要采用粒子模拟/蒙特卡罗 (PIC/MCC) 算法, 其中带电粒子之间的库仑碰撞, 因其长程碰撞及多体碰撞的特性, 与一般的中性粒子间的短程二体碰撞存在较大差别, 是 MCC 处理的主要技术难点, 一直没有得到完美的解决. 目前国内外对负氢离子源中库仑碰撞的计算机模拟 [7–10] 主要采用 Takizuka 等提出的小角度二体碰撞近似模型 (即所谓的 Ta 模型) [11, 12], 其精确度与实验有一定偏差. 理论上虽可通过减小时间步长来提高精度, 但大幅减少时间步长将使模拟时间变得不可接受. 如何在不减小时间步长下提高模拟精度, 成了急需解决的问题.

综上, 本文研究了 Nanbu 等导出的小角度碰撞

累积模型 (即 Nanbu 模型) [12, 13], 并与 Ta 模型进行了对比分析; 进行算法编制, 深入研究了 Ta 模型和 Nanbu 模型对负氢离子源中电子能量沉积的影响, 并与实验结果进行了对比. 结果证明, 相对于 Ta 模型, 采用 Nanbu 模型将更有效地模拟库仑碰撞, 其结果具有更高的精度.

## 2 库仑碰撞模型

对于 Ta 模型以及 Nanbu 模型, 其碰撞前后的速度变化可用 (1) 式 [12] 统一表示:

$$\begin{aligned} v'_\alpha &= v_\alpha + \frac{m_{\alpha\beta}}{m_\alpha} \Delta u, \\ v'_\beta &= v_\beta - \frac{m_{\alpha\beta}}{m_\beta} \Delta u \end{aligned} \quad (1)$$

式中,  $v_\alpha, v_\beta$  分别为碰撞前的  $\alpha, \beta$  粒子速度,  $v'_\alpha, v'_\beta$  分别为碰撞后的  $\alpha, \beta$  粒子速度,  $\Delta u$  为

$$\begin{aligned} \Delta u_x &= (u_x/u_\perp) u_z \sin \theta \cos \Phi \\ &\quad - (u_y/u_\perp) u \sin \Theta \sin \Phi - u_x (1 - \cos \theta), \\ \Delta u_y &= (u_y/u_\perp) u_z \sin \theta \cos \Phi \\ &\quad - (u_x/u_\perp) u \sin \Theta \sin \Phi - u_y (1 - \cos \theta), \end{aligned}$$

\* 国家自然科学基金 (批准号: 60971034, 11175040) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯作者. E-mail: whhjnzn@yahoo.cn

$$\Delta u_z = -u_{\perp} \sin \theta \cos \Phi - u_z (1 - \cos \theta), \quad (2)$$

其中,  $\mathbf{u} = v_{\alpha} - v_{\beta}$ ,  $u_{\perp} = \sqrt{u_x^2 + u_y^2}$ ,  $\theta$  为散射角,  $\Phi$  为  $[0, 2\pi]$  中的均匀随机数. Ta 与 Nanbu 模型的差别体现在  $\theta$  分布函数的不同.

### 2.1 Ta 模型

对于 Ta 模型, 其散射角的正切  $\tan(\theta/2)$  满足均值为 0, 方差  $var = \left( \frac{e_{\alpha}^2 e_{\beta}^2 n \ln \Lambda}{8\pi \epsilon_0^2 m_{\alpha\beta}^2 u^3} \right) \Delta t$  的高斯随机分布<sup>[11,13]</sup>, 其中  $e_{\alpha}$  和  $e_{\beta}$  分别为  $\alpha$  和  $\beta$  粒子的带电量,  $n$  为  $\alpha$  和  $\beta$  两种粒子中较小数密度,  $\log \Lambda$  为库仑对数,  $m_{\alpha\beta} = m_{\alpha} m_{\beta} / (m_{\alpha} + m_{\beta})$ ,  $\Delta t$  为库仑碰撞时间步长. 所以  $\theta$  满足分布函数

$$F(\theta) = \frac{1 + \left( \tan \frac{\theta}{2} \right)^2}{2\sqrt{2\pi var}} e^{-\frac{(\tan \frac{\theta}{2})^2}{2var}}, \theta \in [-\pi, \pi].$$

为了方便与 Nanbu 模型做比较, 根据对称性, 在 Ta 模型下将  $\theta \in [-\pi, \pi]$  转到  $\theta \in [0, \pi]$ , 分布函数则变为

$$F_{Ta}(\theta) = \frac{1 + \left( \tan \frac{\theta}{2} \right)^2}{\sqrt{2\pi var}} e^{-\frac{(\tan \frac{\theta}{2})^2}{2var}}, \theta \in [0, \pi]. \quad (3)$$

### 2.2 Nanbu 模型

对于 Nanbu 模型<sup>[12,13]</sup>, 其散射角  $\theta$  满足分布函数:

$$F_{Nanbu}(\theta) = \frac{A}{2 \sinh A} e^{A \cos \theta} \sin \theta, \theta \in [0, \pi], \quad (4)$$

式中,  $\coth A - A^{-1} = e^{-s}$ ,  $s = \frac{\ln \Lambda}{4\pi u^3} \left( \frac{e_{\alpha} e_{\beta}}{\epsilon_0 m_{\alpha\beta}} \right)^2 n \Delta t = 2var$ .

### 2.3 Ta 模型与 Nanbu 模型的差别

粒子的带电量、质量、密度、库仑对数、相对速度以及时间步长将决定  $var$  变量的取值, 而变量  $s = 2var$ , 从而可分别确定 Ta 模型以及 Nanbu 模型的散射角分布函数. 现分别取  $var$  为  $1 \times 10^{-2}$  及  $1 \times 10^{-4}$ , 对 Ta 模型以及 Nanbu 模型的散射角分布函数  $F$  进行对比, 如图 1 所示.

从图 1 可以发现, Ta 模型中散射角  $\theta$  取为 0 的可能性最大, 而 Nanbu 模型中散射角  $\theta$  在略偏离 0 的地方取值可能性最大. 令

$$\frac{dF_{Nanbu}(\theta)}{d\theta} = \frac{A}{2 \sinh A} e^{A \cos \theta} [A(\cos \theta)^2 + \cos \theta - A]$$

等于 0, 可求得  $F_{Nanbu}(\theta)$  取最大值时的  $\theta$  取值  $\theta_m$ ,

$$\theta_m = \arccos \frac{\sqrt{4A^2 + 1} - 1}{2A}, \quad (5)$$

$\theta_m$  与  $A$  的关系如图 2 所示.

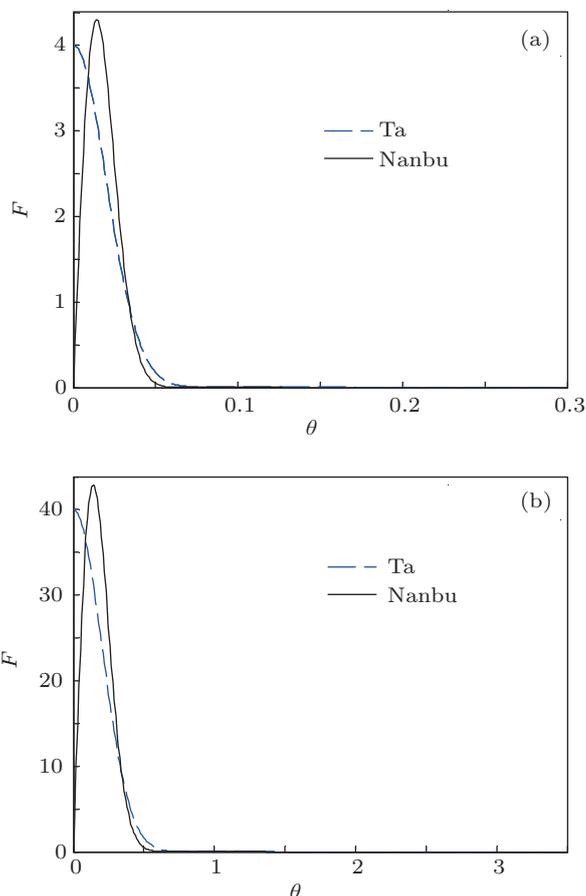


图 1 散射角分布函数 (a)  $var = 1 \times 10^{-2}$ ; (b)  $var = 1 \times 10^{-4}$

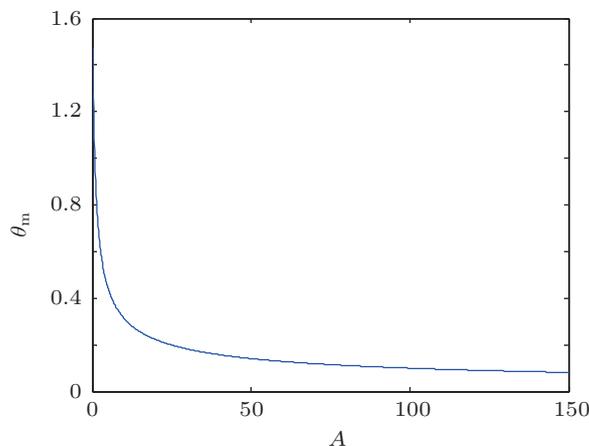


图 2  $\theta_m$  与  $A$  的关系

由 (5) 式及图 2 可知, 当  $A$  趋向于 0 时,  $\theta_m$  趋向于  $\frac{\pi}{2}$ .

一般情况下, 负氢离子源中  $s$  及  $var$  很小,  $A$  很大 ( $10^2$  量级), 此时有

$$\begin{aligned} \theta_m &= \arccos \frac{\sqrt{4A^2 + 1} - 1}{2A} \\ &\approx \arccos \left( 1 - \frac{1}{2A} \right) \approx \frac{1}{\sqrt{A}}. \end{aligned} \quad (6)$$

不管是 Ta 模型还是 Nanbu 模型, 此时  $\theta$  的取值都集中在 0 附近.

$$\begin{aligned} \theta_{\text{Ta 期望}} &= \int_0^\pi \theta F_{\text{Ta}}(\theta) d\theta \\ &= \int_0^\pi \theta \frac{1 + \left(\tan \frac{\theta}{2}\right)^2}{\sqrt{2\pi var}} e^{-\frac{\left(\tan \frac{\theta}{2}\right)^2}{2var}} d\theta \\ &\approx \int_0^\pi 2\sqrt{\frac{2var}{\pi}} e^{-\frac{\theta^2}{8var}} d\frac{\theta^2}{8var} \\ &\approx \sqrt{\frac{8var}{\pi}}, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \theta_{\text{Nanbu 期望}} &= \int_0^\pi \theta F_{\text{Nanbu}}(\theta) d\theta \\ &= \int_0^\pi \theta \frac{A}{2\sinh A} e^{A\cos\theta} \sin\theta d\theta \\ &\approx \int_0^\pi \theta e^{-\frac{A\theta^2}{2}} d\frac{A\theta^2}{2} \approx \sqrt{\frac{\pi}{2A}}. \end{aligned} \quad (8)$$

由  $\coth A - A^{-1} = e^{-s}$  可知, 当  $A$  很大时,  $A \approx 1/s$ , 因此

$$\theta_{\text{Nanbu 期望}} \approx \sqrt{\frac{\pi}{2A}} \approx \sqrt{\frac{s\pi}{2}} = \sqrt{var\pi}. \quad (9)$$

由 (7) 式和由 (9) 式比较可知, 相对于 Ta 模型, Nanbu 模型的散射角  $\theta$  的期望值更大. 这是因为 Ta 模型中每个时间步长碰撞只计算单个小角度碰撞, 而 Nanbu 模型中每个时间步长上每个带电粒子受到的碰撞效果考虑了附近大量其他带电粒子对其的碰撞叠加效果<sup>[12]</sup>. Nanbu 模型的处理更接近实际库仑碰撞中的多体同时碰撞效果, 将拥有更高的精确度.

## 2.4 库仑碰撞模型的适用条件

等离子体的准中性条件将使德拜长度外的带电粒子库仑力被中和, 因而 Ta 模型与 Nanbu 模型在处理带电粒子的库仑碰撞时, 都是在德拜长度内随机选一个带电粒子与其碰撞<sup>[13]</sup>, 但这在代码设计中较难实现, 实际应用中通常直接在整个模拟空间内随机选取. 为使在整个模拟空间内随机选取的

效果与在德拜长度内随机选取的效果一致, 这要求带电粒子的密度与速度在模拟区间内呈均匀分布. 实际的许多负氢离子源中, 虽然在外加磁场的作用下, 其带电粒子在边界上并不均匀, 但在模拟区间内部, 均匀性通常保持较好, 其速度在空间中也近似均匀分布 (如本文将模拟的多峰离子源 JAEA 10 A), 因而通常直接在整个模拟空间内随机选取带电粒子. 再则, Ta 模型与 Nanbu 模型均是对时间进行离散化处理来模拟实际的库仑碰撞, 因而其时间步长必须远远小于关键物理过程的特征时间 (如负氢离子源中非弹性键碰撞的碰撞周期), 且需大量宏粒子数来实现统计效果.

## 3 库仑碰撞模型在负氢离子源中的应用与比较

### 3.1 结构模型及参数设置

负氢离子源 JAEA 10 A 的结构及永磁体放置如图 3 所示, 模拟区域为  $-0.12 \text{ m} < X < 0.12 \text{ m}$ ,  $-0.24 \text{ m} < Y < 0.24 \text{ m}$ ,  $0 < Z < 0.2 \text{ m}$ , 每隔  $10^{-8} \text{ s}$  从  $(0, 0, 0.10 \text{ m})$  处发射 100 个宏粒子, 电子初始能量为 60 eV. 模拟中 PIC 时间步长设为  $10^{-10} \text{ s}$ , 电子与中性粒子间碰撞以及电子之间库仑碰撞的时间步长都设为  $10^{-8} \text{ s}$ .  $\text{H}_2$  分子温度设为 300 K,  $\text{H}_2^+$  数密度为  $1.0 \times 10^{17} \text{ m}^{-3}$ ,  $\text{H}_3^+$  数密度为  $5.0 \times 10^{17} \text{ m}^{-3}$ , H 原子与  $\text{H}_2$  分子粒子数之比为 10:1<sup>[9]</sup>, 电子与上述各粒子之间的反应类型详见文献<sup>[9]</sup>.

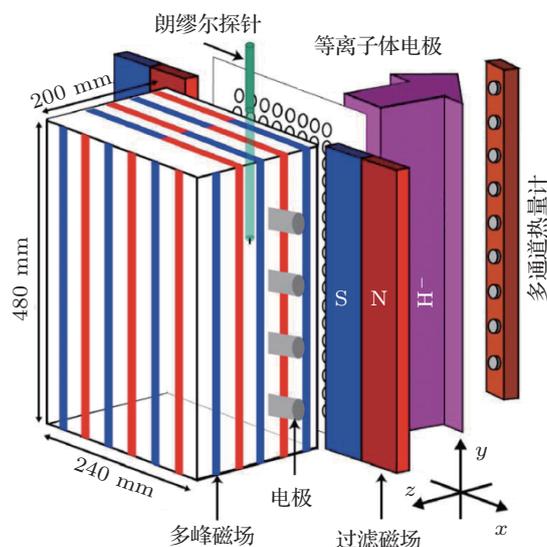


图 3 JAEA 10 A 负氢离子源模型

### 3.2 电子温度的计算方法

对于麦克斯韦分布,关于标量速度  $v$  的分布函数  $g(v)$  [14] 为

$$g(v) = 4\pi v^2 \left( \frac{m}{2\pi KT} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2KT}}. \quad (10)$$

设关于粒子动能  $E$  (即  $mv^2/2$ ) 的分布函数为 EEDF( $E$ ), 则

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} \text{EEDF}(E) dE &= \int_0^{+\infty} g(v) dv \\ &= \int_0^{+\infty} 4\pi v^2 \left( \frac{m}{2\pi KT} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2KT}} dv \\ &= \int_0^{+\infty} 4\pi \frac{2E}{m} \left( \frac{m}{2\pi KT} \right)^{3/2} e^{-\frac{E}{KT}} d\sqrt{\frac{2E}{m}} \\ &= \int_0^{+\infty} \frac{2}{KT} \sqrt{\frac{E}{\pi KT}} e^{-\frac{E}{KT}} dE, \end{aligned} \quad (11)$$

因此,

$$\text{EEDF}(E) = \frac{2}{KT} \sqrt{\frac{E}{\pi KT}} e^{-\frac{E}{KT}}, \quad (12)$$

$$\lg \left[ \frac{\text{EEDF}(E)}{\sqrt{E}} \right] = -\frac{1}{KT \ln 10} E + \lg \left( \frac{2}{KT} \sqrt{\frac{1}{\pi KT}} \right). \quad (13)$$

由 (13) 式可知, 麦克斯韦分布时  $E \sim \lg \left[ \frac{\text{EEDF}(E)}{\sqrt{E}} \right]$  图为一条直线, 直线斜率的绝对值倒数与  $\ln 10$  的比值为粒子温度  $KT$ .

### 3.3 模拟结果

图 4 为 JAEA 10 A 中采用 Nanbu 模型下得到的电子空间分布, 采用 Ta 模型或不考虑库仑碰撞得到的电子空间分布与图 4 基本一致. 从图 4 中可以看出, 虽然在外加磁场的的作用下, 电子空间分布在边界上呈现一定的不均匀性, 但在模拟空间内部, 其均匀性保持较好; 从图 5 (Nanbu 模型下得到的结果) 与图 6 可知, 虽然在  $y$  方向高能电子存在一定的非均匀性, 但整体上电子能量在模拟空间中近似呈均匀分布. 因而在库仑碰撞模块中, 直接在模拟空间随机选取电子可以对实际库仑碰撞效果进行正确模拟.

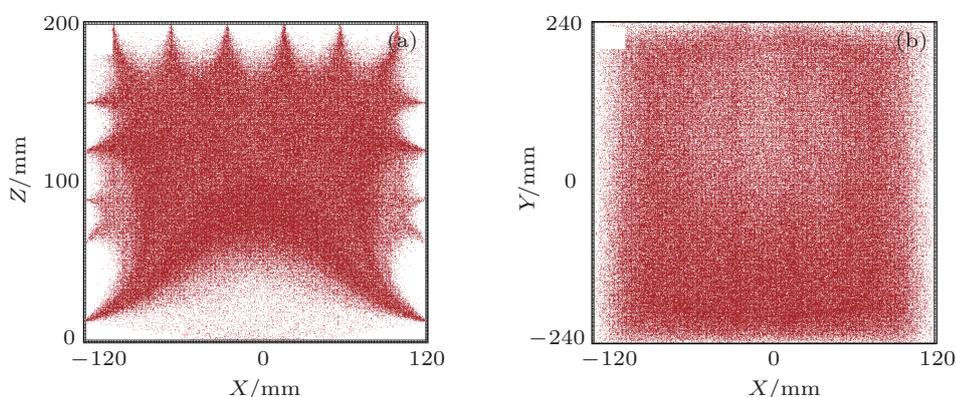


图 4 电子空间分布 (a) X-Z 平面; (b) X-Y 平面

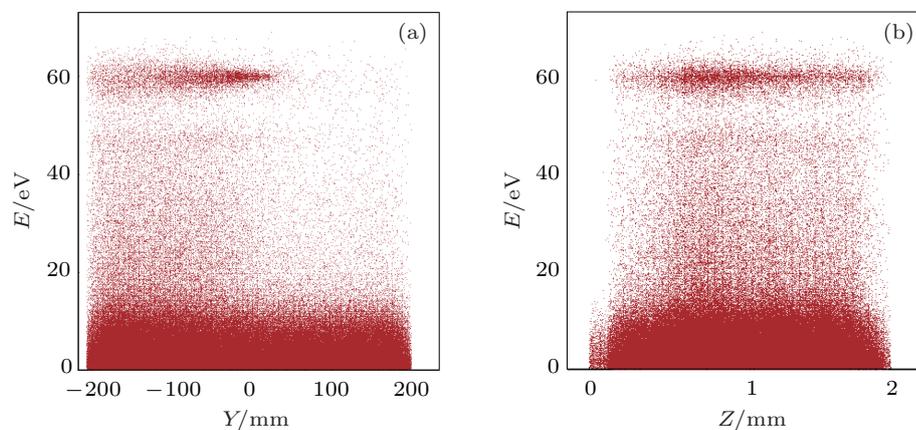


图 5  $Y$  及  $Z$  方向电子能量相空间分布 (a)  $Y$  方向; (b)  $Z$  方向

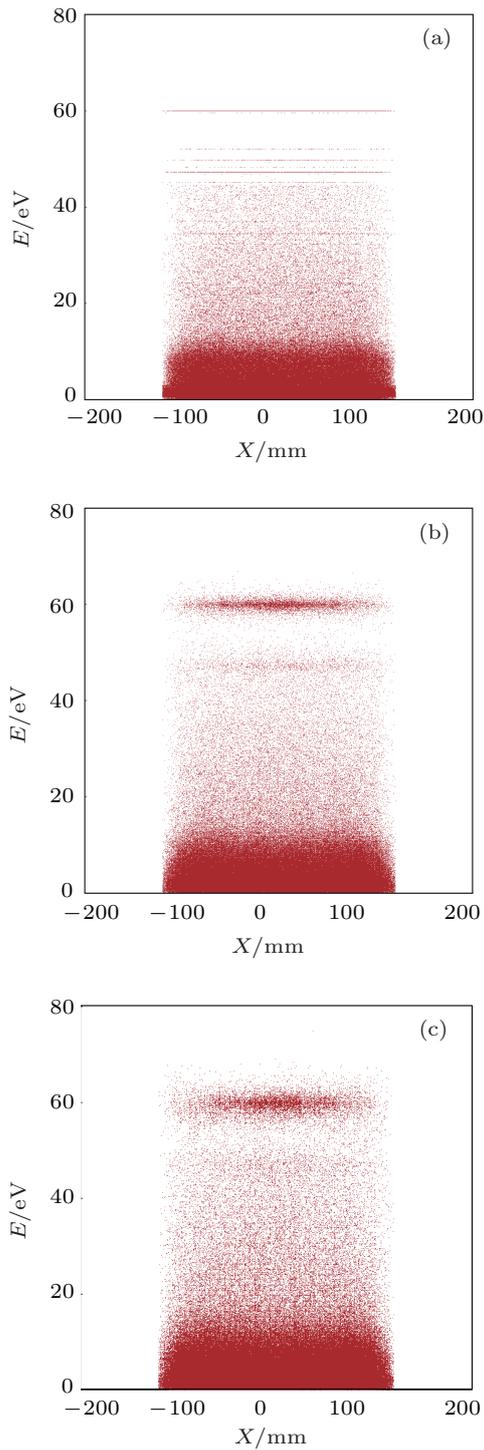


图6 电子相空间分布 (a) 无库仑碰撞; (b) Ta 模型库仑碰撞; (c) Nanbu 模型库仑碰撞

图6为电子能量沉积的相空间图. 由于不同反应拥有不同的阈值, 若不考虑库仑碰撞, 电子能量在靠近 60 eV 时呈现离散分布, 如图 6(a) 所示. 库仑碰撞则会使电子能量分布相对连续, 如图 6(b) 及 6(c) 所示; 相对于 Ta 模型, Nanbu 模型因考虑了多体碰撞的累积效果, 其碰撞效果更加明显, 电子能

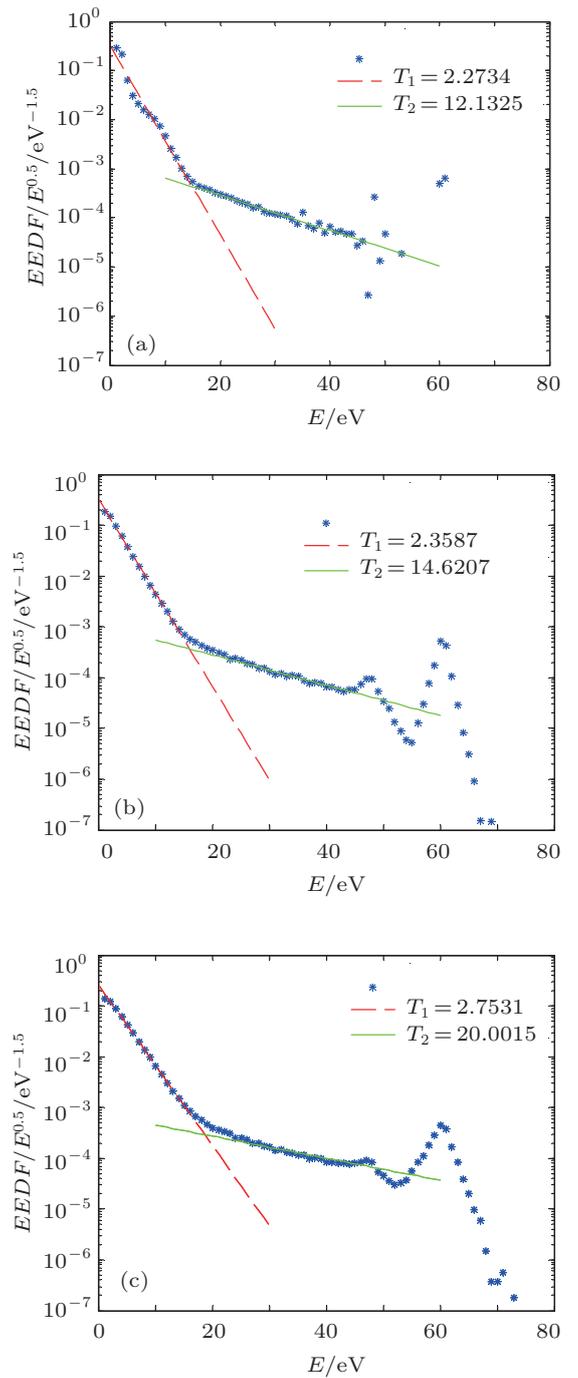


图7 电子能量分布 (a) 无库仑碰撞; (b) Ta 模型库仑碰撞; (c) Nanbu 模型库仑碰撞

量分布连续性更好.

图7为负氢离子源中的电子能量分布  $\frac{EEDF(E)}{\sqrt{E}}$  随电子能量变化分布图, 图 7(a), (b), (c) 分别对应无库仑碰撞、Ta 模型库仑碰撞及 Nanbu 模型库仑碰撞. 从图 7 可知, 这三种情况的电子能量分布都可近似看作两条准麦克斯韦分布的直线叠加而成, 可通过直线斜率计算温度. 无库仑碰撞

时, 电子温度分别为 2.27 eV 与 12.13 eV, 但直线波动较大, 且在电子能量 45—60 eV 区间基本呈离散分布; Ta 模型库仑碰撞时, 电子温度分别为 2.36 eV 与 14.62 eV; Nanbu 模型时, 电子温度分别为 2.75 eV 与 20.00 eV. 通过对图 7(a), (b), (c) 结果分析可知, 不考虑库仑碰撞时, 电子温度也呈双稳态, 但库仑碰撞可使电子能量更接近于麦克斯韦分布 (即相对图 7(a) 而言, 7(b) 和 7(c) 两图中曲线更平滑). 由文献 [7] 可知, 实验测得的电子温度分别为 4 与 20 eV, 因而, 相对于不考虑库仑碰撞或采用 Ta 模型库仑碰撞, 采用 Nanbu 模型库仑碰撞得到的模拟结果更接近实验, 即模拟所得电子温度精度更高, 这也与前面理论分析相呼应.

JAEA 10 A 中非弹性碰撞的碰撞周期在  $10^{-6}$ — $10^{-7}$  s 量级, 因而虽然 Nanbu 模型具有更高的精度, 为有效模拟物理过程, 但其时间步长  $1.0 \times 10^{-8}$  s 不宜继续放大; 而考虑到计算效率, 时间步长  $1.0 \times 10^{-8}$  s 也不宜继续缩小, 否则模拟时间无法接受.

## 4 结论

本文对库仑碰撞的 Ta 模型以及 Nanbu 模型进行了深入研究对比, 对 Ta 模型及 Nanbu 模型的散射角期望值、最大可能散射角进行了计算, 结果显示 Nanbu 具有更大的散射角期望值, 其最大可能散射角也更大. 分别采用无库仑碰撞、Ta 模型以及 Nanbu 模型库仑碰撞对 JAEA 10A 中电子能量沉积进行模拟计算并与实验结果对比, 结果显示: 1) 库仑碰撞使电子能量分布更接近于麦克斯韦分布; 2) 相对于传统的 Ta 模型, Nanbu 模型的散射角考虑了多体碰撞的累加效果从而具有更高的期望值, 按其模拟得到的电子温度具有更高的精度. 本文研究了库仑碰撞对电子能量沉积的影响, 验证了在负氢离子源中采用 Nanbu 模型处理库仑碰撞可以获得更高的精度, 为国内外相关学者的粒子模拟算法研制指明了方向, 从而可更好地为负氢离子源的理论研究与实验研究提供帮助.

- [1] Yang C, Liu D G, Wang H H, Yang Y P, Liao F Y, Liu L Q, Peng K, Xia M Z 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 235201 (in Chinese) [杨超, 刘大刚, 王辉辉, 杨宇鹏, 廖方燕, 刘腊群, 彭凯, 夏蒙重 2012 物理学报 **61** 235201]
- [2] Yang C, Liu D G, Xia M Z, Wang H H, Wang X M, Liu L Q, Peng K 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 185204 (in Chinese) [杨超, 刘大刚, 夏蒙重, 王辉辉, 王小敏, 刘腊群, 彭凯 2012 物理学报 **61** 185204]
- [3] Tobar H, Hanada M, Kashiwagi M, Taniguchi M, Umeda N, Watanabe K, Inoue T, Sakamoto K, Takado N 2008 *Rev. Sci. Instrum.* **79** 02C111
- [4] Inoue T, Tobar H, Takado N, Hanada M, Kashiwagi M, Hatayama A, Wada M, Sakamoto K 2008 *Rev. Sci. Instrum.* **79** 02C112
- [5] Katoh K, Takado N, Hatayama A, Hanada M, Seki T, Inoue T 2006 *Rev. Sci. Instrum.* **77** 03A535
- [6] Hanada M, Seki T, Takado N, Inoue T, Tobar H, Mizuno T, Hatayama A, Dairaku M, Kashiwagi M, Sakamoto K, Taniguchi M, Watanabe K 2006 *Rev. Sci. Instrum.* **77** 03A515
- [7] Fujino I, Hatayama A, Takado N, Inoue T 2008 *Rev. Sci. Instrum.* **79** 02A510
- [8] Terasaki R, Fujino I, Hatayama A, Mizuno T, Inoue T 2010 *Rev. Sci. Instrum.* **81** 02A703
- [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** 105206 (in Chinese) [杨超, 刘大刚, 王学琼, 王小敏, 夏蒙重, 彭凯 2012 物理学报 **61** 105206]
- [11] Takizuka T, Abe H 1977 *J. Comp. Phys.* **25** 205
- [12] Nanbu K 1997 *Phys. Rev. E* **55** 4642
- [13] Wang C, Lin T, Cafilisch R, Cohen B, Dimits A 2008 *J. Comp. Phys.* **227** 4308
- [14] Chen F F 1984 *Introduction to Plasma Physics* (New York: Plenum Press) p229

# Numerical comparison between Ta and Nanbu models of Coulomb collisions\*

Wang Hui-Hui<sup>†</sup> Yang Chao Liu Da-Gang Meng Lin  
Liu La-Qun Xia Meng-Zhong

(School of Physical Electronics, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 610054, China)

(Received 5 May 2012; revised manuscript received 15 May 2012)

## Abstract

Two models (Ta and Nanbu) of Coulomb collisions are compared theoretically, and the difference in scatter angle between Ta model and Nanbu model is analyzed particularly. The model of Coulomb collisions between electrons in the code which is developed already with Ta model is rebuilt with Nanbu model. Then, the codes with Ta model and Nanbu model are used for simulating electron energy distribution in JAEA 10 A respectively. The results of simulation are compared with the experimental results, showing that the electron energy distribution is closer to Maxwell distribution with Coulomb collisions and the Nanbu model is more accurate than the Ta model.

**Keywords:** Coulomb collisions, Ta model and Nanbu model, negative hydrogen ions sources, electron energy distribution

**PACS:** 52.65.Pp, 52.50.Dg

**DOI:** 10.7498/aps.62.015206

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 60971034, 11175040).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: whhnjznl@yahoo.cn