

表面产生负氢离子引出 MCC 算法设计*

杨超[†] 刘大刚 王辉辉 杨宇鹏 廖方燕 彭凯 刘腊群

(电子科技大学物理电子学院, 成都 610054)

(2012年7月15日收到; 2012年8月21日收到修改稿)

本文深入研究负氢离子输运及引出物理机理, 理论分析了交换电荷反应及库仑碰撞过程, 并设计了相应数值计算模块. 在此基础上, 采用有限差分法计算负氢离子所受洛伦兹力, 运用蒙特卡罗碰撞方法处理负氢离子与其他粒子间的碰撞, 成功研制了表面产生负氢离子输运及引出的全三维 MCC 算法, 结合国外热门离子源 JAEA 10A 离子源进行模拟验证, 结果显示: 随着过滤磁场增大, 引出离子数越大, 离子源空间生存离子总数越小; 当过滤磁场较小时, 气压越大引出离子数越多, 当过滤磁场较大时, 气压越小引出离子数越多.

关键词: 表面产生负氢离子, 蒙特卡罗碰撞, 引出**PACS:** 52.65.Pp, 52.50.Dg**DOI:** 10.7498/aps.62.025206

1 引言

在全球 ITER 计划的推动下, 大量关于中性束注入等离子体热核研究正在世界各国进行中. 随着高速度、大容量高性能计算机的快速发展及一些新的改进的 PIC 算法的出现, 使得对负氢离子源的计算机模拟的深入研究成为可能. 近年来, 国内外专家在负氢离子源的研究过程中发现了如下几个技术难点^[1]: 1) 如何提高低压条件下负氢离子 (H^-) 产生效率; 2) 如何开发能产生空间均匀性负离子束的大体积负氢离子源; 3) 如何优化和引出光学特性良好的离子束. 众所周知, 离子束的发散角越小, 离子源的光学特性越好, 然而, 由于离子源内物理过程复杂, 要探索影响离子束的发散角的若干主要因素, 以便优化离子源光学特性, 这一过程如果没有较准确的理论和模拟作指导, 光靠试验来完成势必会造成资源的极大浪费, 因此, 数值模拟成为负氢离子源研制不可或缺的一环.

基于以上事实, 首先, 理论分析负氢离子输运和引出物理过程. 然后, 在自主开发的粒子模拟软件中研究并添加 MCC 模块, 并使两者有机结合. 最后, 采用该算法对 JAEA 10A 离子源中负氢离子输运及引出过程进行粒子模拟验证, 模拟结果证实了

该算法是可信的.

2 输运及引出机理分析

H^- 表面产生机理: 氢原子轰击等离子体栅网 (plasma grid, PG) 见图 1, 并在其表面产生 H^- ^[2]. 图 1 所示为表面产生负氢离子的输运及引出机理示意图, 由图 1 可知, H^- 垂直 PG 面发射, 在其输运过程中将与一系列粒子发生碰撞以及受过滤磁场的影响, 这将导致 H^- 运动轨迹发射翻转以致通过引出孔 (即离子引出)^[3]. 该过程中碰撞种类和数量较多, 算法设计时, 本文将考虑几种主要反应

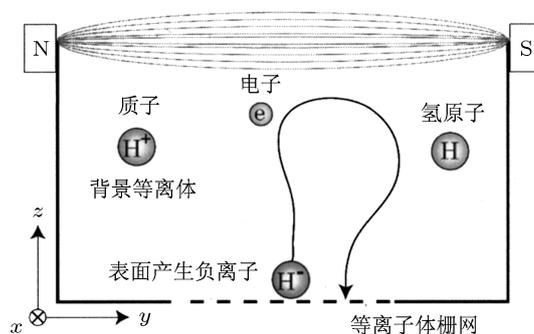


图 1 负氢离子输运及引出机理示意图

* 国家自然科学基金 (批准号: 11175040) 资助的课题.

[†] 通讯作者. E-mail: ychao@uestc.edu.cn

(如表 1 所示), 此外, 还将考虑 H^- 与 H^+ 之间的库仑碰撞.

表 1 模拟所考虑的反应类型

索引	碰撞类型	碰撞前	碰撞后
1	激发分解	$H^- + e$	$2e + H$
2	中和碰撞	$H^- + H^+$	$2H$
3	复合离解	$H^- + H$	$e + H_2$
4	交换电荷碰撞	$H^- + H$	$H + H^-$
5	弹性碰撞	$H^- + H_2$	$H^- + H_2$

3 交换电荷碰撞

表 1 中 1—4 四种反应中, 前三种反应为 H^- 的消亡机理, 碰撞后 H^- 无需跟踪, 只需对反应 4 进行模拟, 这四种反应的 MCC 处理流程同文献 [4,5] 所述空碰撞模型, 待碰撞类型执行完毕, 给定 H 能量 E_H 设为 0.5 eV, 其速度按各向同性设置, 可计算交换电荷碰撞后 H^- 的速度 [6]

$$v'_{H^-} = v_{H^-} - \frac{m_{H^-}}{m_{H^-} + m_H} [g(1 - \cos \chi) + h|\sin \chi|]; \quad (1)$$

$$v'_H = v_H + \frac{m_H}{m_{H^-} + m_H} [g(1 - \cos \chi) + h|\sin \chi|]; \quad (2)$$

$$h_x = g_\perp \cos \Psi,$$

$$h_y = g_x g_y \cos \Psi - g g_z \sin \Psi / g_\perp,$$

$$h_z = g_x g_z \cos \Psi + g g_y \sin \Psi / g_\perp,$$

$$g_\perp = \sqrt{g_y^2 + g_z^2},$$

$$\cos \chi = \sqrt{1 - R_1},$$

$$\Psi = 2\pi R_2. \quad (3)$$

其中 R_1, R_2 为 [0,1] 之间的两个均匀随机数, 待碰撞完成后, v'_H 变成 H^- 的速度, v'_{H^-} 则变为 H 的速度.

4 库仑碰撞

假定 H^- 和 H^+ 速度分别为 v_α 和 v_β , 以及相对于参考系下的散射角 Θ . 散射角 Θ 服从高斯分布, 且 Θ 与高斯随机数 δ 之间, 满足如下关系 [7]:

$$\delta = \tan(\Theta/2), \quad (4)$$

其中, δ 为高斯随机数, 且期望为 0, 方差为

$$\langle \delta^2 \rangle = \left(\frac{e_\alpha^2 e_\beta^2 n_L \log \Lambda}{8\pi \epsilon_0^2 m_\alpha \beta^2 u^3} \right) \Delta t, \quad (5)$$

其中, e_α 和 e_β 分布为 H^- 和 H^+ 的电量, n_L 为 H^- 和 H^+ 两种粒子的最小密度, $\log \Lambda$ 为库仑对数, u 为 H^- 和 H^+ 的相对速度大小即 $u = |v_\alpha - v_\beta|$, Δt 为时间步长. $m_{\alpha\beta}$ 为折合质量可写成

$$m_{\alpha\beta} = \frac{m_\alpha m_\beta}{m_\alpha + m_\beta}. \quad (6)$$

为了计算粒子库仑碰撞前后粒子速度变化, 对高斯随机数 δ 进行抽样, 并应用于求解散射角 Θ ,

$$\sin \Theta = \frac{2\delta}{(1 + \delta^2)},$$

$$1 - \cos \Theta = \frac{2\delta^2}{(1 + \delta^2)}. \quad (7)$$

在将 $\sin \Theta$ 和 $\cos \Theta$ 用于求解碰撞后 H^- 和 H^+ 粒子的速度 v'_α, v'_β , 其满足如下关系:

$$v'_\alpha = v_\alpha + \frac{m_{\alpha\beta}}{m_\alpha} \Delta u,$$

$$v'_\beta = v_\beta - \frac{m_{\alpha\beta}}{m_\beta} \Delta u, \quad (8)$$

其中, Δu 定义如下:

$$\Delta u_x = (u_x/u_\perp) u_z \sin \Theta \cos \Phi$$

$$- (u_y/u_\perp) u \sin \Theta \sin \Phi - u_x (1 - \cos \Theta),$$

$$\Delta u_y = (u_y/u_\perp) u_z \sin \Theta \cos \Phi$$

$$- (u_x/u_\perp) u \sin \Theta \sin \Phi - u_y (1 - \cos \Theta),$$

$$\Delta u_z = -u_\perp \sin \Theta \cos \Phi - u_z (1 - \cos \Theta). \quad (9)$$

其中, $u_\perp = \sqrt{u_x^2 + u_y^2}$, 散射角向角 Φ 是随机地从均匀分布区间 $[0, 2\pi]$ 中选取.

5 全三维 PIC/MCC 算法流程

H^- 运动轨迹跟踪方程

$$m_i \frac{dv}{dt} = q_i (\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) + \text{collision}, \quad (10)$$

其中 m_i 为 H^- 质量, \mathbf{v} 为 H^- 速度, q_i 为 H^- 电量, \mathbf{E} 为电场强度, \mathbf{B} 为磁感应强度, collision 为 H^- 碰撞项. 采用时间步进的方法, 具体处理流程如图 2 所示 [5].

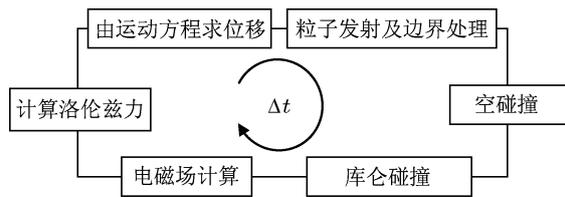


图2 带电粒子时间

6 模拟验证

6.1 模拟参数设置及描述

图3是JAEA 10A离子源的结构图^[8], $120\text{ mm} < X < 120\text{ mm}$, $240\text{ mm} < Y < 240\text{ mm}$, $0\text{ mm} < Z < 203\text{ mm}$, 模拟时采用图4所示的简化模型替代实际模型, X, Y 方向尺寸不变, $0\text{ mm} < Z < 57\text{ mm}$, 引出区开孔区域长 0.14 m , 宽 0.34 m , X 方向等距地开 14 排孔, Y 方向等距地开 27 排孔, 孔的直径为 9 mm , X, Y 方向网格大小为 2 mm , Z 方向为 1 mm , 时间步长设为 $1 \times 10^{-8}\text{ s}$, 从 PG 沿 $+Z$ 方向面发射 100 个 H^- , H^- 初始能量设为 3 eV , H^- 接触引出壁时被反射, 与其他壁接触时被吸收. H_2 与 H 粒子数密度之比设为 0.2 , 放电室气压设为 0.3 Pa , H^+ , H , H_2 温度分别设为 $0.5, 0.5, 0.1\text{ eV}$, 其中 H^+ , H_2 速度按照麦克斯韦分布设置, H 速度按各向同性分布^[9]. 考虑的反应包括表1所述反应以及 H^- 和 H^+ 间库仑碰撞, 过滤磁场沿 X 方向 $B_X = B_0 \exp[-(z - z_0)^2 / (2l_B^2)]$, 其中 z_0 为 0.03 m , l_B 为 0.02 m , B_0 为 160 Gs ($1\text{Gs} = 10^{-4}\text{ T}$).

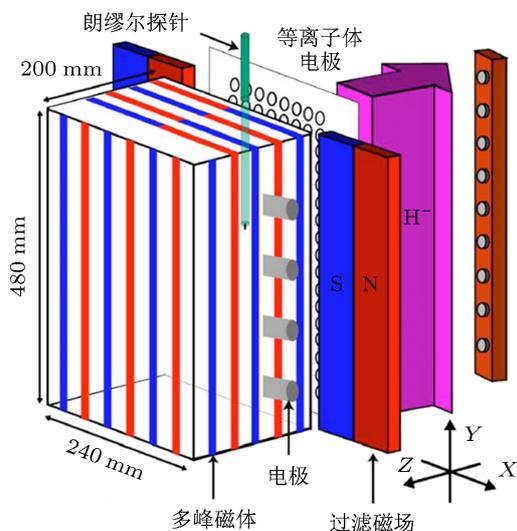


图3 JAEA 10A 离子源实际模型

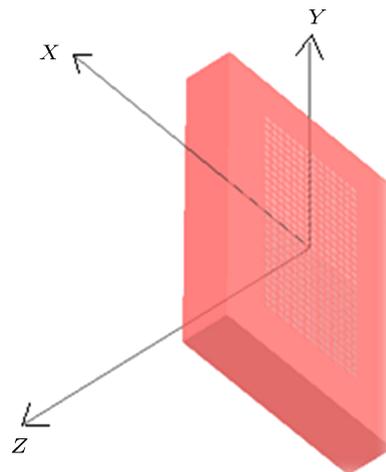


图4 模拟时采用的简化模型

6.2 模拟结果及分析

图5和图6分别为 H^- 在 XZ 和 XY 平面空间分布. 从图5和图6可知, H^- 从 PG 表面导体部分发射并沿 $+Z$ 方向运动, 并被过滤磁场以及粒子间碰撞所沉积.

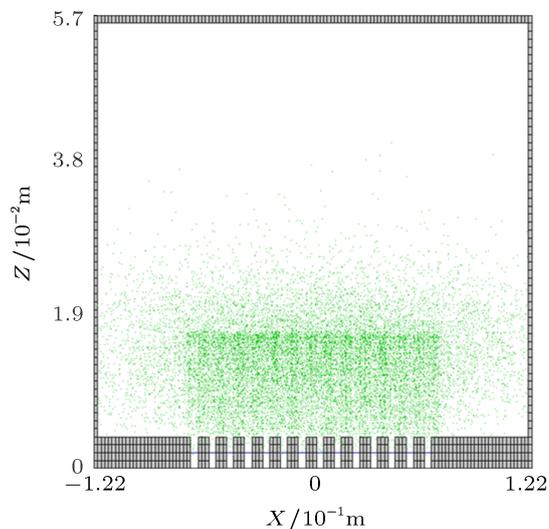


图5 H^- 在 XZ 平面分布

图7为 H^- 在 X 方向能量沉积情况, H^- 能量在 3 eV (高能部分) 附近有小幅波动, 这符合 H^- 和 H^+ 间库仑碰撞的 TA 模型小角散射处理机理. 由于 H 的能量为 0.5 eV , 小于 H^- 的初始能量 3 eV , 通过 H^- 和 H 间的交换电荷, 即呈现了 H^- 能量的低能部分, 这符合 H^- 的能量沉积机理. 图8为 H^- 粒子数随时间演化关系, 由图8可知, 当时间到达

1×10^{-4} s 时, H^- 收支平衡, 即所模拟等离子体达到稳态.

H^- 模拟达到稳态 (通常取 2×10^{-4} s) 后, 统计 100 个时间迭代步 (下同), 得到 H^- 通过引出孔的统计特性如表 2, 3, 4 所示, 其中表 2, 3, 4 分别表示放电气压在 0.1 Pa, 0.3 Pa, 0.5 Pa 的模拟情形. 从表 2, 3, 4 可知, 3 表都呈现了相同规律 —— 随着磁场增大, 引出离子数越大, 离子源空间生存离子总数越小. 将表 2, 3, 4 绘成曲线如图 9 所示, 其中 K_0 表示引出数与总离子数的比值. 从图 9 可知, 当过滤磁场较小时, 气压越大引出离子数越多, 反之则相反, 这一结果与文献 [10] 符合.

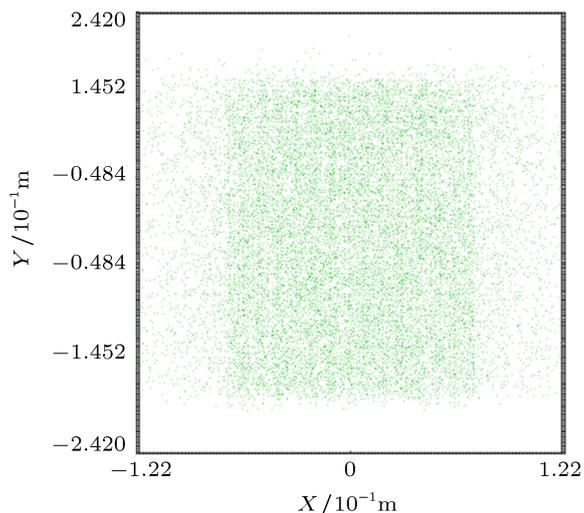


图 6 H^- 在 XY 平面分布

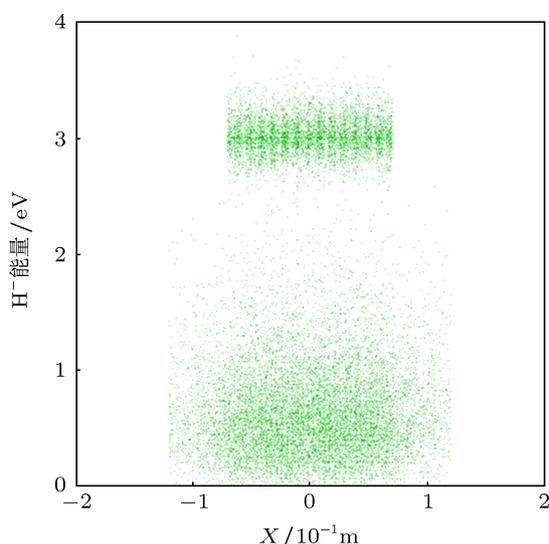


图 7 H^- 能量在 X 方向分布

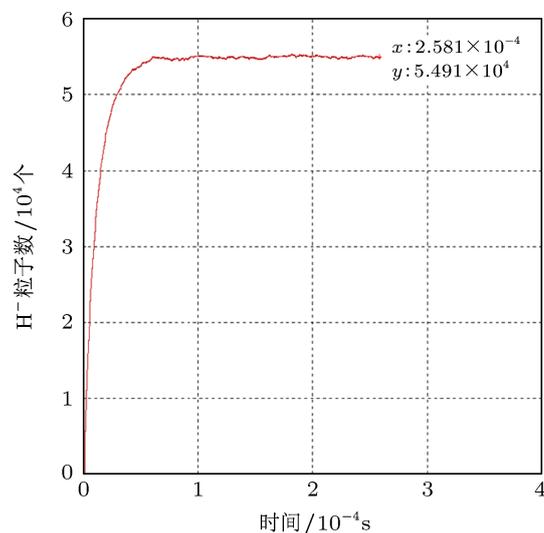


图 8 H^- 粒子数随时间演化

表 2 $P = 0.1$ Pa 时的模拟情况

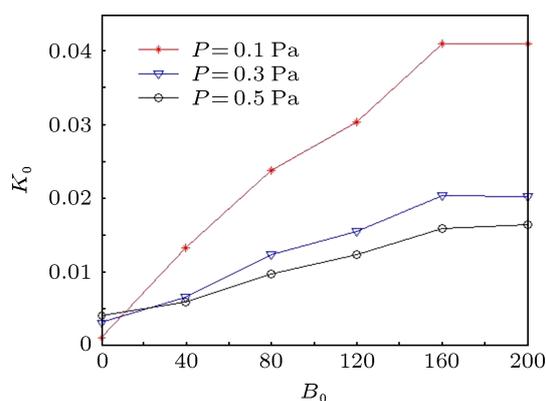
观测物理量	B_0 /Gs					
	0	40	80	120	160	200
引出数	87	1003	1588	1872	2248	2237
总离子数	89530	75950	66680	61800	54910	54590

表 3 $P = 0.3$ Pa 时的模拟情况

观测物理量	B_0 /Gs					
	0	40	80	120	160	200
引出数	235	515	891	1059	1290	1279
总离子数	78070	78430	72380	68720	63430	63130

表 4 $P = 0.5$ Pa 时的模拟情况

观测物理量	B_0 /Gs					
	0	40	80	120	160	200
引出数	348	401	630	769	953	963
总离子数	85650	68650	65260	62310	59900	58630

图 9 在不同气压下 H^- 引出随过滤磁场变化

7 结论

本文理论分析了负氢离子源中 H^- 输运及引出过程, 研究了交换电荷碰撞和库仑碰撞数值算法, 结合已有的 CHIPIC 软件的粒子模拟算法, 成功研制了全三维 H^- 能量沉积算法, 由于目前仅模拟验证该算法的正确性, 此外, 国外 JAEA 10A 离子源放电参数较易获得且模型简单, 故而采用该离子源进行模拟验证, 模拟结果与文献计算结果符合, 证实了该算法的可行性, 后续将采用该算法研究国内离子源, 以便更好地服务国内中性束注入实验以及拓展算法的适用范围。

- [1] Shigefumi M, Fukumasa O 2008 *Rev. Sci. Instrum.* **79** 02A526
- [2] Takado N, Tobar H, Inoue T, Hanatani J, Hatayama A, Hanada M, Kashiwagi M, Sakamoto K 2008 *Journal of Applied Physics* **103** 053302
- [3] Kameyama H, Matsushita D, Koga S, Terasaki R, Hatayama A 2011 *Second International Symposium on Ions, Beams and Sources*, Takayama, Japan. November 16–19, 2010 p39
- [4] 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]
- [5] Yang C, Liu D G, Chen Y, Xia M Z, Wang X Q, Wang X M 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 135203 (in Chinese) [杨超, 刘大刚, 陈颖, 夏蒙重, 王学琼, 王小敏 2012 物理学报 **61** 135203]
- [6] Yang C, Liu D G, Wang X Q, Wang X M, Xia M Z, Peng K 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 105204 (in Chinese) [杨超, 刘大刚, 王学琼, 王小敏, 夏蒙重, 彭凯 2012 物理学报 **61** 105204]
- [7] Chiaming W, Tungyou L, Russel C, Bruce I C, Andris M D 2008 *Journal of Computational Physics* **227** 4308
- [8] Terasaki R, Fujino I, Hatayama A, Mizuno T, Inoue T 2010 *Review of Scientific Instruments* **81** 02A703
- [9] Makino K, Sakurabayashi T, Hatayama A, Miyamoto K, Ogasawara M 2002 *Rev. Sci. Instrum.* **73** 1051
- [10] Matsushita N, Takado N, Hatayama A, Inoue T 2008 *Review of Scientific Instruments* **79** 02A527

The MCC numerical algorithm of the extraction of the surface-produced negative hydrogen ions*

Yang Chao[†] Liu Da-Gang Wang Hui-Hui Yang Yu-Peng
Liao Fang-Yan Peng Kai Liu La-Qun

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

(Received 15 July 2012; revised manuscript received 21 August 2012)

Abstract

The physical mechanism of the negative hydrogen ion transportation and extraction is investigated, the charge exchange reaction and coulomb collision process are analysed theoretically, and the corresponding numerical calculation module is also designed. Therefore, using the finite difference time domain method to calculate the Lorentz force of the negative hydrogen ions, and through Monte Carlo method to deal with the collision between negative hydrogen ions and other particles. Finally, it is successful to develop the 3D MCC algorithm of the transportation and extraction of the surface-produced negative hydrogen ions, and simulate the foreign popular ion source JAEA 10 A. The results show that with the increase of the filter magnetic field, the bigger the number of extracted ions, the smaller the number of ions in negative hydrogen ions source is, that with the filter magnetic field is small, the greater the pressure, the bigger the number of extracted ions is, and that when the filter magnetic field is big, the smaller the pressure, the bigger the number of extracted ions is.

Keywords: surface-produced H^- , Monte Carlo collision, extraction

PACS: 52.65.Pp, 52.50.Dg

DOI: 10.7498/aps.62.025206

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11175040).

[†] Corresponding author. E-mail: ychao@uestc.edu.cn