

# 潘宁源放电的全三维电磁粒子模拟/蒙特卡罗碰撞数值算法研究

杨超<sup>1)†</sup> 龙继东<sup>2)</sup> 王平<sup>3)</sup> 廖方燕<sup>1)</sup> 夏蒙重<sup>3)</sup> 刘腊群<sup>3)</sup>

1) (西南科技大学国防学院, 绵阳 621010)

2) (中国工程物理研究院流体物理研究所, 绵阳 621900)

3) (电子科技大学物理电子学院, 成都 610054)

(2013年6月1日收到; 2013年7月1日收到修改稿)

深入研究潘宁放电的物理机制, 研制了全三维高品质算法粒子模拟软件 (PIC), 设计并添加了相应物理情景的蒙特卡罗碰撞模块 (MCC), 并对电子、氢分子离子 ( $H_2^+$ )、氢正离子 ( $H^+$ )、氢三正离子 ( $H_3^+$ ) 同时进行了跟踪, 成功研制了全三维电磁 PIC/MCC 数值算法. 结合国内研究较热的潘宁放电模型, 对该算法进行模拟验证. 模拟结果显示: 采用有效的滤波算法能抑制电磁数值噪声, 电子能量呈麦克斯韦分布, 由于电子的径向漂移和加速导致离子源顶端  $H_2^+$  产量较大.

**关键词:** 潘宁离子源, 高品质算法, 粒子模拟/蒙特卡罗

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

**DOI:** 10.7498/aps.62.205207

## 1 引言

目前, 在国际热核聚变实验堆计划推动下, 大量中性束注入热核聚变实验在世界范围开展, 负氢离子由于其高中性化效率受到国内外热核研究学者的青睐<sup>[1-5]</sup>. 当前国内外研究较热的离子源包括<sup>[3-6]</sup>: Camembert III, JAERI 10 A, 中国原子能研究中心的 15—20 mA 离子源以及潘宁离子源 (Penning ion source). 其中, 前面三种离子源是采用多峰磁场约束粒子, 在模拟计算时可忽略电场, 然而潘宁放电是必须考虑电场的, 因此, 开发自洽计算放电过程中电场变化的算法是必备条件. 当前得到专家认同的此类算法包括静电型和电磁型, 由于离子源模拟时间迭代次数较多、粒子种类较多以及粒子数目较大, 因此全三维的泊松方程数值计算效率和精度无法达到离子源计算的要求. 所以, 只有研制全电磁粒子模拟与蒙特卡罗算法 (PIC/MCC) 才能准确地探索此类离子源放电特性. 综上所述, 本文首先研制高效的全三维高品质电磁 PIC, 然后研

制适合潘宁放电物理及化学变化过程的 MCC, 最后让两者有机结合成 PIC/MCC 算法, 并对国内潘宁源<sup>[6]</sup>进行数值模拟研究.

## 2 算法原理

图 1 为全三维高品质电磁 PIC/MCC 程序设计时序框图, 其中图 1 虚线与左边 5 个文本框所构成的闭合框图为经典粒子模拟软件所述算法流程<sup>[7,8]</sup>. 在此经典算法的基础上, 本文对电磁场的计算算法优化, 即引入高品质算法, 并添加潘宁放电 MCC 程序, 构成了图 1 实线连接的框图. 该算法的具体实现过程: 时间迭代 (如图 1) 和空间迭代 (如图 2). 对于粒子和场的计算采用体积权重法<sup>[7]</sup>; 对于电磁的时域有限差分 (FDTD) 计算采用高品质 FDTD 算法<sup>[9]</sup>; 对于潘宁放电碰撞采用空碰撞模型及相应碰撞类型的动力学处理方法<sup>[8]</sup>, 计算电子与氢分子、氢原子与各类氢分子离子之间的反应物理情景, 跟踪原粒子以及新产生的粒子, 且仅改变粒子的速度信息, 不改变粒子的位置信息.

† 通讯作者. E-mail: ychao1983@126.com

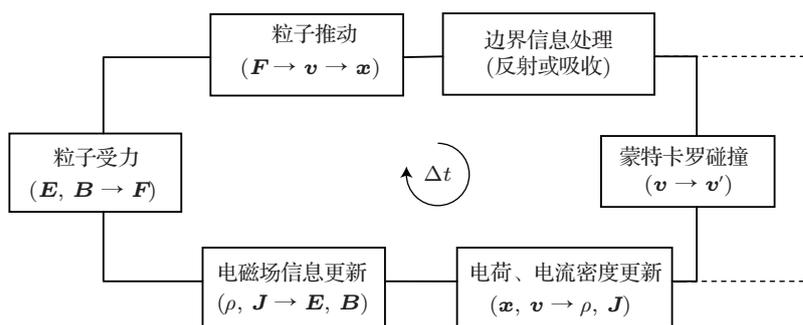


图1 PIC/MCC 程序设计框图

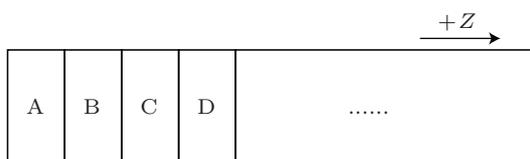


图2 模拟空间划分示意图

### 3 模型及参数

图3所示为潘宁负氢离子源简图<sup>[6]</sup>, 离子源轴向长50 mm, 半径20 mm, 放电室温度300 K, 气压0.6 Pa, 阴阳间电压50 V, 轴向磁场0.01 T, R和Z方向网格1 mm, 角向网格30°, 时间步长为 $9 \times 10^{-13}$  s. 跟踪的离子种类包括: 电子,  $H_2^+$ ,  $H^+$ ,  $H_3^+$  四种(所考虑反应同文献[2]). 电磁场计算分别采用中心差分 and 高品质算法<sup>[9]</sup>, 阴极和对阴极同时发射相同数量电子, 发射面半径为10 mm.

### 4 结果与讨论

图4为阴阳间电压计算结果. 由图4(a)可知, 阴阳间电压无高频干扰, 表明模拟没发散, 并且随着电子打向阳极, 电压逐渐变小. 若采用中心差分算法300 ns时将激发高频振荡(图4(b)所示), 而目前采用高品质算法, 到达 $3 \times 10^{-5}$  s电压也未发散. 主要原因: 在等离子体放电过程模拟研究时, 时间步长通常较短, 模拟达到稳态所需时间较长, 即所需模拟迭代数量较大, 累积误差也会相应增大. 这也是目前2D3V PIC/MCC普遍采用静电型PIC的主要原因, 但是从图4的对比可知, 采用合理的滤波算法可以有效地抑制噪声, 这为同类研究提供了一些宝贵的数值经验.

图5为轴线电场的等位图. 由图5可知, 阴阳间形成加速场, 中间部分呈匀强电场分布, 离子源顶部阴阳间隙呈现了径向电场, 表明电场计算结果符合实际物理情景.

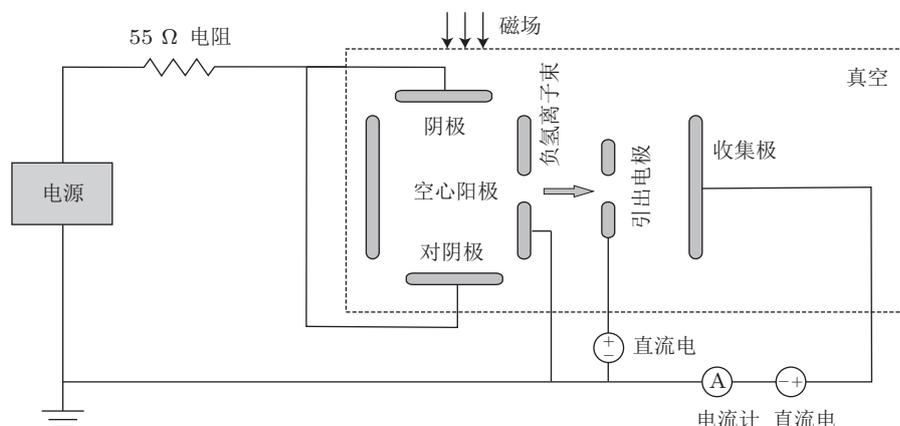


图3 潘宁源放电装置

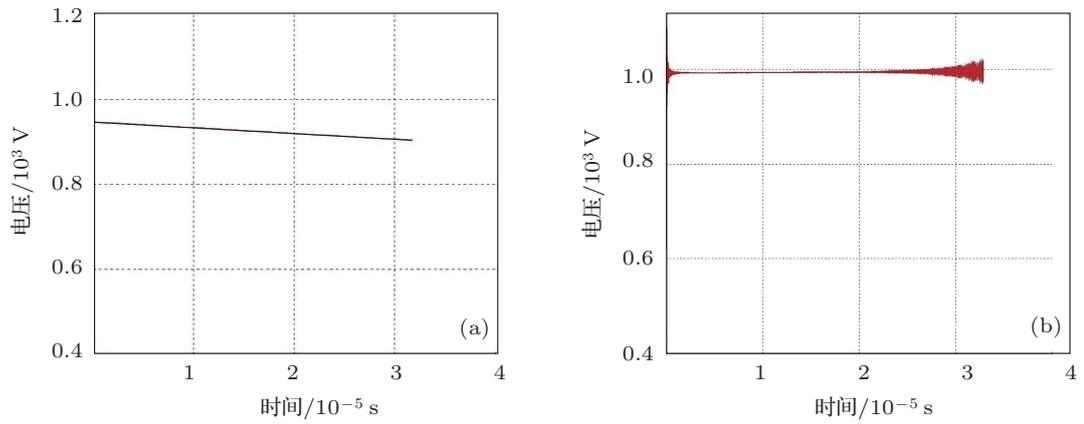


图4 阴阳间电压随时间演化 (a) 高品质算法; (b) 中心差分

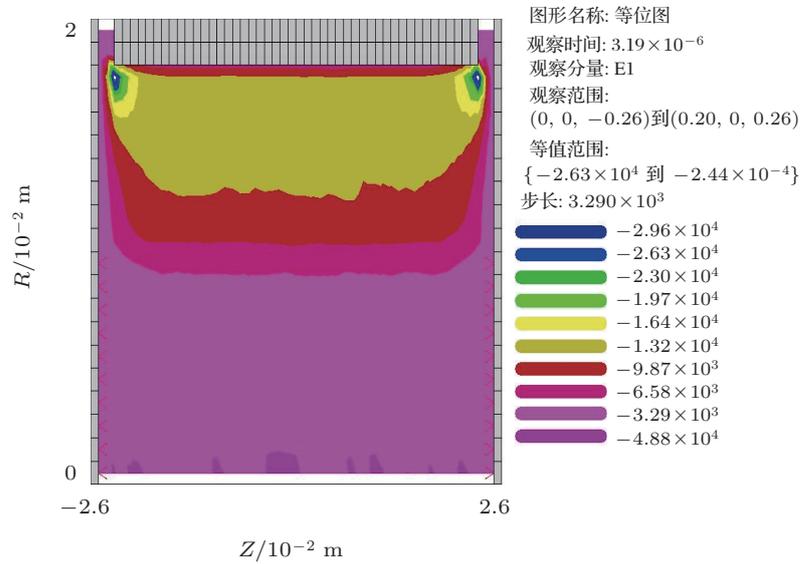


图5 轴向电场分布图

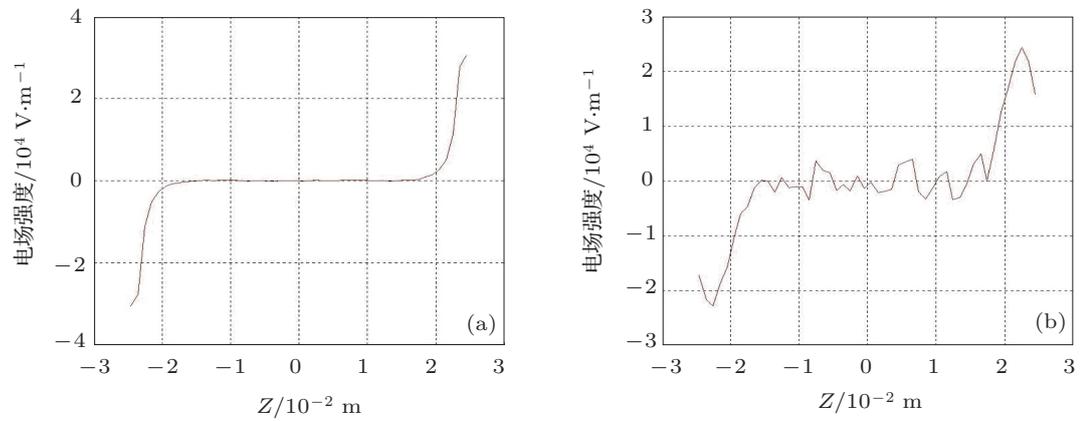


图6 轴向电场空间分布图 (a) 离子源顶部  $r = 20$  mm; (b) 离子源中间部位  $r = 10$  mm

图 6 为轴线电场的空间变化曲线, 其中图 6(a) 和 (b) 分别为 0 度角上  $r = 20 \text{ mm}$  和  $r = 10 \text{ mm}$  处电场值随  $Z$  方向的变化关系. 对比两图可知, 离子源中间区域出现了等离子体振荡, 其主要原因是电子受外加场和空间电荷场的联合作用效果, 然而该振荡激发的电场相对于外加电场较小, 符合等离子体振荡原理.

图 7 为宏电子数随时间的演化. 由图 7 可知, 电子基本保持收支平衡, 即  $3 \times 10^{-5} \text{ s}$  达到稳态. 图 8 为电子能量沉积曲线, 由图 8 可知, 电子的能量分布函数呈麦克斯韦分布, 且平均电子能量为  $3.84 \text{ eV}$ . 此外, 模拟时发现当所加磁场变小时, 平均电子温度增大, 即电子的利用率相对较低. 这一特性符合等离子体放电机理.

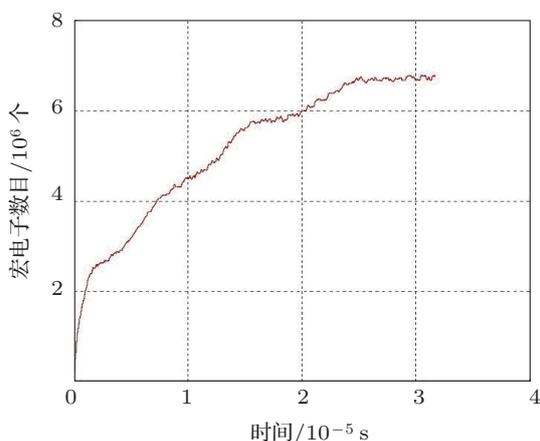


图 7 电子数随时间的演化

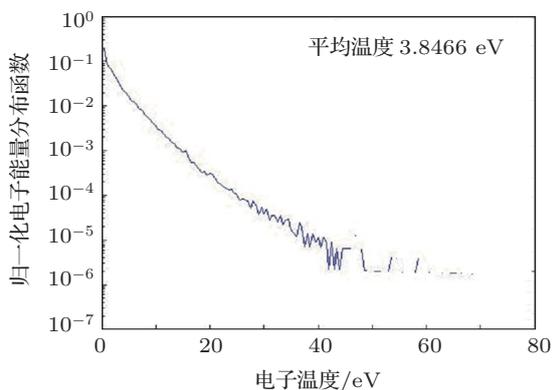


图 8 电子能量分布情况

图 9 为电子相空间分布情况. 由图 9 可知, 电子呈现径向漂移. 究其原因: 结合图 5 可知, 电子发射区域只有轴线电场, 电子在阴极和对阴极间来回运动, 并不断与氢相关粒子碰撞, 产生了径向速度,

而一旦电子进入了  $r = 10\text{--}20 \text{ mm}$  区域, 将在径向电场的作用下沿径向加速. 图 10 为  $\text{H}_2^+$  相空间分布情况. 由图 10 可知, 电子呈现径向加速, 靠近阳极 (即离子源顶部) 区域高能电子较多. 由于  $\text{H}_2^+$  的离解过程所需阈值能量相对较大, 电子沿径向的漂移和加速, 故而顶部产生的  $\text{H}_2^+$  较多. 这表明了该 MCC 算法设计的正确性.

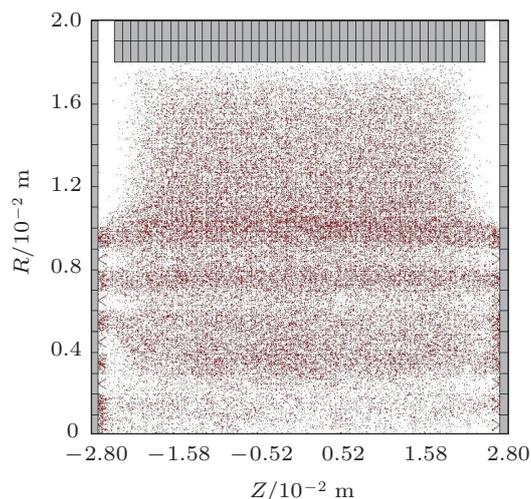


图 9 电子相空间

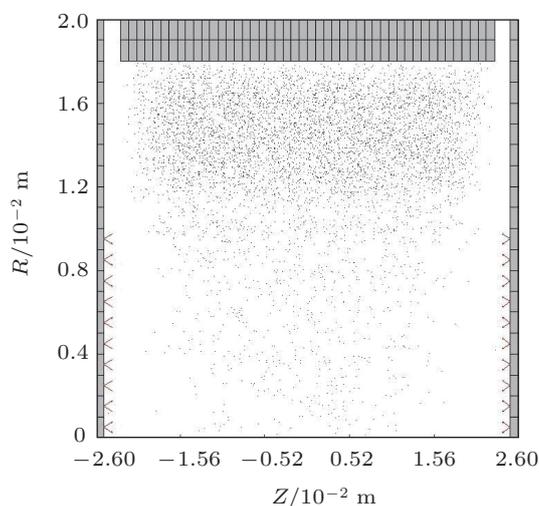


图 10  $\text{H}_2^+$  离子相空间

## 5 结论

本文主要从 PIC/MCC 模拟算法研究入手, 对算法原理进行了介绍, 描述了潘宁放电模型, 用该软件对潘宁放电模型进行了数值模拟研究, 并结合等离子体放电基本理论对模拟结果进行了分析. 分析显示模拟结果与实际物理情景相符.

- [1] Yang C, Wu X B, Liu D G 2012 *Chin. Phys. C* **36** 1013
- [2] Terasaki R, Fujino I, Hatayama A, Mizuno T, Inoue T 2010 *Rev. Sci. Instrum.* **81** 02A703
- [3] Yang C, Liu D G, Xia M Z, Wang H H, Wang X M, Liu L Q, Peng K 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 185205 (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** 185205]
- [4] Fujino I, Hatayama A, Takado N, Inoue T 2008 *Rev. Sci. Instrum.* **79** 02A510
- [5] 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]
- [6] Wang T, Yang Z, Dong P, Long J D, He X Z, Wang X, Zhang K Z, Zhang L W 2012 *Rev. Sci. Instrum.* **83** 063302
- [7] Yang C 2012 *Ph. D. Dissertation* (Chengdu: University of Electronic Science and Technology of China) (in Chinese) [杨超 2012 博士学位论文 (成都: 电子科技大学)]
- [8] Yang C, Wang H H, Chen Y, Xia M Z, Wang X M, Liu D G 2012 *Chin. J. Computat. Phys.* **29** 734 [杨超, 王辉辉, 陈颖, 夏蒙重, 王小敏, 刘大刚 2012 计算物理 **29** 734]
- [9] Liu D G, Zhou J, Yang C, Meng L 2011 *Chin. J. Computat. Phys.* **28** 244 [刘大刚, 周俊, 杨超, 蒙林 2011 计算物理 **28** 244]

# The full three-dimensional electromagnetic PIC/MCC numerical algorithm research of Penning ion source discharge

Yang Chao<sup>1)†</sup> Long Ji-Dong<sup>2)</sup> Wang Ping<sup>3)</sup> Liao Fang-Yan<sup>1)</sup>  
Xia Meng-Zhong<sup>3)</sup> Liu La-Qun<sup>3)</sup>

1) (School of National Defense Science and Technology, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, China)

2) (Institute of Fluid Physics, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China)

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

( Received 1 June 2013; revised manuscript received 1 July 2013 )

## Abstract

In this article, we study the physical mechanism of the Penning discharge, develop a full three-dimensional particle simulation software of high-quality algorithm (PIC), design and add the corresponding physical scenario of Monte Carlo collisions (MCC) module, and track electron, hydrogen molecular ion ( $H_2^+$ ), hydrogen positive ion ( $H^+$ ), and tri-n-hydrogen ion ( $H_3^+$ ) at the same time, and successfully develop a full three-dimensional electromagnetic PIC/MCC numerical algorithm. Combined with the Penning discharge model extensively studied in china, the algorithm is verified through simulation. The simulation results show that the use of effective filtering algorithm can suppress the electromagnetic numerical noise. Electron energy is of Maxwell distribution. Due to the radial drift and accelerate of electrons, the  $H_2^+$  yield is larger at the top of the ion source.

**Keywords:** Penning ion source, high-quality algorithm, particle-in-cell/Monte Carlo collisions

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

**DOI:** 10.7498/aps.62.205207

† Corresponding author. E-mail: ychao1983@126.com