

氢原子传输及负氢离子产生全三维数值模拟研究*

杨超† 刘大刚 王学琼 王小敏 夏蒙重 彭凯

(电子科技大学物理电子学院, 成都 610054)

(2011 年 7 月 6 日收到; 2011 年 8 月 8 日收到修改稿)

理论分析了负氢离子源中性粒子传输特性及引出电极表面产生负氢离子 (H^-) 的物理过程, 研究了引出孔传输率对氢原子传输的影响, 深入剖析了氢原子与不同属性导体壁碰撞以及碰撞后反射的物理情景. 基于 CHIPIC 软件平台, 成功研制了全三维 Particle-in-cell with Monte Carlo Collision 氢原子传输及负氢离子产生物理过程的模拟算法, 并采用 JAEA 10A 负氢离子源进行模拟验证. 模拟达到稳态后, 氢原子平均能量约为 0.57 eV, 且 H 原子呈现 +Y 漂移, 当非均匀氢原子束轰击引出壁时, 导致产生的负氢离子空间分布不均匀. 这些模拟结果都与文献符合, 验证了算法的可靠性.

关键词: H 原子传输, 负氢离子表面产生, Monte Carlo 算法

PACS: 52.65.Pp, 52.50.Dg

1 引言

目前基于全球 ITER 计划, 各国积极开展负氢离子源^[1](如 JAEA 10A) 及等离子体放电^[2,3] 相关研发工作. 为了满足中性束注入 (NBI) 等离子体热核实验的需求, 离子源中引出的离子束必须具备良好的光学特性, 而离子束光学特性好坏很大程度上取决于离子束空间分布的均匀性. 因此, 研究负氢离子源中 H^- 非均匀性的起因以及对离子束非均匀的优化, 成为目前等离子体放电学者感兴趣的问题. 早期的负氢离子源实验研究以及较低维数值模拟研究显示^[4]: 在离子源器壁镀上铯元素, 能产生高束流的 H^- 束, 且在高温电子区产生的 H 较多形成不均匀分布, 当该非均匀分布的 H 束漂移到引出壁将导致 H 与壁反应产生的 H^- 分布不均匀. 本文将采用更贴近实际、更全面的全三维 Particle-in-cell with Monte Carlo Collision (PIC-MCC) 算法探索该物理过程, 以便更好地服务与指导实验. 首先, 采用 Langmuir 探针法得到电子能量和密度分布, 并将其插值到模拟空间用于计算

电子与氢气分子 (H_2) 的碰撞几率, 然后运用 MCC 方法得到 H 的空间分布并对其运动轨迹进行跟踪, 计算 H 在离子源中的能量沉积, 同时揭示表面 H^- 产生的物理过程. 模拟结果显示该数值方法对于中性粒子传输以及 H^- 产生过程模拟是可信的.

2 理论分析及算法实现

2.1 电子能量分布及密度设置

电子的空间轮廓在 Y 方向可按照实验数据^[5] 设置 (如图 1), X 方向均匀. 图 1(a) 为高能电子设置情况, 图 1(b) 为低能电子设置情况. 一旦电子的密度和能量分布给定, 便可计算电子与 H_2 碰撞的几率, 采用 MCC 算法数值计算电子与 H_2 碰撞过程 (表 1 中反应 1), 进而得到 H 的初始空间分布. 根据 Frank-Condon 原理, 电子与 H_2 碰撞所产生的 H 初始能量 E_H 设为 2.15 eV, 其速度按照各向同性设置.

* 国家自然科学基金 (批准号: 11175040) 资助的课题.

† E-mail: ychao@uestc.edu.cn

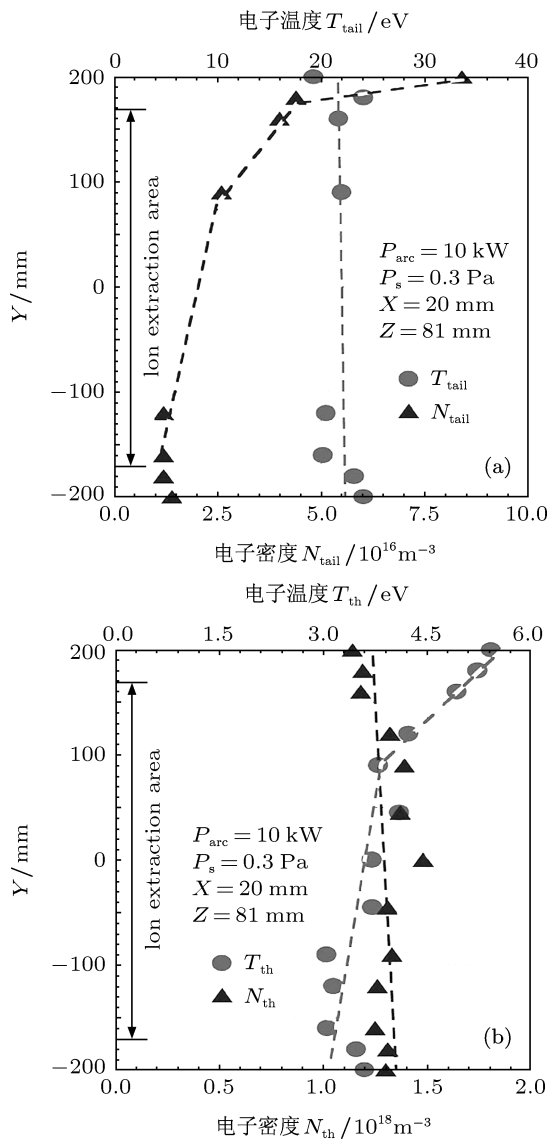


图1 电子能量分布和数密度初始设置

表1 模拟所考虑的碰撞类型

编号	碰撞类型	碰撞前	碰撞后
1	电子碰撞离解	$e+H_2$	$e+H+H$
2	电荷交换	$H+H^+$	H^++H
3	表面产生	$H+e(\text{wall})$	H^-
4	表面复合	$H+H(\text{wall})$	H_2
5	能量损耗	$H+\text{wall}$	H

2.2 氢原子轨迹跟踪算法

在 H 传输 MCC 模块中, 本文将数值求解 H 能量沉积以及 H 与等离子体栅网 (Plasma Grid, PG) 碰撞产生 H^- 的物理过程 (如图 2 所示). 对

于 H 在自由空间的传输过程, 由于实际物理情景是 $H_2^+/H^+ \leq 0.1$, $H_3^+/H^+ \leq 0.1$, 因而本文只需数值求解 H 与 H^+ 之间的交换电荷碰撞 (表 1 中反应 2), 可忽略 H 与 H_2^+ 和 H_3^+ 的交换电荷碰撞. 此外, 由于 H 的自由程较大 [6], 因此不需要考虑 H 与其他粒子的非弹性碰撞. H^+ 能量 E_{H^+} 设为 0.5 eV, 速度分布同样设为各向同性, 可计算交换电荷碰撞后各粒子的速度

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

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

$$\begin{cases} h_x = g_\perp \cos \psi \\ h_y = g_x g_y \cos \psi - g g_z \sin \psi / g_\perp \\ h_z = g_x g_z \cos \psi + g g_y \sin \psi / g_\perp \\ g_\perp = \sqrt{g_y^2 + g_z^2} \\ \cos \chi = \sqrt{1 - R_1} \\ \psi = 2\pi R_2 \end{cases}, \quad (3)$$

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^+} 则为 H 的速度.

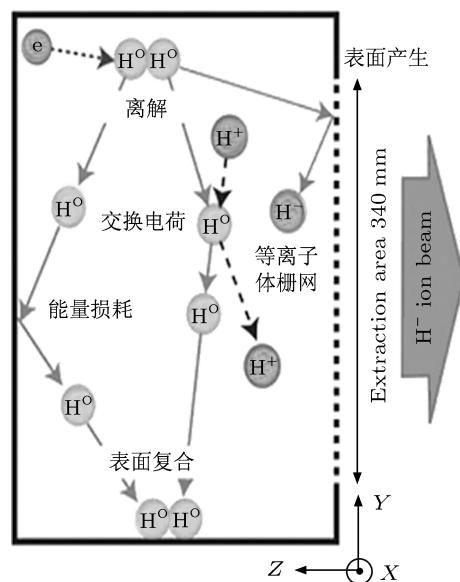


图2 H 轨迹跟踪示意图

随着时间的推移, H 将与离子源边界接触, 由于导体壁的材料属性不同, 其与 H 的反应和碰撞类型也不同, 因而需分别处理. 在 PG 表面上, 通常涂有铯或者钨等金属, 当 H 与该表面接触时, 将在网

格表面激发新粒子 H^- (表 1 中反应 3), 这是 H^- 产生的重要手段. 根据 Rasser 方程可计算出 H^- 的产生率 β_{H^-} [7]

$$\beta_{H^-} = \frac{2}{\pi} \exp \left[-\frac{\pi(\phi_w - E_a)}{a} \sqrt{\frac{m_H}{8E_{HZ}}} \right], \quad (4)$$

其中 ϕ_w 为工作函数, E_a 为 H 的电子吸附能, a 为长程下指数衰减传输率, m_H 为 H 的质量, E_{HZ} 为入射 H 的 Z 方向能量.

考虑到引出电极等离子体势垒的存在, 本文将 H^- 的初始能量设为 3 eV. 其散射方向垂直于 PG 表面, 一旦 H^- 流经引出孔时, H^- 将被人为设置的端口 (port) 淹没, H^- 碰到所有的导体壁都将被反射, 反射满足

$$\begin{cases} \theta_1 = \theta_2 \\ \varphi_1 = \varphi_2 \\ E_1 = E_2 \end{cases}, \quad (5)$$

其中, θ_1, θ_2 分别为入射和反射方向与壁的法向所形成的夹角, φ_1, φ_2 分别为入射和反射方向在壁上的投影与 X 轴所形成的夹角, E_1, E_2 分别为入射和反射时粒子的能量.

当 H 接触除 PG 壁以外的导体壁时, 将会经历表面复合以及能量衰减两个物理过程 (表 1 中反应 4 和 5). 这两个物理过程可以利用 Iron 和 Nickel 提出的反射率和能量衰减率解析公式计算 [8]

$$\begin{cases} R_N = \left[(1 + 3.2116\varepsilon_L^{0.34334})^{1.5} + (1.3288\varepsilon_L^{1.5})^{1.5} \right]^{-1/1.5} \\ R_E = \left[(1 + 7.1172\varepsilon_L^{0.3525})^{1.5} + (5.2757\varepsilon_L^{1.5})^{1.5} \right]^{-1/1.5} \\ \varepsilon_L = 32.55 \frac{m_2}{m_1 + m_2} \times \frac{1}{Z_1 Z_2 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{1/2}} E_{in} \end{cases}, \quad (6)$$

其中, R_N 为 H 反射率, R_E 为 H 能量剩余率, ε_L 为 H 能量衰减量, E_{in} 为入射 H 能量, m_1, Z_1 分别为入射 H 质量和核电荷数, m_2, Z_2 分别为靶粒子 (即铯或钨) 的质量和核电荷数.

此类碰撞具体实现过程: 给定一个均匀随机数 R_3 , 如果 R_N 满足关系 $R_3 < R_N$, H 将被反射, 其

反射能量 E_2 为 E_{in} 与 R_E 的乘积, 假定反射时角向分布符合余弦定律, 即 (5) 式中 θ_2 为一个余弦随机数, 那么根据 (5) 式可跟踪 H 与壁作用后粒子的运动轨迹. 此外, 考虑到引出电极和孔壁的电导率, 本文将引出孔对 H 的传输率 μ_H 设为 0.24, 再给定一个均匀随机数 R_4 , 一旦 H 接触引出孔, 通过比较 μ_H 与 R_4 的数值大小, 如 $R_4 < \mu_H$ 则 H 按照 (5) 式反射进入模拟空间, 否则令 H 与 port 接触而消亡.

2.3 负氢离子轨迹跟踪

H^- 运动方程:

$$m_{H^-} \frac{dv}{dt} = q_{H^-} (E + v \times B) + collision, \quad (7)$$

其中, m_{H^-} , v , q_{H^-} 分别为 H^- 的质量、速度、电量, E 为电场强度, 在准中性近似条件下可将其忽略, B 为磁感应强度, $collision$ 为 H^- 碰撞项 (目前暂且不考虑).

2.4 算法实现

在 CHIPIC 软件平台下, 本课题组已成功研制了全三维 PIC-MCC 算法 [9], 本文将中性粒子传输以及表面碰撞负氢离子产生算法与已有算法进行有机结合, 图 3 是 CHIPIC 中粒子 PIC-MCC 时间流程图. 对于三维空间而言, 粒子存储在一个个平面上, 而每个平面上的粒子又是存放在一个个粒子群包中, 本文根据电子、 H 和 H^- 的荷质比不同对它们分别进行跟踪, 并将不同种类粒子标记为不同颜色便于观察. 时间迭代开始, 程序进入粒子发射模块按照 2.1 节所述发射电子, 此时各粒子群中仅含电子. 当电子进入 MCC 模块可计算氢原子空间分布, 此时各粒子群中包含电子与 H . 随时间推移, 各粒子群进入粒子受力模块, 进而得到各类的空间位置并判断粒子是否接触边界, 然后对碰壁的 H 原子按照 2.2 节所述进行碰撞同时发射电子, H 碰到引出壁后各粒子群中将包含电子、 H 以及 H^- , 再对此 3 类粒子分别 MCC 碰撞、受力和边界信息处理, 照此循环下去, 既能保证各类粒子收支平衡且粒子数量足够多 (满足统计数量要求).

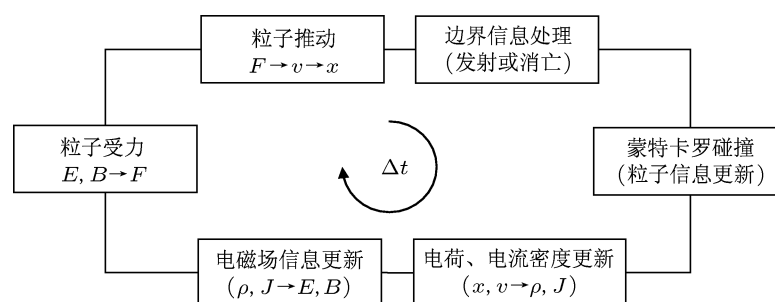


图3 CHIPIC 中 PIC-MCC 时间流程图

3 模拟验证

3.1 参数设置及模型描述

图4所示为JAEA 10A负氢离子源示意图。根据实验条件,模拟时将 H_2 压强设为0.3 Pa,电子密度设为 $5 \times 10^{17} m^{-3}$, X 方向磁场 $B_X = B_0 \exp[-z^2/(2l_B^2)]$,其中, l_B 为0.09 m, B_0 为80 Gs。离子源长0.24 m,宽0.48 m,高0.2 m;引出电极涂元素钨,引出孔开孔区域长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, Z 方向网格大小都设为2 mm。

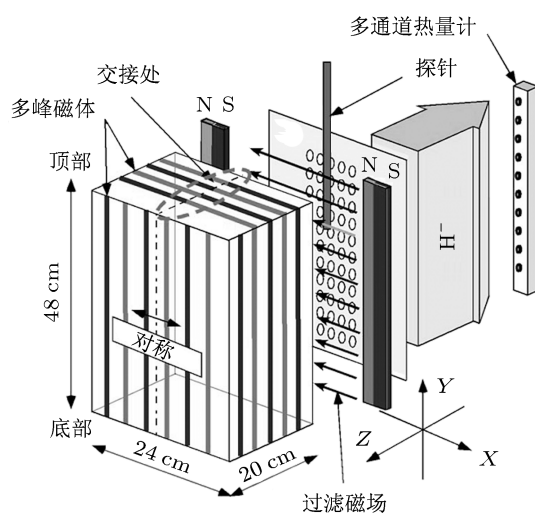


图4 JAEA 10A 离子源

3.2 模拟结果及比对

图5和图6分别是 H 密度和 H^- 密度随时间的演化图。由图5可知,当模拟时间到

达 $2.0 \times 10^{-4} s$ 时, H 收支达到平衡,粒子数密度稳定在 $0.5 \times 10^9 mm^{-3}$ 。由图6知 H^- 也基本达到稳态,其密度约为 $1.8 \times 10^8 mm^{-3}$,表明模拟等离子体达到稳态。

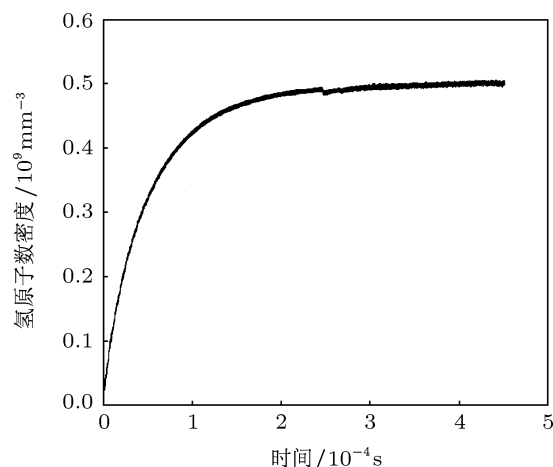
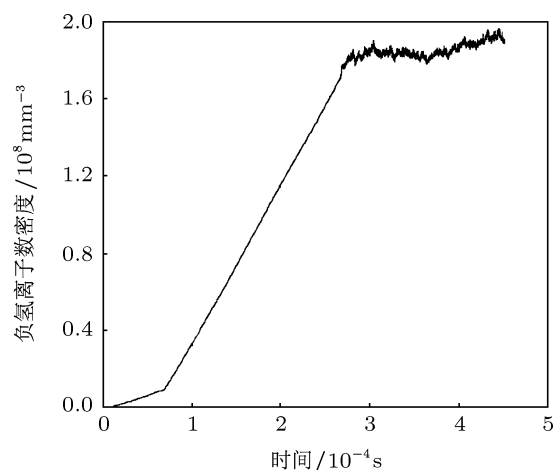
图5 H 密度随时间演化图图6 H^- 密度随时间演化图

图7显示了 H 在 Y 方向的能量分布情况。由

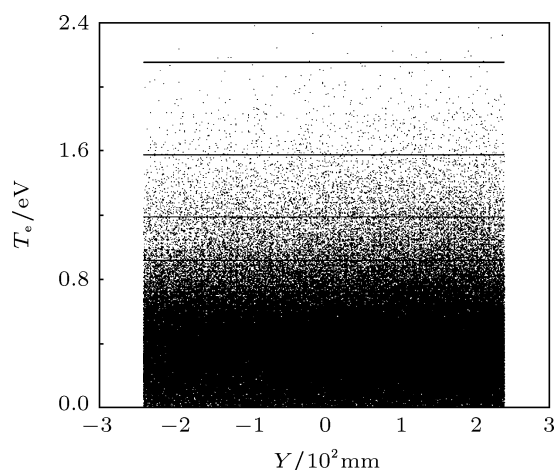


图7 H 能量在 Y 方向的分布

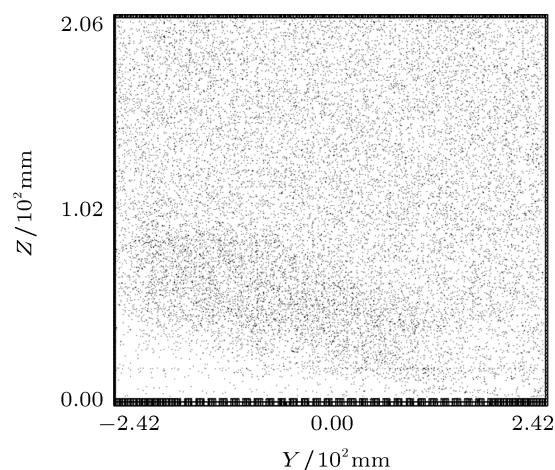
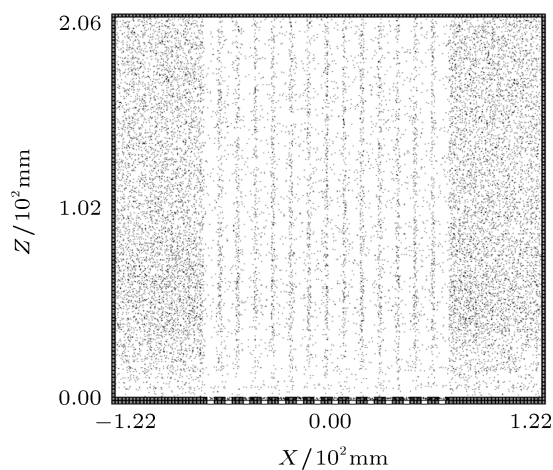
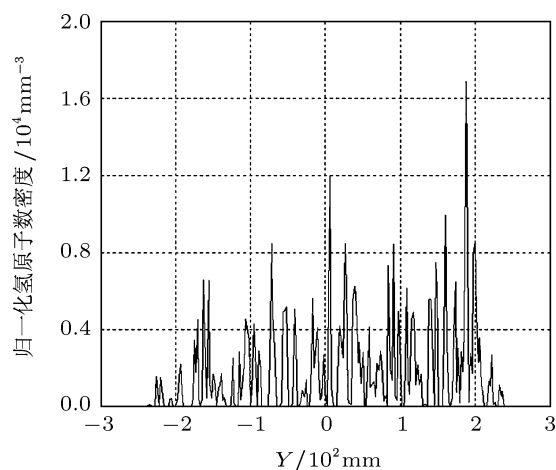
图10 H^- 在 YZ 平面相空间图图8 H^- 在 XZ 平面相空间图图9 $X = 10 \text{ mm}$, $Z = 81 \text{ mm}$ 处 H 随 Y 轴变化

图7可知,从 $Y = -240 \text{ mm}$ 到 $Y = 240 \text{ mm}$ 之间H在低能区分布均匀,在高压区呈现了 $+Y$ 漂移.该规律符合初始设置的电子能量分布情况,即高能态电子 $+Y$ 方向较多.图8显示了 H^- 引出及传输轨迹,由于 H^- 的荷质比相对电子较小,其受微弱磁场影响较小,因而只有正对或靠近引出区域的 H^- 引出效率较高.

图9显示了H在 $X = 10 \text{ mm}$, $Z = 81 \text{ mm}$ 处归一化粒子数密度沿Y轴变化.由图9可知,由于事先设置的电子空间分布不均匀,导致产生的H空间分布不均匀,即初始设置的电子分布呈 $+Y$ 方向漂移,电子与 H_2 反应产生的H也呈现 $+Y$ 漂移.H与引出电极表面碰撞后产生 H^- , H^- 产生后垂直引出面沿Z正向运动,继而被壁反射,当达到稳态后形成如图10所示相空间图,由图10可知在引出区 $+Y$ 部分 H^- 沉积较多,从而证实了 H^- 束空间非均匀分布起因于电子的非均匀分布.

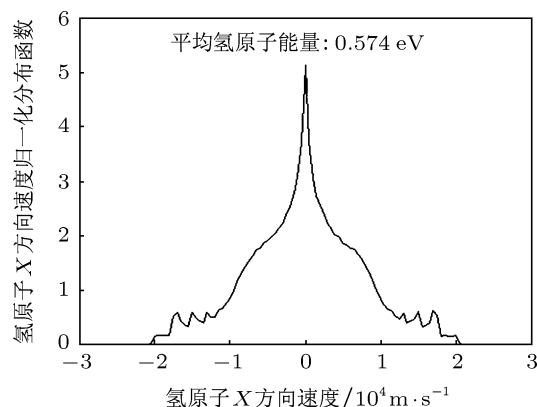


图11 归一化 H 在 X 方向速度分布

表 2 不同物理情景下 H 平均能

H 与壁作用	H 与 H^+ 反应	H 平均能量
不考虑	不考虑	2.15 eV
不考虑	考虑	1.823 eV
考虑	考虑	0.574 eV

图 11 为 H 速度分布律, 由于 H 传输过程中受到来自于壁与其他粒子的作用, 导致其自身能量衰减. 另外, 仅当 H 与引出电极接触或从引出孔逃逸时才不被跟踪, 即每个 H 都参与了较多次碰撞, 因而图 11 符合具体物理情景. 此外, 本文分别在不同物理情景下模拟了 H 能量沉积情况 (见表 2), 这些

结果与文献 [10] 模拟结果符合, 证明了该算法的正确性.

4 结 论

本文理论分析了负氢离子源中电子能量沉积过程, 采用文献数据设置了初始发射电子情况, 分析和研究了 H 和 H^+ 跟踪算法, 并将该算法应用于 CHIPIC 软件平台, 结合国外离子源模拟验证, 模拟结果与文献比对符合较好, 从而验证了算法的正确性.

-
- [1] Terasaki R, Fujino I, Hatayama A, Mizuno T, Inoue T 2010 *Rev. Sci. Instrum.* **81** 02A703
 - [2] Jin X L, Yang Z H 2006 *Acta Physica Sinica*. **55** 5930 (in Chinese) [金晓林, 杨中海 2006 物理学报 **55** 5930]
 - [3] Jin X L, Yang Z H 2006 *Acta Physica Sinica*. **55** 5935 (in Chinese) [金晓林, 杨中海 2006 物理学报 **55** 5935]
 - [4] Takado N, Hanatani J, Mizuno T, Katoh K, Hatayama A, Hanada M, Seki T, Inoue T 2006 *Rev. Sci. Instrum.* **77** 03A533
 - [5] Takado N, Tobari H, Inoue T, Hanatani J, Hatayama A, Hanada M, Kashiwagi M, Sakamoto K 2008 *J. Appl. Phys.* **103** 053302
 - [6] Bonnie J H, Enshuistra P J, Hopman H J 1998 *Phys. Rev. A* **37** 1121
 - [7] Rasser B, Wunnik J N M, Los J 1982 *Surf. Sci.* **118** 697
 - [8] Behrisch R, Eckstein W 1986 *Physics of Plasma-Wall Interactions in Controlled Fusion* (Vol. 131) (New York: Plenum) p413
 - [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] Takado N, Hanatani J, Mizuno T, Hatayama A, Tobari H, Hanada M, Inoue T, Taniguchi M, Dairaku M, Kashiwagi M, Watanabe K, Sakamoto K 2007 *Production and Neutralization of Negative Ions and Beams 11th International Symposium* Santa Fe, New Mexico, USA, September 13–15, 2006 p38

The three-dimensional numerical simulation study of H transmission and negative hydrogen ions production*

Yang Chao[†] Liu Da-Gang Wang Xue-Qiong Wang Xiao-Min
Xia Meng-Zhong Peng Kai

(*University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 610054, China*)

(Received 6 July 2011; revised manuscript received 8 August 2011)

Abstract

The negative hydrogen ion source neutral particle transmission characteristics and the physical processes of the negative hydrogen ion extracted from plasma grid surface are analyzed. The influence of the extraction hole transfer rate which leads to hydrogen atom transmission is studied. A physical phenomenon of collision and reflection between H and different attribution conductor walls is explored. Then based on CHIPIC software platform, a full three-dimensional PIC-MCC simulation algorithm, in which the H transmission and the physical process of negative hydrogen ion production can be simulated, is successfully developed. It is verified by the simulation of JAEA 10A model. While the simulation reaches a steady state, the average energy of H is about 0.57 eV and H presents $+Y$ drift. The non-uniform H beam bombarding the extraction wall leads to the spatial nonuniformity of negative hydrogen ions. These simulation results are consistent with those given in the literature, thereby verifying the reliability of the algorithm.

Keywords: transport processes of H atoms, surface-produced H^- ions, Monte Carlo method

PACS: 52.65.Pp, 52.50.Dg

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

[†] E-mail: ychao@uestc.edu.cn