

Monte Carlo 方法计算微颗粒的 X 射线强度

何 延 才

(中国科学院上海硅酸盐研究所)

曹 立 群

(上海市物资局计算站)

1982年12月27日收到

提 要

本文提出了用颗粒大截面与 Gauss 分布电子束相截来计算颗粒 X 射线强度的方法。电子能量为 20keV, 25keV 时, 对 Al, Cu, Au 等元素的球体、长方体、椭圆柱体、椭球体等规则颗粒计算了特征 X 射线强度。

电子散射的 Monte Carlo 计算是用文献[1]的模型进行的。

引 言

颗粒定量分析在材料科学、矿物鉴别、检测环境污染及生产实践中有重要意义^[2,3]。由于颗粒表面形状各异, 这样著名的 ZAF 定量修正公式将不适用^[2]。尺寸小于电子束直径的颗粒, 还存在大量电子散落在颗粒之外的困难, 这更是 ZAF 方法无法处理的。

一些学者在研究颗粒 X 射线发射方面做了不少工作。Bayard 用 25—50keV 能量较高的电子轰击尺寸较小 (0.5—1 μm) 的颗粒以忽略颗粒的几何因子, 并用标准颗粒与待测颗粒进行比较^[4], 因颗粒形状、组分千差万别, 要研制多种标准颗粒是困难的, 故此法局限性较大。有的用 Monte Carlo 方法作模拟计算^[5,6], 这是一个很大的进展。但未涉及颗粒尺寸小于电子束的重要情形及颗粒中 X 射线吸收计算方法。

本文解决了规则形状颗粒 X 射线强度比值(和标准样块之间)的计算问题, 计算中使用了我们推导的颗粒中 X 射线吸收公式。

原 理

1. Gauss 分布电子束的 Monte Carlo 模拟

入射电子束中电子的分布状态对颗粒特性计算至关重要, 聚焦良好的理想电子束, 电子密度沿径向呈 Gauss 分布^[6]。包括 80% 电子的范围定义为电子束直径^[7]。

Gauss 分布函数 $F(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^x \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\sigma}\right)^2\right] dx$, 当 x 为标准偏差 σ 的 1.28 倍时, 可以得出

$$\frac{\int_{-x}^x \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\sigma}\right)^2\right] dx}{\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{\sigma}\right)^2\right] dx} = 80\%. \quad (1)$$

因此, 若电子束直径为 d , 则 $\sigma = \frac{d}{2.56}$

我们将直角坐标系原点取在颗粒中心, 且让 z 轴平行电子束方向. 则入射到颗粒表面的正态电子初始坐标

$$\begin{aligned} x_0 &= R_G \sigma \cos(R\pi), \\ y_0 &= R_G \sigma \sin(R\pi), \\ z_0 &= f(x_0, y_0). \end{aligned} \quad (2)$$

R 为 $(-1, +1)$ 中均匀分布随机数, R_G 为 Gauss 分布随机数. 对不同形状颗粒, $f(x_0, y_0)$ 有不同形式.

本文用极限近似法^[8]将计算机发出的 R 变换成 R_G .

$$R_G = \frac{\sum_{i=1}^K R_i - \frac{K}{2}}{\sqrt{\frac{K}{12}}}.$$

当 K 充分大时, 数列 R_G 具有 Gauss 随机分布. 我们计算出 10000 个随机点, 每隔 1000 个点分别算出 $1\sigma, 1.28\sigma, 1.80\sigma$ 时所包括的随机点数 n , 和用理论 Gauss 分布函数计算结果十分符合, 见表 1. 图 1 为我们算出的 5000 个随机点的 Gauss 分布 (投影到 xy 平面). 这就证明, 本文所算出的随机点具有 Gauss 分布. 取 1500 个计算点作为入射到颗粒表面 Gauss 分布电子的初始坐标.

表 1 本工作计算的 Gauss 随机点与理论结果比较
(η 为落入给定范围的点数 n 和总入射点数 N 的比值)

η 范围	N 1000	2000	3000	4000	5000	6000	7000	8000	9000	10000	理论 Gauss 函数结果
1.00σ	0.695	0.686	0.683	0.677	0.674	0.671	0.670	0.672	0.673	0.675	0.683
1.28σ	0.813	0.813	0.806	0.798	0.792	0.791	0.792	0.791	0.792	0.794	0.799
1.80σ	0.936	0.936	0.933	0.932	0.932	0.930	0.930	0.928	0.929	0.929	0.928

2. 对颗粒有效作用电子数的计算

若颗粒表面为平面且上下面相互平行 (如立方体、长方体、圆柱体、椭圆柱体等), 则情况很简单, 就以此类颗粒的表面为范围来“俘获”电子. Gauss 分布电子束落入此范围的电子

数即为对颗粒的有效作用电子数。

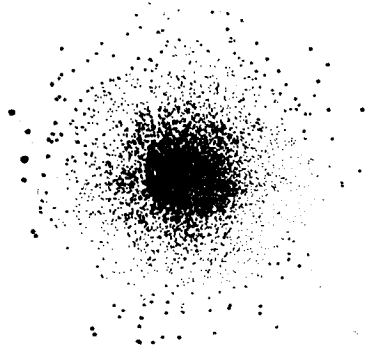


图 1

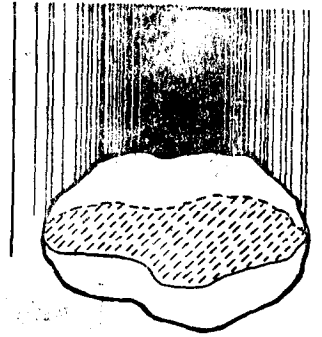


图 2

对于任意形状的颗粒,不管它和电子束处于何种相对方位,总可以在垂直入射电子束方向找到一个最大截面 M ,此截面在 Gauss 分布电子束下截获的电子数,即为对任意形状颗粒的有效作用电子数 n (图 2)。具有规则形状的颗粒,计算很容易。Gauss 分布的电子束落入规则颗粒内的判据为

$$x^2 + y^2 < r^2 \quad \text{球、圆柱体} (r \text{ 为半径});$$

$$|x| < \frac{a}{2} \text{ 及 } |y| < \frac{b}{2} \quad \text{长方体} (a, b \text{ 为边长});$$

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} < 1 \quad \text{椭球体、椭圆柱体} (a, b \text{ 为长短轴}).$$

3. 电子在颗粒中的散射及空间输运过程

颗粒中电子与原子核之间发生的弹性散射采用 Rutherford 散射公式来描述,用 Bethe 的能量损失公式来处理电子非弹性散射。按文献[1]的方法进行 Monte Carlo 计算。

可以证明^[9]电子第 l 步散射时的座标 x_l, y_l, z_l 与第 $l+1$ 步时的座标 $x_{l+1}, y_{l+1}, z_{l+1}$ 之间有如下关系:

$$\begin{aligned} x_{l+1} &= x_l + \delta H (\sin \theta_l \cos \phi_l); \\ y_{l+1} &= y_l + \delta H (\sin \theta_l \sin \phi_l); \\ z_{l+1} &= z_l + \delta H \cos \theta_l; \\ \cos \theta_{l+1} &= \cos \theta_l \cos \beta - \sin \theta_l \sin \beta \cos \gamma; \\ \sin \phi_{l+1} &= \frac{\cos \beta - \cos \theta_l \cos \theta_{l+1}}{\sin \theta_l \sin \theta_{l+1}} \sin \phi_l + \frac{\sin \gamma \sin \beta}{\sin \theta_{l+1}} \cos \phi_l; \\ \cos \phi_{l+1} &= \frac{\cos \beta - \cos \theta_l \cos \theta_{l+1}}{\sin \theta_l \sin \theta_{l+1}} \cos \phi_l - \frac{\sin \gamma \sin \beta}{\sin \theta_{l+1}} \sin \phi_l. \end{aligned} \quad (3)$$

其中 β 为 Rutherford 散射角, θ_l 为散射后位移矢量 $\mathbf{v}_l$ (长度为 δH) 与 z 轴夹角, γ 为方位角, ϕ_l 为 $\mathbf{v}_l$ 在 xy 面的投影与 x 轴夹角, δH 为电子两次散射间平均自由程。

4. 颗粒中 X 射线强度的计算

在能量为 E_0 、电子数为 N 的电子束作用下, 颗粒中 X 射线强度

$$I_p = n \cdot \int_p \omega_x \phi_p(\rho z) d\rho z. \quad (4)$$

n 为落入颗粒大截面内的有效电子数, $\phi_p(\rho z)$ 为颗粒内 X 射线深度分布函数.

$\int_p \omega_x \phi_p(\rho z) d\rho z$ 为单个电子在颗粒中激发的 X 光光子数平均值. ω_x 为 X 光产额. (4) 式右边表示对颗粒体积积分,

$$\int_p \omega_x \phi_p(\rho z) d\rho z = \frac{\sum_{i=1}^n I_i}{n},$$

I_i 是射入颗粒中第 i 个电子激发的 X 光光子数. I_i 大小既决定于散射过程也决定于第 i 个电子入射点初始位置.

若 I_B 表示标样中被激发的 X 射线强度(入射电子能量为 E_0 , 电子数为 N), 则颗粒与标样之间 X 射线强度比为

$$K_p = \frac{I_p}{I_B} = \frac{n \cdot \int_p \phi_p(\rho z) d\rho z}{N \cdot \int_0^\infty \phi(\rho z) d\rho z}.$$

令颗粒中 X 射线吸收路径函数为 $s(x, y, z)$, 则颗粒与标样间经吸收校正的强度比为

$$K_{p,A} = \frac{n \cdot \int_p \phi_p(\rho z) \exp[-\mu \rho s(x, y, z) \csc \phi] d\rho z}{N \cdot \int_0^\infty \phi(\rho z) \exp[-\mu \rho z \csc \phi] d\rho z}, \quad (5)$$

本文计算 X 光光子激发时使用 Worthington-Tomlin 电离截面公式^[10],

$$Q_{k,l} \propto \frac{\ln U_i}{U_i} \cdot \frac{1}{E_{k,l}^2}.$$

$E_{k,l}$ 为 k 层或 l 层电子临界激发电势, $U_i = E/E_{k,l}$ 为过压比.

5. 几种规则颗粒中 X 射线吸收校正计算

颗粒中不同位置产生的 X 光光子在颗粒内的吸收路径 $s(x, y, z)$ 极不规则, 使得 X 射线吸收校正计算非常困难. 理论上可以对 $s(x, y, z)$ 作严格计算, 但由于计算量太大实际上不可能.

我们假定具有轴对称形状的颗粒, 在 Gauss 分布电子束作用下, 其中所产生的 X 光光子集中在颗粒的中轴线上. 实际情况是: 颗粒体中入射电子在散射过程中所激发的 X 光光子越接近 z 轴(即中轴)越密集. 入射电子能量越高、颗粒平均原子序数越低、电子束聚焦越细(或颗粒体尺寸越大), 这一现象越明显. 这样, 可以将 $s(x, y, z)$ 简化为 $s(z)$.

对于长方体、椭圆柱体和椭球体, $s(z)$ 和出射方向在 xy 平面的投影与 a 轴(或 b 轴)的夹角有关. 此时, 我们令长短轴相等, 长度为 a, b 的平均值. 从而避免了颗粒体与 X 射线探测器相对方位变化的困难. 经过对 Al 颗粒(如 $a = 1 \mu\text{m}$, $b = 2 \mu\text{m}$) 一些极端取向的

计算可知, 这一考虑带来的误差小于 1%。

球体的半径为 r ; X 光光子所处位置深度为 Δz ; 吸收路程 s 为

$$s = [r^2 - (r - \Delta z)^2 \cos^2 \phi]^{\frac{1}{2}} - (r - \Delta z) \sin \phi. \quad (6)$$

长方体(长为 a , 宽为 b , 高为 c)及椭圆柱体(长轴为 $a/2$, 短轴为 $b/2$, 高为 c)的公式相同。

$$\begin{aligned} \Delta z < \frac{a+b}{4} \operatorname{tg} \phi \text{ 时, } s &= \frac{\Delta z}{\sin \phi}; \\ \Delta z \geq \frac{a+b}{4} \operatorname{tg} \phi \text{ 时, } s &= \frac{a+b}{4 \cos \phi}. \end{aligned} \quad (7)$$

椭球体的三个轴分别为 a, b, c , c 轴沿 z 坐标。X 光光子所处深度为 Δz 时,

$$\begin{aligned} s = & \left\{ \left[\left(\frac{(a+b)^2}{2} (c - \Delta z) \operatorname{tg} \phi \right)^2 - 4 \left(c^2 + \frac{(a+b)^2}{4} \operatorname{tg}^2 \phi \right) \right. \right. \\ & \times \left. \left(\frac{(a+b)^2}{4} (c - \Delta z)^2 - \frac{(a+b)^2 c^2}{4} \right) \right]^{\frac{1}{2}} - \frac{(a+b)^2}{2} (c - \Delta z) \operatorname{tg} \phi \Big\} / \\ & \left\{ 2 \left[c^2 + \frac{(a+b)^2}{4} \operatorname{tg}^2 \phi \right] \cos \phi \right\} \end{aligned} \quad (8)$$

(6)–(8)式中 ϕ 为 X 射线出射角,

$$\Delta z = (J - 0.5) \delta H. \quad (9)$$

J 为正整数, 表示深度的层数(每薄层厚度为 δH), δH 为 Bethe 路径的百分之一。(9)式来源见文献[11]和[12]。

结果与讨论

入射电子束能量为 20KeV, 25KeV 时(系电子探针常用能量), 计算了球体、立方体(包

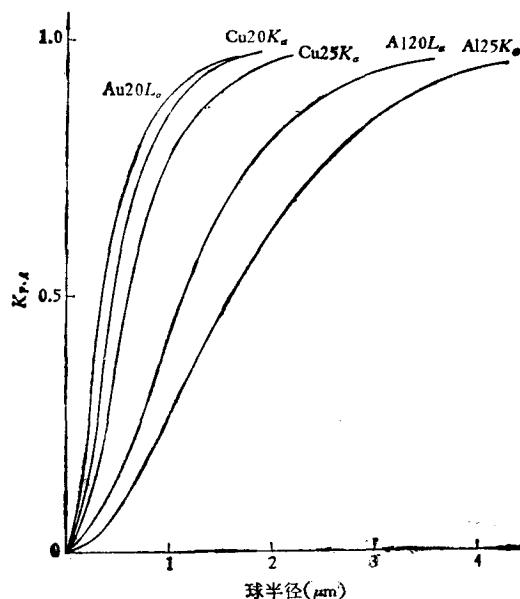


图 3

表 2 球状颗粒 n , PEX_A , $K_{p,A}$ 的 Monte Carlo 计算值(注: 颗粒尺寸 r 为球的半径; 表中 Al 的尺寸均乘以 2)

X 射线 类别	颗粒尺寸 计算项目	$r(\mu\text{m})$						
		0.1	0.3	0.5	0.7	1.0	1.5	2.0
$Al_{20}K_{\alpha}$	n	601	1322	1491	1499	1500	1500	
	$PEX_A \cdot 10^3$	0.0762	0.2578	0.4705	0.7317	0.9706	1.0882	
	$K_{p,A}$	0.0265	0.1971	0.4057	0.6343	0.8420	0.9440	
$Al_{12}K_{\alpha}$	n	601	1322	1491	1499	1500	1500	1500
	$PEX_A \cdot 10^3$	0.0748	0.2513	0.4434	0.6608	1.0094	1.4003	1.5444
	$K_{p,A}$	0.0185	0.1366	0.2718	0.4073	0.6225	0.8636	0.9525
$Cu_{20}K_{\alpha}$	n	295	844	1219	1402	1491	1500	
	$PEX_A \cdot 10^3$	0.1239	0.3760	0.5608	0.6436	0.7071	0.7559	
	$K_{p,A}$	0.0305	0.2648	0.5704	0.7529	0.8797	0.9461	
$Cu_{22}K_{\alpha}$	n	295	844	1219	1402	1491	1500	1500
	$PEX_A \cdot 10^3$	0.1233	0.3867	0.6648	0.8997	1.1171	1.2647	1.3052
	$K_{p,A}$	0.0174	0.1565	0.3885	0.6047	0.7985	0.9095	0.9386
$Au_{20}L_{\alpha}$	n	295	844	1219	1402	1491	1500	
	$PEX_A \cdot 10^3$	0.2619	0.5393	0.6064	0.6404	0.6806	0.7205	
	$K_{p,A}$	0.0680	0.4005	0.6504	0.7900	0.8929	0.9510	
$Au_{22}L_{\alpha}$	n	295	844	1219	1402	1491	1500	1500
	$PEX_A \cdot 10^3$	0.2461	0.7431	0.9668	1.0948	1.1942	1.2431	1.2974
	$K_{p,A}$	0.0352	0.3045	0.5721	0.7451	0.8644	0.9053	0.9448

括长方体)、圆柱体(包括椭圆柱)、椭球体中 AlK_{α} , CuK_{α} , AuL_{α} 等特征 X 射线强度。限于篇幅, 本文仅列出球体和椭球体的计算结果(见表 2 和表 3)

所有计算均将电子束直径取为 $1\mu\text{m}$, 入射电子总数 N 取为 1500。电子束的中心与颗粒的中轴线重合。

图 3 为球状颗粒 $K_{p,A}$ 值计算结果。Al 的 $K_{p,A}$ 值对入射电子能量 E_0 很敏感。原子序数越高, $K_{p,A}$ 随 E_0 的变化越小。

由此可得出如下结论。

1. 电子在颗粒中激发的 X 光光子平均值 PEX (即 $\int_p w_x \phi_p(\rho x) d\rho x$) 与颗粒尺寸、形状存在对应关系。当然, 经过吸收校正计算的值 PEX_A 也有相同的对应关系。如尺寸为 $2\mu\text{m}$ 时, $Al_{20}K_{\alpha}$ 的立方体、圆柱体、球体的 $PEX_A \cdot 10^3$ 值分别为 0.5796, 0.5338, 0.4057, 比例为 1:0.921:0.699; 尺寸为 $1\mu\text{m}$ 时, $Cu_{20}K_{\alpha}$ 的 PEX_A 比例为 1:0.951:0.858; 尺寸为 $1\mu\text{m}$ 时, $Au_{20}L_{\alpha}$ 的 PEX_A 比例为 1:0.963:0.844。而这三种形状体积之比是 1:0.785:0.524。这表明单位体积的球体对 PEX_A 贡献大, 圆柱体次之, 立方体则较差。这是因为

固体中 X 光光子以中心处较为密集。此为颗粒分析中所谓“几何因子效应”(geometry effects), 在定量分析中是不能忽略的。只有当颗粒尺寸相当大时, 此效应才逐渐消失。

表 3 椭球体颗粒 n , PEX_A , $K_{p,A}$ 的 Monte Carlo 计算值
(注: 颗粒尺寸 a, b, c 分别为椭球体的三个轴; 表中 Al 的尺寸均乘以 2)

X 射线 类别	计 算项目	颗粒尺寸 (μm)						
		$a = 0.1$ $b = 0.2$ $c = 0.1$	0.3	0.5	0.75	1.0	1.5	2.0
$\text{Al}_{20}K_{\alpha}$	n	780	1419	1498	1500	1500	1500	
	$PEX_A \cdot 10^3$	0.0806	0.2987	0.5750	0.9221	1.0624	1.1123	
	$K_{p,A}$	0.0364	0.2451	0.4981	0.7999	0.9216	0.9649	
$\text{Al}_{13}K_{\alpha}$	n	780	1419	1498	1500	1500	1500	1500
	$PEX_A \cdot 10^3$	0.0780	0.2827	0.5175	0.8406	1.2035	1.5139	1.5758
	$K_{p,A}$	0.0250	0.1649	0.3187	0.5184	0.7422	0.9337	0.9718
$\text{Cu}_{20}K_{\alpha}$	n	406	1042	1360	1478	1498	1500	
	$PEX_A \cdot 10^3$	0.1363	0.4487	0.6408	0.7178	0.7430	0.7717	
	$K_{p,A}$	0.0462	0.3901	0.7272	0.8852	0.9286	0.9658	
$\text{Cu}_{13}K_{\alpha}$	n	406	1042	1360	1478	1498	1500	1500
	$PEX_A \cdot 10^3$	0.1321	0.4622	0.8415	1.1133	1.2375	1.3177	1.3239
	$K_{p,A}$	0.0257	0.2309	0.5486	0.7888	0.8887	0.9476	0.9520
$\text{Au}_{10}L_{\alpha}$	n	406	1042	1360	1478	1498	1500	
	$PEX_A \cdot 10^3$	0.2997	0.6038	0.6689	0.6954	0.7112	0.7349	
	$K_{p,A}$	0.1071	0.5536	0.8004	0.9043	0.9374	0.9699	
$\text{Au}_{13}L_{\alpha}$	n	406	1042	1360	1478	1498	1500	1500
	$PEX_A \cdot 10^3$	0.3052	0.8493	1.1267	1.1819	1.2541	1.2926	1.3093
	$K_{p,A}$	0.0602	0.4297	0.7439	0.8481	0.9120	0.9413	0.9534

2. Cu 和 Au 等重元素的立方体、圆柱体颗粒, 随着尺寸增大, $K_{p,A}$ 值较容易达到 1, 而同样条件下球体、椭球体的 $K_{p,A}$ 值最后达到 1 的过程很缓慢。这说明重元素中入射电子受到大角度弹性散射事件较多, 因而接近固体表面所激发的 X 光光子也较多。

对于二元及多元合金颗粒, 按本文的方法很容易计算出不同组分时各元素的 $K_{p,A}$ 值。反之, 若通过实验测得 $K_{p,A}$ 值, 用本方法能方便地算出多元系颗粒的组分 (当然要考虑荧光校正, 但颗粒尺寸很小时, 荧光效应可予忽略)。

本文计算中, 取电子束直径为 $1\mu\text{m}$ 。从原则上讲, 用本方法可分析计算尺寸任意小的颗粒的 $K_{p,A}$ 值。但颗粒尺寸比电子束直径小得太多时, 落入此颗粒的电子数 n 及 PEX_A 均很小, 即 $K_{p,A}$ 值极低。在实验中准确测定强度极低的 $K_{p,A}$ 将很困难。因此, 对超细颗粒作定量分析时, 电子束应较细, 以得到较高的 $K_{p,A}$ 值, 减少测量误差。

本文考虑了电子束的实际 Gauss 分布, 因而较为严格准确, 但事先需测定 Gauss 分

布电子束直径, 这是不便之处。还可以用面扫描的方法计算颗粒中 X 射线发射强度。假定具有实际尺寸和分布的电子束分别在标样和颗粒上扫描时, 电子在被扫过面积上的分布是均匀的。这样在作 Monte Carlo 模拟时, 只需给出 xy 平面上均匀分布随机点作为入射电子初始坐标, 也可不必测定电子束直径。颗粒最大截面与标样上扫描面积之比即为 n/N 值。这样处理虽较粗糙, 但计算较简单。作者准备对此方法的可行性作深入研究, 以期找到一个更为简单实用而又可靠的微颗粒 X 射线定量分析方法。

文中所有计算在 WAGN VS 100 计算机上进行, 占 CPU 时间约 80h。

感谢北京大学物理系吴自勤老师对本工作的支持与指导。

参 考 文 献

- [1] 何延才、黄月鸿, 物理, 11(1982), 537.
- [2] K. F. J. Heinrich, D. E. Newbury and H. Yakowitz, eds., Use of Monte Carlo Calculations in Electron Probe Microanalysis and Scanning Electron Microscopy, NBS (U.S). Spec. Publ. 460 (Washington, D.C. 1976).
- [3] K. F. J. Heinrich, ed., Characterization of Particles, NBS(U.S), Spec. Publ. 533 (Washington, D. C. 1980).
- [4] M. Bayard, in Microprobe Analysis, C. A. Andersen, ed., Wiley (New York), (1973).
- [5] J. A. Small, K. F. J. Heinrich, D. E. Newbury and R. L. Myklebust, SEM/1979 (O. Johari, ed.) IITRI, Chicago, ILL. (1979), 807.
- [6] O. C. Wells, Scanning Electron Microscopy, McGraw Hill, New York, (1974), 71.
- [7] A. N. Broers, in Microprobe Analysis, C. A. Anderson, ed., Wiley, New York, (1973), 88.
- [8] 李锡碯著, 实验的数学处理, 科学出版社, (1980).
- [9] L. Curgenvin, and P. Duncumb, Simulation of Electron Trajectories in a solid Target, by a Simple Monte Carlo Technique, Report 303 (Tube Investments Research laboratories, Saffron Walden, Essex, England, July 1971).
- [10] C. R. Worthington and S. G. Tomlin, *Proc. Phys. Soc. (London)* A, 69(1956), 401.
- [11] 何延才、黄月鸿、孙荆、陈裕三, 物理学报, 31(1982), 115.
- [12] Ho Yen-Cai (何延才), Huang Yue-hong (黄月鸿), A Simple Method for Electron Probe Determination of Thickness of Thin Films by Monte Carlo Simulation, SEM/1982, II, O. Johari (ed.), IITRI, Chicago, ILL, p. 559—562.

CALCULATION OF THE X-RAY INTENSITY FROM PARTICLES BY MONTE CARLO SIMULATION

HE YEN-CAI

(Shanghai Institute of Ceramics, Academia Sinica)

CAO LI-QUN

(Computer Station of Material & Equipment Distribution Bureau of Shanghai)

ABSTRACT

Based on the intersection between Gauss electron beam and the largest cross-section of the particles, a method is proposed for calculating the X-ray intensity emitted from particles. The intensity of the characteristic X-rays from particles of the shape of spheroid, cuboid, elliptic cylinder or elliptic spheroid has been calculated for Al, Cu and Au at 20 keV and 25 keV.

Monte Carlo evaluation of the electron scattering was performed using the model put forward in reference (1).

等离子体与外迴路有强耦合的平衡计算

林瑞烟 刘 敏

(中国科学院物理研究所)

1983年4月22日收到

提 要

本文考虑了快放电的特点,用积分方法^[1]解轴对称自由界面平衡方程,并与解迴路方程相结合,求出等离子体与外迴路有较强耦合情况下的平衡位形及位形随时间的演化。

一、引 言

目前,有关求解轴对称平衡方程的一些方法已较定型化。但是,由于这些方法的研究对象——主要是轴对称的托卡马克装置——人们很少考虑等离子体与外迴路有较强耦合的情况。对于快放电的轴对称装置,它的线圈系统本身的迴路电感都较小,等离子体与外迴路线圈有较强的耦合。为了研究这种条件下的平衡问题,本文将自由界面的平衡计算与解迴路方程相结合,对 GBH-1T¹⁾ 装置放电可能得到的位形及位形随时间的演化进行了计算。在此方法基础上,如与实际数据相结合,还可以对实验结果进行分析。

二、基 本 方 程

众所周知,在柱坐标系统中,轴对称的磁流体平衡问题可归结为求解 Grad-Shafranov 方程,在实用单位制中,它有如下形式:

$$L\psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -r\mu_0 j_\varphi, \quad (1)$$

$$j_\varphi = r \frac{dp}{d\psi} + \frac{\mu_0}{2r} \frac{dI^2}{d\psi}. \quad (2)$$

这里 ψ 是角向磁场的流函数,通常可以写为

$$\psi(r, z) = \psi^p(r, z) + \psi^e(r, z). \quad (3)$$

其中 μ_0 为真空磁导率, $\psi^p(r, z)$ 是等离子体电流的角向磁通函数, $\psi^e(r, z)$ 是外线圈电流所产生的角向场的磁通函数, j_φ 是等离子体的环向电流密度, p 是等离子体的压强, I 是环向磁场的流函数。后两者均为 ψ 的函数。它们与 ψ 的关系取决于等离子体的输运过程。在未考虑输运的平衡计算中,我们不妨假设它们与 ψ 分别有如下的关系:

1) GBH-1T 是本所正在建造中的快放电环形轴对称非圆截面等离子体实验装置