

## 气体电离的全三维电磁粒子模拟/蒙特卡罗数值研究\*

王辉辉<sup>†</sup> 刘大刚 蒙林 刘腊群 杨超 彭凯 夏蒙重

(电子科技大学物理电子学院, 成都 610054)

(2012年6月20日收到; 2012年8月1日收到修改稿)

深入研究电子束对中性气体电离的物理机理, 在粒子模拟 (PIC) 软件 CHIPIC 的基础上, 设计了蒙特卡罗 (MCC) 电离碰撞模块, 并对电子与离子同时进行了跟踪, 成功研制了全三维电磁 PIC/MCC 代码. 通过该软件对填充氦气相对论返波管的模拟, 对全三维电磁 PIC/MCC 代码进行验证. 模拟结果显示: 填充气体可以中和空间电荷限制效应, 有效提高电流大小; 填充适量的气体可提高功率峰值, 扩展脉冲宽度; 过量的气体则会缩短脉冲宽度、降低峰值功率.

关键词: 蒙特卡罗碰撞, 粒子模拟, 填充气体, 相对论返波管

PACS: 52.65.-y, 52.65.Pp, 52.35.-g

DOI: 10.7498/aps.62.015207

## 1 引言

微波真空管是最重要的功率微波源之一, 受到国内外学者的广泛关注<sup>[1,2]</sup>. 但在实际工作中, 将不可避免地残留少量气体<sup>[3]</sup>, 不可能维持绝对真空; 再则, 近些年来的研究表明, 填充一定量的中性气体可提高微波管的性能<sup>[4-8]</sup>. 这些现状要求对存在气体的微波管性能进行深入研究. 然而存在气体的微波管中, 电子束与气体将发生电离碰撞, 物理过程复杂, 理论精确分析较为困难, 因而设计一款能准确描述带电粒子与电磁场相互作用以及其电离碰撞过程的全三维电磁 PIC/MCC 软件是十分必要的.

本文深入研究电子束对中性气体电离的物理机理, 在 CHIPIC 粒子模拟软件平台<sup>[9,10]</sup>上, 设计了 MCC 电离碰撞模块, 并对电子与离子同时进行跟踪, 研制了全三维电磁 PIC/MCC 算法, 以填充氦气的相对论返波管为例, 对该软件进行了验证, 接着在返波管中填充不同量的氦气进行模拟对比, 探讨了填充气体对返波管性能的影响.

## 2 电离碰撞模型

当入射电子的能量大于电离阈值时, 入射电子将可能使中性气体分子电离, 电离碰撞发生概率  $P$  为  $1 - e^{-dSn}$ , 其中  $d$  为电子运动距离,  $S$  为电离碰撞截面,  $n$  为中性气体密度<sup>[7]</sup>. 电离过程中, 入射电子的能量除了为电离提供阈值能量外, 剩下的能量分配给散射后的电子及电离产生的新电子.

根据文献<sup>[11]</sup>知, 电离产生的新电子能量  $\epsilon_{\text{new}}$  为

$$\epsilon_{\text{new}} = B(\epsilon_{\text{inc}}) \tan \left[ R \arctan \left( \frac{\epsilon_{\text{inc}} - \epsilon_{\text{ion}}}{2B(\epsilon_{\text{inc}})} \right) \right], \quad (1)$$

式中,  $B(\epsilon_{\text{inc}})$  为已知函数,  $R$  为  $[0, 1]$  之间的均匀随机数. 因而散射电子能量  $\epsilon_{\text{scat}}$  为

$$\epsilon_{\text{scat}} = \epsilon_{\text{inc}} - \epsilon_{\text{th}} - B(\epsilon_{\text{inc}}) \tan \left[ R \arctan \left( \frac{\epsilon_{\text{inc}} - \epsilon_{\text{ion}}}{2B(\epsilon_{\text{inc}})} \right) \right], \quad (2)$$

式中,  $\epsilon_{\text{inc}}$  为入射电子能量,  $\epsilon_{\text{th}}$  为电离阈值能量.

电离后的散射电子与新产生电子的速度方向可采用弹性碰撞模型<sup>[11]</sup>求得:

$$\frac{v'}{|v'|} = \frac{v_{\text{inc}}}{|v_{\text{inc}}|} \cos \chi + \left( \frac{v_{\text{inc}}}{|v_{\text{inc}}|} \times i \right) \frac{\sin \chi \sin \varphi}{\sin \theta}$$

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

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

$$+ \frac{v_{\text{inc}}}{|v_{\text{inc}}|} \times \left( \mathbf{i} \times \frac{v_{\text{inc}}}{|v_{\text{inc}}|} \right) \frac{\sin \chi \cos \varphi}{\sin \theta}, \quad (3)$$

式中,  $\cos \chi = \frac{2 + \varepsilon - 2(1 + \varepsilon)^R}{\varepsilon}$ ,  $\varepsilon$  是电子的能量,  $\varphi$  为  $[0, 2\pi]$  之间的均匀随机数,  $\cos \theta = v_{\text{inc}} \cdot \mathbf{i}$ ,  $\mathbf{i}$  为  $x$  轴单位矢量,  $v_{\text{inc}}$  和  $v'$  分别为入射电子速度和碰撞后电子速度. 若  $\varepsilon$  为散射电子能量, 则  $v'$  为散射电子的速度; 如  $\varepsilon$  为电离新产生的电子的能量, 则  $v'$  为新电子的速度.

离子质量远大于电子, 电离碰撞后其速度因几乎等于碰撞前气体分子的速度, 因而新产生的离子速度按气体温度的麦克斯韦分布分配.

### 3 全三维电磁 PIC/MCC 算法流程

图 1 为全三维电磁 PIC/MCC 基本算法流程. 传统电磁 PIC 算法中, 电荷电流密度更新电场与磁场, 而电场与磁场更新带电粒子的受力情况, 进而更新粒子的速度与位置信息, 从而更新电荷电流密度信息, 形成循环. 而电磁 PIC/MCC 算法中则在电磁 PIC 算法中的粒子速度与位置处理模块与电荷电流密度处理模块之间加入了电离碰撞模块, 该模块处理电离碰撞过程, 产生新粒子, 并对粒子速度进行进一步的更新.

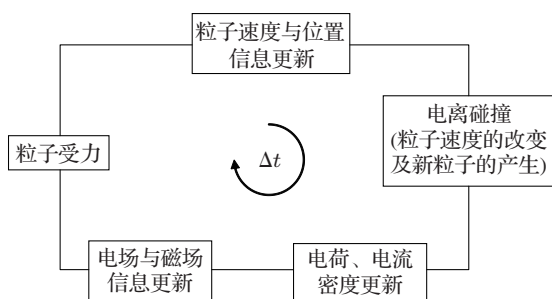


图 1 全三维 PIC/MCC 基本算法流程图

### 4 填充中性气体相对论返波管的全三维电磁 PIC/MCC 模拟

对填充 12 Pa 氦气的相对论返波管进行全三维 PIC/MCC 模拟, 基本结构及粒子空间分布如图 2 所示. 在模拟中, 径向与轴向网格间隔都为 0.5 mm, 角向间隔为  $36^\circ$ , PIC 时间间隔为 0.383 ps, 引导磁场为 2.8 T, 输入电压为 0.3 ns 的上升沿达到并一直维持在 500 kV 的理想情况, 不考虑击穿问题. 由模拟可得此时产生功率频率为 18.53 GHz 的微波.

在电场的作用下, 电子与  $\text{He}^+$  的能量处于同一数量级, 而  $\text{He}^+$  的质量远远大于电子, 因而  $\text{He}^+$  的动量远大于电子, 从而可知  $\text{He}^+$  的回旋半径远大于电子, 由模拟可知, 正离子的横向最大速度在  $1 \times 10^6$  m/s (如图 3(a) 所示) 左右, 在 2.8 T 的磁场下其回旋半径远大于电子束厚度. 这导致  $\text{He}^+$  离子注的厚度大于电子注, 这与图 2 是一致的.

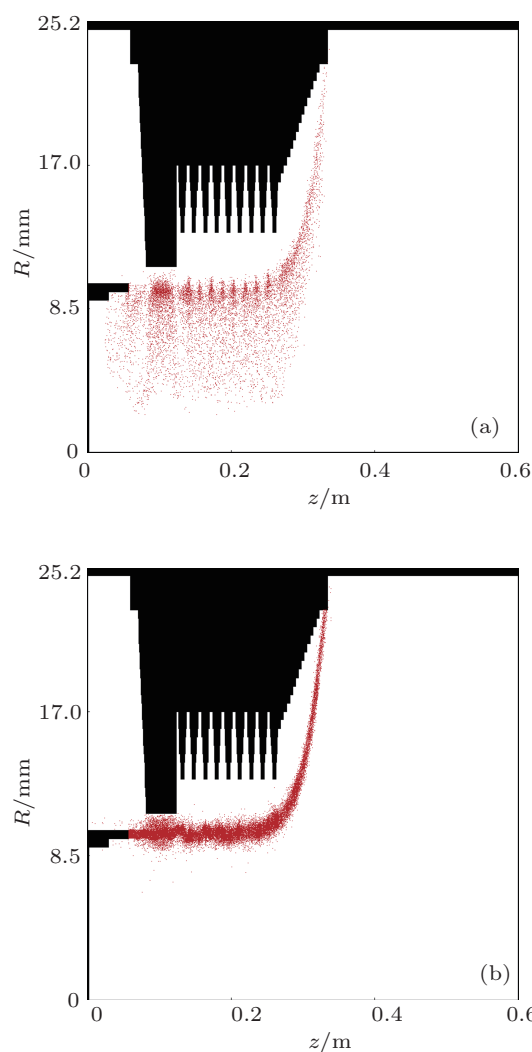


图 2 粒子空间分布图 (a)  $\text{He}^+$ ; (b) 电子

在电子枪与慢波结构之间的加速区, 在电场的作用下, 电子从电子枪处被加速至接近光速进入相互作用区, 如图 3(c) 所示; 而  $\text{He}^+$  离子则反方向从慢波结构处加速至电子枪处, 如图 3(b) 所示. 此外, 图 3 显示, 在慢波结构区, 电子与离子的动量都被电磁场进行了有效的调制, 这是微波产生的关键. 图 3(c) 亦显示, 除了动量被明显调制的电子外, 因电离碰撞, 还存在许多无明显规律散乱分布的电子.

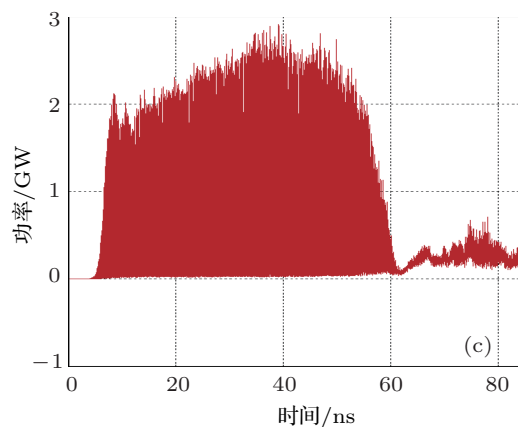
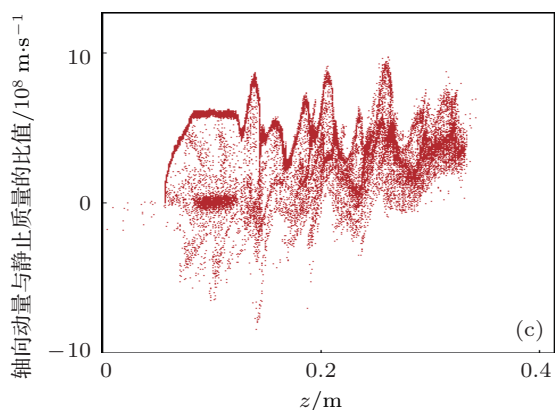
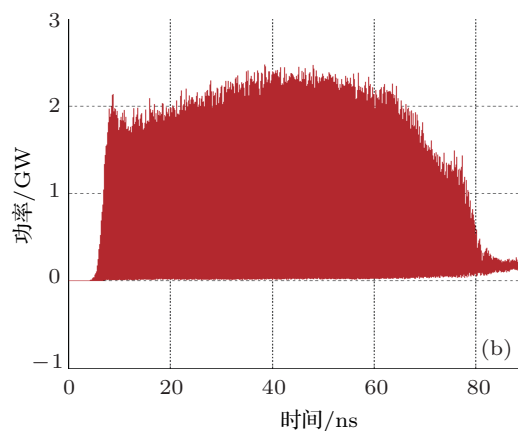
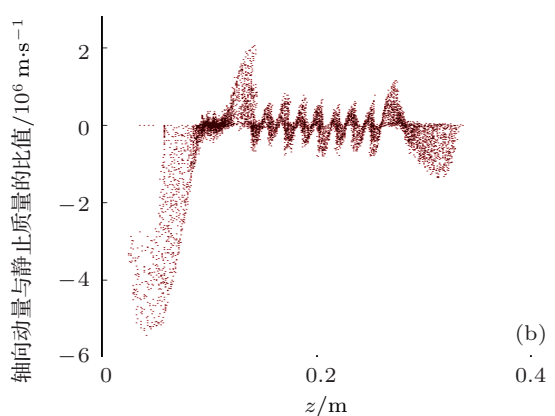
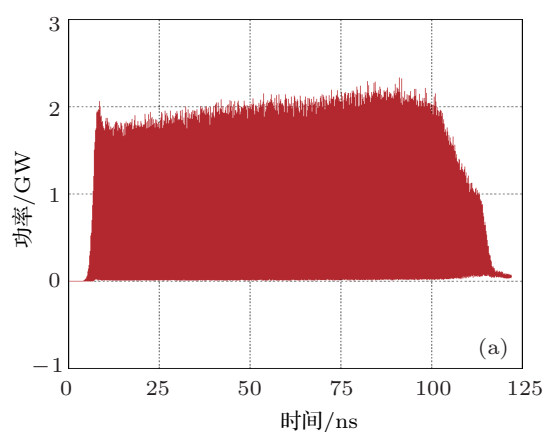
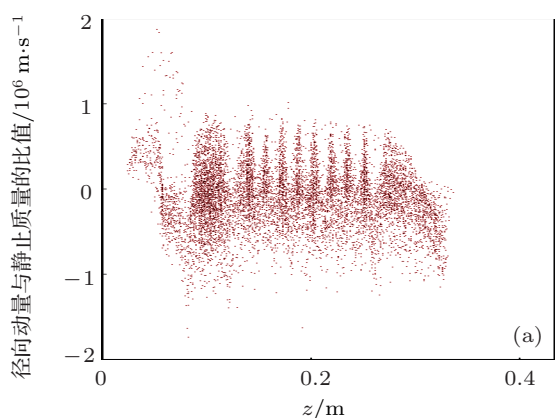


图3 粒子动量相空间图 (a) He<sup>+</sup> 径向动量; (b) He<sup>+</sup> 轴向动量; (c) 电子轴向动量

图4 功率随时间变化图 (a) 2 Pa 氦气; (b) 6 Pa 氦气; (c) 12 Pa 氦气

图4为相同输入电压下填充不同气压氦气得到的功率随时间变化图. 图4显示, 气压2—12 Pa时, 随着气压的增大, 功率峰值出现的时间越来越早, 且其峰值功率下降的时间也越来越早, 该现象与文献 [7] 中描述的规律是基本一致的, 这也验证了本文 PIC/MCC 代码的正确性.

为进一步验证代码及探究填充气体对返波管性能影响的规律, 本文在输入电压 500 kV, 引导磁场 2.8 T 下, 对填充不同量氦气下的返波管进行了更多的模拟, 记录其中电流、脉冲宽度以及峰值功率等信息, 结果如图5所示, 图中横坐标中  $P$  表示氦气的压强值. 电子对气体电离产生的带电粒子将

中和电子束的空间电荷效应,有助于突破空间电荷限制流的约束,将有效增加电流大小<sup>[5]</sup>.图5(a)验证了这一现象,显示电流随着压强 $P$ 的增加而增大,其趋势与文献[8]的实验数据基本一致.脉冲宽度与电子束的质量密切相关<sup>[12]</sup>,图5(b)则显示极微量(0—0.5 Pa)氦气对返波管脉冲宽度几乎没有影响,但当氦气达到一定量(0.5—1 Pa)时,由于电子与氦气电离碰撞产生的离子通道可有效提高电子束的质量<sup>[13]</sup>,使脉冲宽度快速变大,但之后(大于1 Pa)则随着压强的继续增加,电子与氦气的碰撞将

变得剧烈,从而影响电子束的群聚轨迹,反而影响电子束质量,引起脉冲宽度的减小.过量氦气导致的脉冲缩短现象在很多文献中得到了验证<sup>[3,6]</sup>.图5(c)则表示了峰值功率与压强的关系,显示填充少量氦气(0—12 Pa)时,存在文献[4—8]提到的峰值功率上升现象,其峰值功率随着压强的增加而增加.这是因为少量氦气电离产生的等离子体不仅可以提高电子束质量与电流大小,还可有效提高耦合阻抗<sup>[5]</sup>.但填充过量的氦气(大于12 Pa),剧烈碰撞导致电子束质量降低,反而会引起功率下降<sup>[8]</sup>.

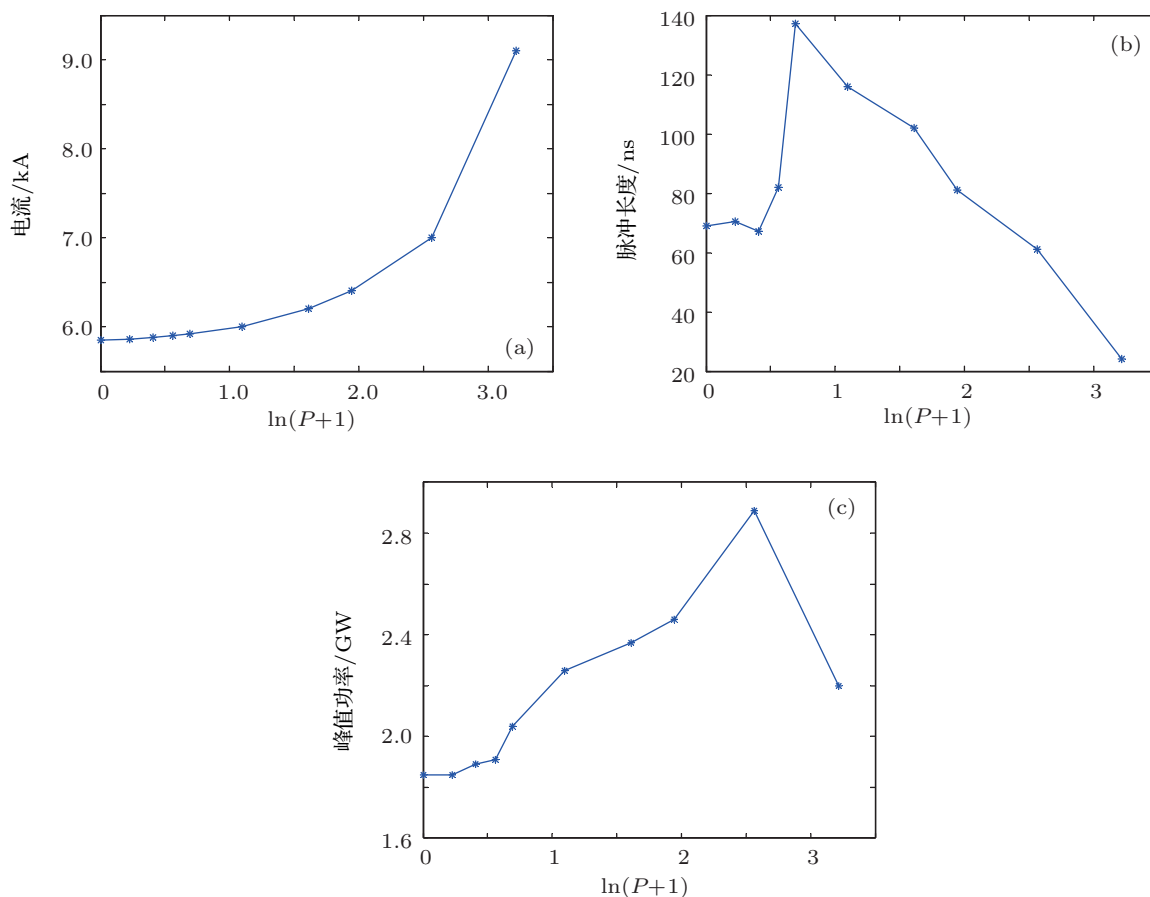


图5 返波管性能与氦气压强的关系 (a) 电流; (b) 脉冲宽度; (c) 峰值功率

## 5 结论

本文深入研究了电离碰撞模型,在Chipic平台下设计了电离碰撞模块,开发了全三维PIC/MCC软件.采用该软件对填充氦气的相对论返波管进行了模拟,其各种粒子的空间分布及动量相空间与理论分析基本一致.并模拟观察到了很多文献提到的现象:填充气体可有效提高电流大小;适量的气体

可提高功率峰值,但过量的气体则会导致峰值功率下降,且会有明显的脉冲宽度缩短现象.模拟结果验证了该代码的正确性,从而为填充气体微波管的继续深入研究提供了软件保证.除了气体电离,当功率较大时,返波管中的击穿问题可能对其性能有较大的影响<sup>[12]</sup>.此外,在填充气体时,击穿产生的电子还可能与气体发生电离碰撞.为更贴近实际,在后续工作中,将对击穿等问题做进一步的研究.

- [1] John H B 2008 *Phys. Plasmas* **15** 055502  
 (in Chinese) [李小泽, 王建国, 董长江, 张海 2008 物理学报 **57** 4613]
- [2] Ma Q S, Jin X, Xu M 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 105201 (in Chinese) [马乔生, 金晓, 绪明 2011 物理学报 **60** 105201]
- [3] Gong Y B, Zhang Z, Wei Y Y 2004 *High Power Laser and Particle Beams* **16** 1567 (in Chinese) [宫玉彬, 张章, 魏彦玉 2004 强激光与粒子束 **16** 1567]
- [4] Qian B L, Li C L, Liu Y G 2000 *J. Appl. Phys.* **88** 3059
- [5] Gregory S N, Yuval C, Thomas M A 1998 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **26** 628
- [6] Zhai X L, Eusebio T, Robert P, Gregory B, Amnon F 1993 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **21** 142
- [7] Li X Z, Wang J G, Dong C J, Zhang H 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4613
- [8] Minami K, Kobayash S, Hayatsu U 2002 *IEEE Trans. Plasma Sci.* **30** 1196
- [9] Peng K, Liu D G, Liao C, Liu S G 2011 *Acta Phys. Sin.* **60** 091301 (in Chinese) [彭凯, 刘大刚, 廖臣, 刘盛纲 2011 物理学报 **60** 091301]
- [10] 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]
- [11] Vahedi V, Surendra M 1995 *Comput. Phys. Commun.* **87** 179
- [12] Gong Y B, Zhang Z, Wei Y Y, Meng F B, Fan Z K, Wang W X 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 3990 (in Chinese) [宫玉彬, 张章, 魏彦玉, 孟凡宝, 范植开, 王文祥 2004 物理学报 **53** 3990]
- [13] Li J, Mo Y 2006 *Phys. Plasmas* **13** 123505

# The numerical study of full three-dimensional particle in cell/Monte Carlo with gas ionization\*

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

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

(Received 20 June 2012; revised manuscript received 1 August 2012)

## Abstract

Based on CHIPIC platform and the ionization physics mechanism between electron and gas, a full three-dimensional particle-in-cell/Monte Carlo (PIC/MCC) code is developed with the MCC ionized collision module. The simulations of a relativistic backward wave oscillator with helium gas are used to verify the code. The results show that the gas can enhance the current, peak power and pulse length, but too much gas leads to the reductions of peak power and pulse length.

**Keywords:** Monte Carlo collision, particle-in-cell, gas filled, relativistic backward wave oscillator

**PACS:** 52.65.-y, 52.65.Pp, 52.35.-g

**DOI:** 10.7498/aps.62.015207

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

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