



## 考虑共振电荷转移的离子引出过程理论研究

卢肖勇 袁程 高阳

### Numerical research on ion extraction with resonant charge exchange process

Lu Xiao-Yong Yuan Cheng Gao Yang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 70, 145201 (2021) DOI: 10.7498/aps.70.20210105

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210105>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

电子的非广延分布对等离子体鞘层中二次电子发射的影响

Effects of  $q$ -nonextensive distribution of electrons on secondary electron emission in plasma sheath

物理学报. 2019, 68(18): 185204 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190225>

材料二次电子产额对腔体双边二次电子倍增的影响

Influence of secondary electron yield of material on two-sided multipactor discharge in cavity

物理学报. 2018, 67(3): 037901 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172119>

激发态电荷转移有机体的多铁性研究

Excited charge-transfer organics with multiferroicity

物理学报. 2018, 67(15): 157509 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180759>

腔体双边二次电子倍增一阶与三阶模式瞬态特性对比

Comparison between the 1st and 3rd order mode temporal characteristics of two-sided multipactor discharge in cavity

物理学报. 2017, 66(20): 207901 <https://doi.org/10.7498/aps.66.207901>

阳极磁屏蔽对阳极层霍尔推力器内磁极刻蚀的影响

Effect of anode magnetic shield on inner magnetic pole etched in anode layer Hall thruster

物理学报. 2019, 68(21): 215202 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190654>

一种非轴对称磁绝缘电子鞘层边界的计算方法

A method to calculate the electron sheath profile of the nonaxisymmetrical magnetic insulation

物理学报. 2017, 66(3): 038402 <https://doi.org/10.7498/aps.66.038402>

## 考虑共振电荷转移的离子引出过程理论研究

卢肖勇<sup>1)†</sup> 袁程<sup>1)2)</sup> 高阳<sup>1)</sup>

1) (核工业理化工程研究院, 天津 300180)

2) (清华大学工程物理系, 北京 100084)

(2021年1月17日收到; 2021年3月8日收到修改稿)

离子引出是激光法分离同位素技术中的关键环节之一, 对产品丰度和产率有重要的影响, 而离子引出中离子和原子间的共振电荷转移过程则会对产品丰度造成污染, 因此在研究离子引出过程时应考虑共振电荷转移的影响. 本文利用粒子模拟 (PIC) 法以及基于 PIC 法和杂化 PIC 法的混合算法研究了考虑共振电荷转移的电场法离子引出过程, 通过对一维平行板法的引出方式进行数值计算, 获得了离子引出过程中共振电荷转移的基本性质和关键影响因素——共振电荷转移截面、引出时间、背景原子密度和蒸气宽度, 并据此得到了离子发生共振电荷转移比例的经验公式; 二维工况下的平行板法、交替偏压法、II 型电场法和 M 型电场法四种引出方式的计算结果则表明, 在其他条件相同的情况下, M 型电场法具有最小的离子引出时间和共振电荷转移损失比例. 本文的研究结论对于指导激光法分离同位素技术中离子引出装置设计和实验工艺设计具有比较重要的参考意义.

**关键词:** 共振电荷转移, particle-in-cell 法, 鞘层, 屏蔽层

**PACS:** 52.20.Hv, 52.65.Ww, 52.65.-y

**DOI:** 10.7498/aps.70.20210105

## 1 引言

离子引出过程是激光法分离同位素技术 (laser isotope separation, LIS) 的核心环节之一, 由光电离产生的离子的引出率直接关系到最终产品的产率, 同时离子引出过程中的各种碰撞过程则会对产品的产率和丰度组成造成影响<sup>[1]</sup>. 其中, 关于离子引出率的研究结论已经比较明确, 之前的学者通过理论和实验的手段获得了诸多影响离子引出率的关键因素<sup>[2-9]</sup>: 引出电压、等离子体密度、等离子体尺寸、电子温度、磁场<sup>[10-14]</sup>等等. 但是关于其中碰撞过程的研究则相对较少, 研究结论也有较大的差异<sup>[15,16]</sup>, 因此考虑碰撞的离子引出过程还有待进一步的研究.

离子引出过程中主要存在以下碰撞过程: 光电

离生成的离子和未电离原子间的碰撞 (共振电荷转移过程)、电子与未电离原子间的碰撞 (二次电离过程)、光电离生成的电子与离子的碰撞 (复合过程). 其中复合过程会使精料量下降, 共振电荷转移过程和二次电离过程则会影响产品的同位素丰度组成, 从而影响分离效果. 由于二次电离过程和复合过程对离子总量的影响远小于共振电荷转移过程的影响<sup>[15]</sup>, 因此在本文的研究中仅考虑共振电荷转移过程对离子引出的影响.

本文采用 PIC (particle in cell) 法、以及基于 PIC 法和杂化 PIC 法的混合算法研究了一维和二维情况下考虑共振电荷转移的离子引出过程. 在一维模拟中重点关注了共振电荷转移过程的特征和主要影响因素, 并根据模拟结果和理论分析给出了离子发生共振电荷转移比例的经验公式; 在二维模拟中分析了平行板电场法、交替偏压法、II 型电场

† 通信作者. E-mail: lu-xy15@tsinghua.org.cn

法和 M 型电场法等四种常见构型下的离子引出过程, 获得了各构型下离子发生共振电荷转移的比例, 并基于离子引出效率和共振电荷转移比例对上述构型进行了对比评价.

## 2 数学模型

PIC 方法是一种直接从第一性原理出发的等离子体粒子模拟方法 [17,18], 其模拟的流程图如图 1 所示. 在完成模拟空间的参数设置、网格划分和粒子信息初始化之后, 计算基本流程如下:

- 1) 将网格内宏粒子的电荷分配到网格点上获取网格点的电荷和电流;
- 2) 根据网格点上的电荷和电流以及边界条件求解电磁场方程获取网格点上的电磁场;
- 3) 根据网格点上的电磁场插值得到宏粒子的受力;
- 4) 根据经典运动方程或相对论计算得到宏粒子在下一时刻的速度和位置;
- 5) 处理共振电荷转移.

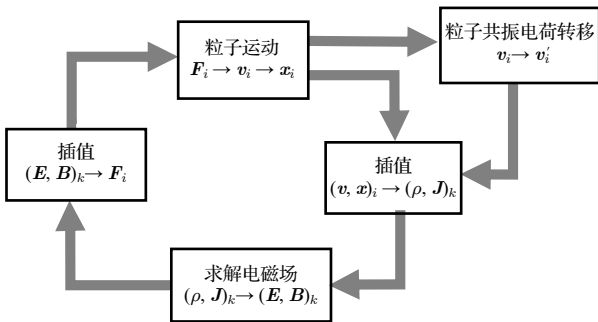


图 1 PIC 法计算流程图

Fig. 1. Schematic diagram of PIC method.

杂化 PIC 方法则是在 PIC 方法的基础上假设电子处于平衡态, 仅计算离子的运动过程. 由于不需要跟踪电子的运动, 因此杂化 PIC 法的计算量远小于 PIC 法. 混合算法是作者在处理电场法离子引出问题时提出的一种综合 PIC 法和杂化 PIC 法的方法, 相较于 PIC 法, 混合算法的计算效率更高, 同时比杂化 PIC 法的适用范围更大, 该算法的详细介绍可参见文献 [19].

离子引出过程中, 在一个模拟时间步长  $\Delta t$  内, 离子与背景原子的共振电荷转移几率  $P_{ia}$  为:

$$P_{ia} = 1 - \exp[-\sigma_{T,ia}(v_{ia}) n_a(\mathbf{r}) v_{ia} \Delta t], \quad (1)$$

其中,  $\sigma_{T,ia}(v_{ia})$  为相对速度为  $v_{ia}$  的离子和原子的

共振电荷转移截面,  $n_a(\mathbf{r})$  为位置  $\mathbf{r}$  处原子的数密度. 为了提高数值计算效率, 带电粒子和中性粒子的共振电荷转移采用零碰撞 (null collision) 技术以避免遍历每个宏粒子.

## 3 模拟结果及分析

### 3.1 一维离子引出过程

本节以一维平行板电场法离子引出为例, 其示意图如图 2 所示. 在未做额外说明的情况下, 均采用如下的计算条件: 极板间距  $L = 5 \text{ cm}$ ; 在未电离前, 金属蒸气在极板间均匀分布, 其原子数密度为  $4.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ ; 金属蒸气中同时存在 A, B 两种同位素 (其中同位素 A 为目标同位素), 其丰度均为 50%, 两种同位素的相对原子质量均取为 200 (这种取法不会影响最后的结论). 等离子体宽度为  $L_p = 3 \text{ cm}$ , 位置位于极板中心, 其初始密度分布为均匀分布. 电子温度为 0.5 eV, 背景气体中的原子和电离产生的离子温度均为 0.1 eV. 本节共计算 5 个典型算例, 其中同位素 B 的电离率均为 0, 同位素 A 的电离率、初始离子密度和相应的引出电压等参数详见表 1. 共振电荷转移截面取  $2.0 \times 10^{-14} \text{ cm}^2$ , 虽然实际的共振电荷转移截面与离子和原子相对速度有关 [20], 但是这种取法不影响本文的结论. 计算时考虑了光电离导致的光作用区内同位素 A 原子数密度的降低.

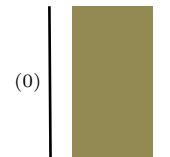


图 2 一维平行板电场法离子引出示意图

Fig. 2. Schematic diagram of one dimensional electric ion extraction of parallel type.

表 1 一维算例的计算条件

Table 1. Simulation parameters in onedimensional cases.

算例	计算参数			
	同位素 A 电离率/%	初始离子密度/( $10^9 \text{ cm}^{-3}$ )	引出电压/kV	背景原子密度/( $10^{11} \text{ cm}^{-3}$ )
1	2.5	5.0	2.0	4.0
2	2.5	5.0	1.0	4.0
3	5.0	5.0	2.0	2.0
4	1.25	5.0	2.0	8.0
5	50	100.0	10.0	4.0

计算时采用的网格数为 1000, 网格宽度为  $5 \times 10^{-5}$  m, PIC 法和杂化 PIC 法的时间步长分别为 100 ps 和 1 ns; 该算法已在作者之前工作中通过检验空间步长、时间步长和粒子数的方式完成收敛性检验, 详见文献 [19].

图 3 所示为考虑共振电荷转移条件下, 算例 1 计算区域内的剩余离子/电子比例随引出时间的变化曲线, 为了方便比较, 图 3 中同位素 B 显示的结果为实际结果的 100 倍 (下同). 图 4 为离子沉积至两侧收集板时的能量分布, 其中图 4(a) 的显示范围为 0—2.5 keV, 图 4(b) 为 0—20.0 eV. 作为对比, 图 4 中也给出了未考虑共振电荷转移时的计算结果. 图 4(a) 中的计算结果表明, 当考虑共振电荷转移时, 同位素 A, B 的离子沉积能量分布可分为三部分: 第一部分离子的沉积能量集中在 2.0 keV 附近; 第二部分在 0—2.0 keV 之间近似均匀分布; 第三部分集中在 0 keV 附近. 当不考虑共振电荷转移时, 同位素 A 离子的沉积能量只有集中在 0 和 2.0 keV 附近的两部分. 这种现象解释如下.

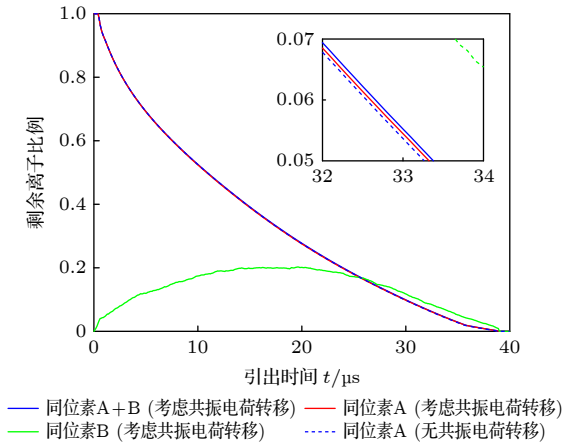


图 3 剩余离子比例随引出时间的变化曲线 (算例 1)

Fig. 3. Plots of remaining ion ratio versus extraction time (Case 1).

不考虑共振电荷转移时, 同位素 A 离子在向负极板运动时被电场加速, 由于鞘层两侧的电势差约为 2.0 kV, 因此从负极板引出的离子能量集中在 2.0 keV 附近. 同时, 正极板附近也会形成微小的鞘层, 小部分被正极板引出的离子的能量为数电子伏, 在图 4(b) 中则表现为沉积能量集中在 0 keV 附近. 当考虑共振电荷转移时, 由于引出开始时等离子体中没有同位素 B 离子, 因此引出过程中的同位素 B 离子均由共振电荷转移产生. 由同位素

B 离子的沉积能量分布可以看出, 一部分共振电荷转移发生在屏蔽层中, 因此被引出至收集板时离子的沉积能量集中在 2.0 和 0 keV 附近 (原理同上); 另一部分共振电荷转移发生在鞘层中, 因此被引出至收集板时同位素 B 离子能量在 0—2.0 keV 之间. 同位素 A 离子的能量分布与同位素 B 类似, 与不考虑共振电荷转移时的计算结果相比, 一部分同位素 A 离子的沉积能量分布在 0—2.0 keV 之间, 这是由同位素 A 离子在鞘层中与同位素 A 原子发生共振电荷转移作用所致.

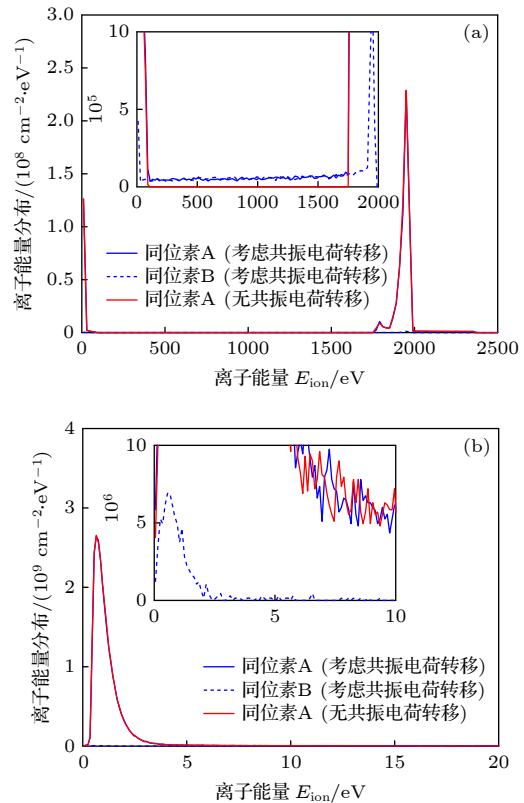


图 4 两侧收集板上的离子沉积能量分布 (算例 1) (a) 整体图; (b) 局部放大图

Fig. 4. Energy distribution of ions deposit on the collection plates (Case 1): (a) General distribution; (b) local distribution.

由于发生共振电荷转移的离子和原子只交换电荷, 不交换速度, 因此发生在鞘层中的共振电荷转移相当于使鞘层中离子的平均速度减小了, 从而使离子引出速率略微变慢. 只是由于在鞘层中发生共振电荷转移的离子比例较低, 因此引出速度的下降幅度十分微弱, 如图 3 所示. 屏蔽层中的共振电荷转移则无此影响. 同位素 B 剩余离子比例则受到其产生速率和引出速率的共同影响, 因此呈现先增加后减少的趋势.

图 4 中还有两个现象需要解释: 一是同位素 A 离子的沉积能量分布曲线中 2.0 keV 位置处的能量峰左侧均有一个小峰, 这是由于离子引出过程中鞘层形成阶段鞘层内电势波动造成的<sup>[19]</sup>, 同位素 B 离子的沉积能量曲线对应能量处未出现明显峰型, 其原因是同位素 B 离子是由共振电荷转移过程产生, 鞘层形成阶段产生的同位素 B 离子量少, 因此其沉积能量曲线在 2.0 keV 附近无其他明显的能量峰; 二是两种同位素 2.0 keV 位置处的能量峰不是左右对称的, 左侧偏大, 且 2.0 keV 能量峰峰值处的离子能量小于 2.0 keV, 这是由于鞘层剥离和离子在其中的加速运动同时进行, 离子在加速运动中感受到的电场会逐渐减小, 因此电场传递给离子的能量小于 2.0 keV. 图 5 所示为算例 1 改变不同初始等离子体密度时, 离子运动至两侧收集板时的能量分布. 可以看出, 随着初始等离子体密度的增加, 鞘层剥离速度变慢, 因此能量峰的位置逐渐接近 2.0 keV.

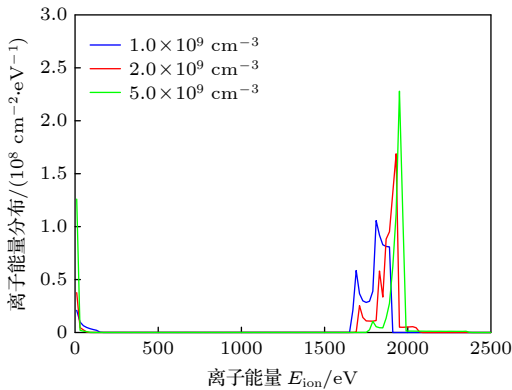


图 5 不同初始等离子体密度条件下, 两侧收集板上的离子沉积能量分布 (算例 1)

Fig. 5. Energy distribution of ions deposit on the collection plates with several initial plasma densities (Case 1).

由于同位素 A 离子与 A 原子之间的共振电荷转移不会影响最终产品的丰度, 因此以下部分只研究同位素 A 离子与 B 原子之间的共振电荷转移过程. 图 6 所示为引出电压分别取 1.0 和 2.0 kV (分别对应算例 1 和算例 2) 时, 剩余离子比例随引出时间的变化曲线, 图 7 给出了相应条件下极板上离子沉积能量分布曲线. 当引出电压分别为 1.0 和 2.0 kV 时, 同位素 A 离子中发生共振电荷转移的比例分别为 1.278% 和 1.151%, 其中, 在屏蔽层中和鞘层中发生的比例分别为 0.663% 和 0.615% (1.0 kV), 0.371% 和 0.780% (2.0 kV), 计算结果如

表 2 所列. 结合图 6 中的剩余离子比例随引出时间的变化曲线和 (1) 式, 可以得到如下结论: 在其他条件不变的情况下, 随着引出电压的升高, 引出时间减小, 离子在屏蔽层中运动的路程减小, 从而使离子屏蔽层中发生共振电荷转移的几率下降 (0.663%  $\rightarrow$  0.371%). 当引出电压分别为 1.0 和 2.0 kV 时, 从负极板引出的离子的比例分别为 70.24% 和 84.62%, 由此可得由负极板引出的离子在通过鞘层时发生共振电荷转移的几率从 0.876% 升至 0.921%, 这是因为引出电压的升高使更多的离子由负极板引出, 导致从负极板引出的离子在鞘层中的平均运动路程增长, 发生共振电荷转移的几率升高. 因此随着引出电压的增加, 通过鞘层的离子比例增加, 且离子在鞘层中的平均运动路程略有增长, 这两个原因导致离子在鞘层中发生共振电荷转移的几率增大.

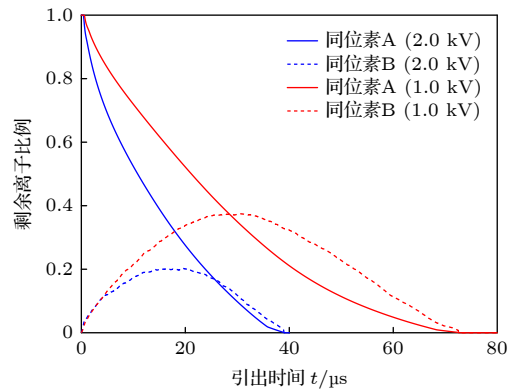


图 6 不同引出电压条件下, 剩余离子比例随引出时间的变化曲线 (算例 1 和算例 2)

Fig. 6. Plots of remaining ion ratio versus extraction time with several applied voltages (Case 1 and Case 2).

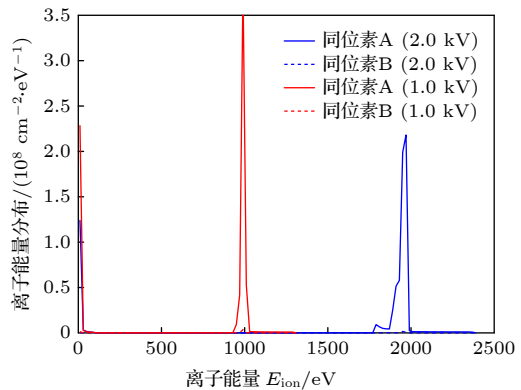


图 7 不同引出电压条件下, 两侧收集板上的离子沉积能量分布 (算例 1 和算例 2)

Fig. 7. Energy distribution of ions deposit on the collection plates with several applied voltages (Case 1 and Case 2).

表 2 各算例的数值计算结果和公式评估结果  
Table 2. Simulation and empirical formula results of several simulation cases.

算例	引出时间/ $\mu\text{s}$	负极板引出离子比例/%	共振电荷转移的比例			
			鞘层/%	通过鞘层发生共振电荷转移的比例/%	屏蔽层/%	总比例/%
1	37.23	84.62	0.780 (0.846)	0.921 (1.000)	0.371 (0.395)	1.151 (1.241)
2	66.78	70.24	0.615 (0.702)	0.876 (1.000)	0.663 (0.691)	1.278 (1.393)
3	37.20	84.61	0.384 (0.423)	0.454 (0.500)	0.192 (0.200)	0.576 (0.623)
4	37.36	84.65	1.151 (1.693)	1.784 (2.000)	0.740 (0.785)	2.250 (2.478)
5	51.62	75.78	0.654 (0.758)	0.864 (1.000)	0.549 (0.533)	1.203 (1.291)

图 8 所示为背景金属蒸气原子数密度分别取  $2.0 \times 10^{11}$ ,  $4.0 \times 10^{11}$  和  $8.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$  (分别对应算例 1、算例 3、算例 4) 时, 剩余离子比例随引出时间的变化曲线. 图 9 给出了相应条件下极板上离子沉积能量分布曲线. 在背景金属蒸气原子数密度改变时, 同位素丰度和初始离子密度均不变. 在上述三种背景原子蒸气密度下, 同位素 A 离子中与 B 原子发生共振电荷转移的比例分别为 0.576%, 1.151% 和 2.250%, 与背景原子蒸气密度基本上成正比, 且背景原子蒸气密度的变化不影响共振电荷转移发生在鞘层中和屏蔽层中的比例.

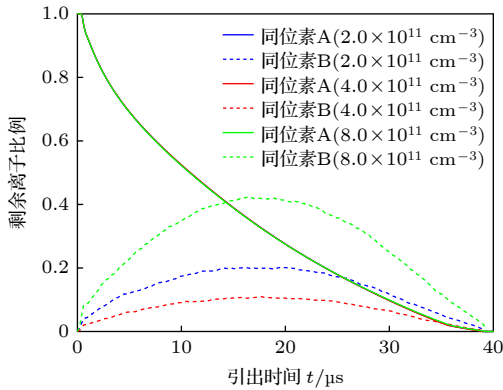


图 8 不同背景原子蒸气密度条件下, 剩余离子比例随引出时间的变化曲线 (算例 1、算例 3、算例 4)  
Fig. 8. Plots of remaining ion ratio versus extraction time with several background atomic densities (Case 1, Case 3, Case 4).

图 10 所示为算例 5 中剩余离子比例随引出时间的变化曲线, 图 11 给出了相应条件下极板上离子沉积能量分布曲线. 同位素 A 离子中与 B 原子发生共振电荷转移的比例为 1.203%, 其中发生在屏蔽层中和鞘层中的比例分别为 0.549% 和 0.654%. 考虑到离子从负极板引出的比例为 75.78%, 即可得到由负极板引出的离子在通过鞘层时发生共振电荷转移的几率为 0.864%. 另外, 由图 11 中局部

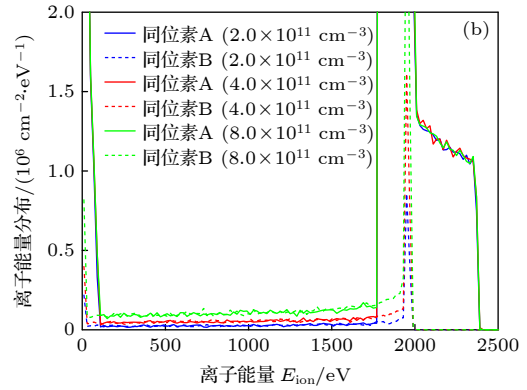
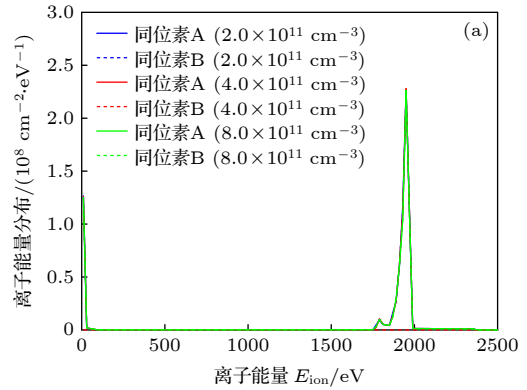


图 9 不同背景原子蒸气密度条件下, 两侧收集板上的离子沉积能量分布 (算例 1、算例 3、算例 4) (a) 整体图; (b) 局部放大图

Fig. 9. Energy distribution of ions deposit on the collection plates with several background atomic densities (Case 1, Case 3, Case 4): (a) General distribution; (b) local distribution.

放大部分可以看出, 在 5.0—8.0 keV 之间, 同位素 B 的沉积速率略大于同位素 A, 这是因为同位素 A 的电离率较大导致背景原子中同位素 A 的原子数密度低于同位素 B, 在算例 1—算例 4 中此种现象则不明显.

通过以上计算结果可以发现: 在电场法离子引出过程中, 屏蔽层和鞘层均会发生共振电荷转移, 根据 (1) 式, 除了共振电荷转移截面, 离子发生共振电荷转移的几率只受到背景原子密度和离子相

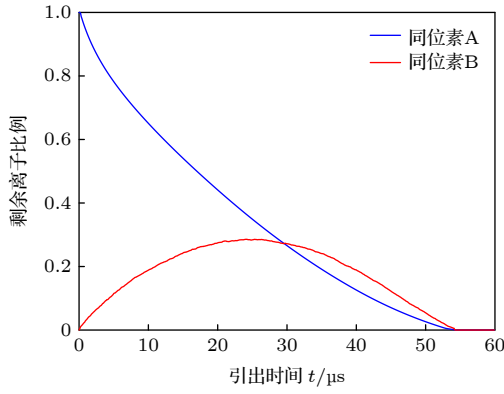


图 10 两侧收集板上的离子沉积能量分布 (算例 5)

Fig. 10. Plots of remaining ion ratio versus extraction time (Case 5).

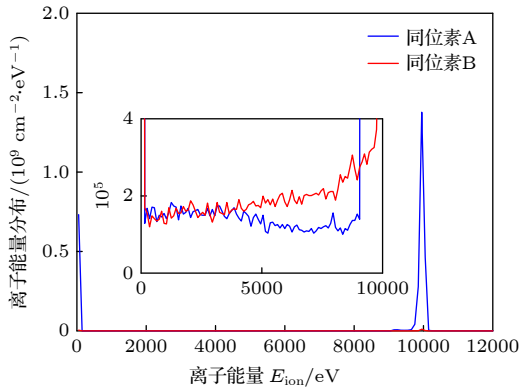


图 11 两侧收集板上的离子沉积能量分布 (算例 5)

Fig. 11. Energy distribution of ions deposit on the collection plates (Case 5).

对原子运动路程的影响. 屏蔽层中离子和原子均以热速度运动, 因此此区域内的离子发生共振电荷转移的几率主要取决于引出时间, 即可近似为离子停留在屏蔽层中的时间. 因此离子在屏蔽层中发生共振电荷转移的比例  $P_{\text{shield}}$  可采用下式估算:

$$P_{\text{shield}} = \frac{1}{2} n_a \sigma_{T,ia} \cdot v_{T,ia} \cdot \tau, \quad (2)$$

其中  $v_{T,ia}$  为原子和离子间的平均相对热运动速度,  $\tau$  为离子引出时间. 另外, 由负极板引出的离子在

通过鞘层时发生共振电荷转移的几率  $P_{\text{sheath}}$  可采用下式估算:

$$P_{\text{sheath}} = \frac{1}{2} n_a \sigma_{T,ia} \cdot L_a, \quad (3)$$

其中  $L_a$  为被负极板收集的离子在背景气体中平均运动路程长度的 2 倍, 在估算时采用背景气体宽度代替. 综上, 离子引出过程中离子发生共振电荷转移的比例  $P_{\text{total}}$  可用下式估算:

$$P_{\text{total}} = P_{\text{shield}} + \alpha_{\text{cathode}} \cdot P_{\text{sheath}}, \quad (4)$$

其中  $\alpha_{\text{cathode}}$  为离子从负极板引出的比例. 由 (2) 式—(4) 式计算得到的共振电荷转移的几率列在表 2 的括号内, 其中通过鞘层的离子发生共振电荷转移的几率的计算结果均大于模拟结果, 这是因为靠近正极板的离子从正极板引出, 由负极板引出的离子在背景气体中的平均路程长度小于背景气体宽度的一半.

### 3.2 二维离子引出过程

本节计算平行板法、交替偏压法、II 型电场法和 M 型电场法四种引出构型下的二维离子引出过程, 四种引出构型的示意图如图 12 所示. 计算参数如下: 左右收集板间距  $L = 5 \text{ cm}$ , 高度  $H = 6 \text{ cm}$ ; 尾料板距离左右收集板上沿为  $2 \text{ cm}$ , 其长度为  $5 \text{ cm}$ ; 等离子体尺寸为  $L_p \times H_p = 3 \text{ cm} \times 3 \text{ cm}$ , 位于左右收集板中心, 其初始密度分布为均匀分布; M 型电场法中 M 极板的长度为  $5.0 \text{ cm}$ , 即 M 极板下端恰好位于等离子体中心, 上端位于尾料板中心, M 极板垂直于尾料板; 金属蒸气在极板间均匀分布, 其原子数密度为  $4.0 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ ; 金属蒸气中 A, B 两种同位素的丰度均为 50%, 同位素 A 的电离率为 2.5%, 同位素 B 的电离率为 0, 即等离子体的初始离子密度为  $5.0 \times 10^9 \text{ cm}^{-3}$ . 其余计算参数同 3.1 节. 平行板法、II 型法和 M 型法的引出电压为  $2.0 \text{ kV}$ , 交替偏压法采用频率为  $1.0 \text{ MHz}$ 、峰

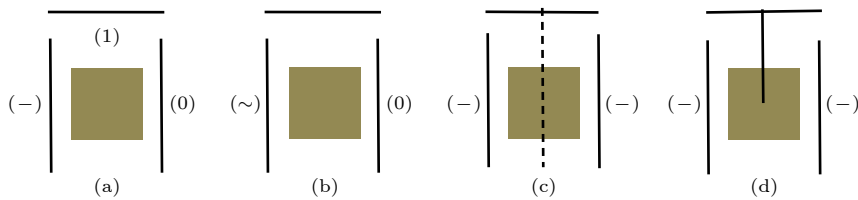


图 12 二维电场法离子引出示意图 (a) 平行板电场法; (b) 交替偏压法; (c) II 型电场法; (d) M 型电场法

Fig. 12. Schematic diagram of two dimensional electric ion extraction: (a) Parallel type; (b) alternately biased parallel type; (c) II-type; (d) M-type.

值为 2.0 kV 的正弦交流电压. 计算时采用的网格数为  $250 \times 400$ , 网格宽度为  $2 \times 10^{-4}$  m, PIC 法和杂化 PIC 法的时间步长分别为 100 ps 和 1 ns.

图 13—图 16 分别为四种引出构型下极板上同位素 A 和 B 离子沉积能量分布曲线. 由于共振电荷转移对离子引出时间的影响比较微弱, 本节计

算得到的剩余离子/电子比例随引出时间的变化曲线与图 3 中基本相同, 因此不再赘述. 如图 13 所示, 平行板电场法中左右极板上同位素 A 和 B 离子沉积能量分布与一维工况的模拟结果类似; 在交替偏压法的模拟结果中, 由于极板上的电压是周期性的交变电压, 交变电压的幅值是 2.0 kV, 因此沉

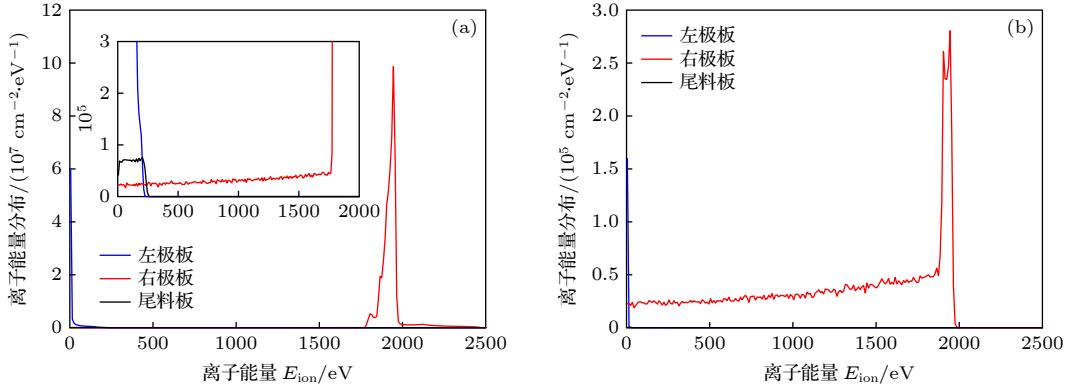


图 13 平行板电场法中, 收集板上的离子沉积能量分布 (a) 同位素 A; (b) 同位素 B

Fig. 13. Energy distribution of ions deposit on the collection plates in parallel type: (a) Isotope A; (b) isotope B.

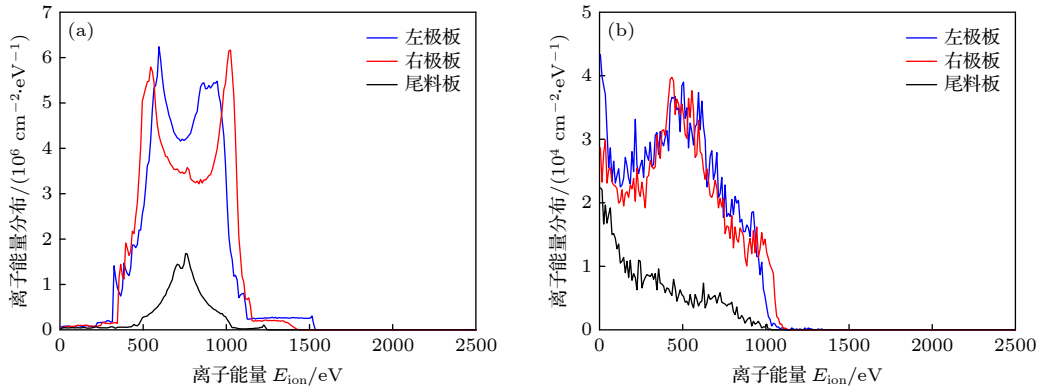


图 14 交替偏压电场法中, 收集板上的离子沉积能量分布 (a) 同位素 A; (b) 同位素 B

Fig. 14. Energy distribution of ions deposit on the collection plates in alternately biased parallel type: (a) Isotope A; (b) isotope B.

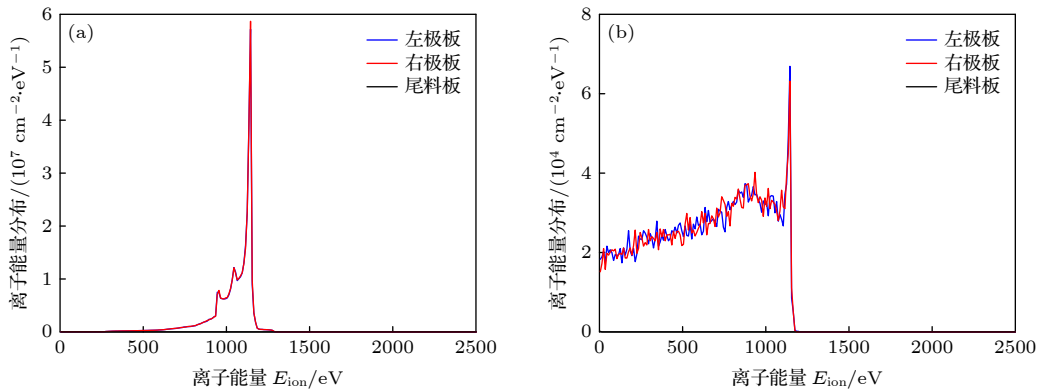


图 15 II 型电场法中, 收集板上的离子沉积能量分布 (a) 同位素 A; (b) 同位素 B

Fig. 15. Energy distribution of ions deposit on the collection plates in II-type: (a) Isotope A; (b) isotope B.



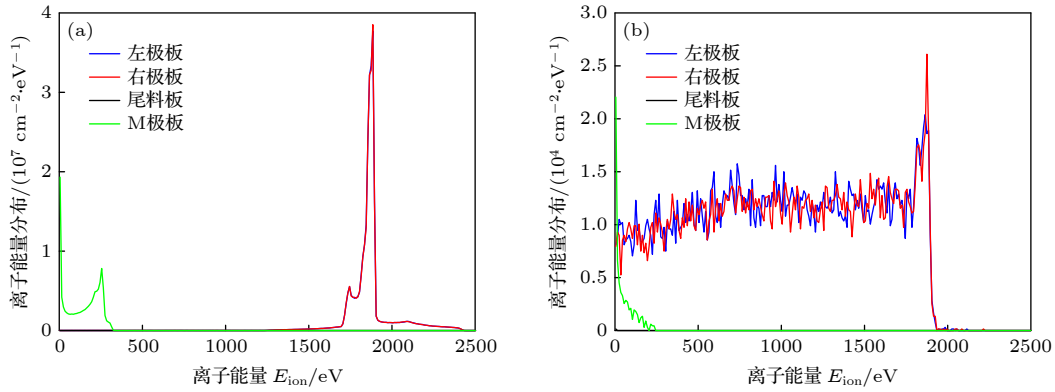


图 16 M 型电场法中, 收集板上的离子沉积能量分布 (a) 同位素 A; (b) 同位素 B

Fig. 16. Energy distribution of ions deposit on the collection plates in M-type: (a) Isotope A; (b) isotope B.

积能量的最大值明显小于 2.0 keV. 且有相当一部分离子从尾料板引出, 这是因为加交变电压的极板有一半的时间是处于正电位, 此时离子从另外一侧的极板和尾料板引出.  $\Pi$  型电场法和 M 型电场法中左右极板上的离子沉积能量分布与平行板电场法中负极板上的结果类似, 不同点在于  $\Pi$  型电场法中离子沉积能量的峰值在 1.2 keV 左右, M 型电场法则为 1.9 keV, 这是因为  $\Pi$  型电场法中等离子体电位小于正极板电位 [19], M 型电场法则拥有较快的离子引出速率. M 型电场法中沉积在左右极板上的离子能量的最大值接近 2.5 keV, 这是由于 M 型电场法中电子振荡阶段造成等离子体电位高于零电位, 因此在电势回落阶段引出离子的能量大于 2.0 keV. 另外, M 型电场法中有一部分离子沉积在 M 极板上, 其沉积能量的分布类似于平行板电场法中正极板上的离子能量分布.

表 3 给出了四种电场法离子引出构型下同位素 A 离子中与同位素 B 原子发生共振电荷转移的比例. 可以看出, 在其他条件相同的情况下, M 型电场法离子引出过程中离子发生共振电荷转移的比例最小.

表 3 四种引出构型中同位素 A 离子与同位素 B 原子发生共振电荷转移的比例

Table 3. Resonant charge exchange ratio between A-ion and B-atom in four electrode configurations above.

离子引出构型	共振电荷转移比例/%
平行板电场法	1.097
交替偏压电场法	0.911
$\Pi$ 型电场法	0.859
M型电场法	0.640

## 4 总 结

本文利用混合算法和 PIC 法计算了考虑共振电荷转移的电场法离子引出过程, 结果表明: 离子在屏蔽层和鞘层中都会发生共振电荷转移, 共振电荷转移过程会略微延长离子引出时间, 发生共振电荷转移的几率主要取决于共振电荷转移截面、引出时间、背景原子密度和蒸气宽度. 在其他条件相同的情况下, M 型电场法中离子发生共振电荷转移的比例最小. 结合之前论文中的研究结果, 从缩短引出时间和降低离子发生共振电荷转移比例的角度, M 型电场法在本文介绍的四种离子引出构型中表现最优.

## 参考文献

- [1] Wang D W 1999 *Theory and Application of Laser Isotope Separation* (Beijing: Atomic Energy Press) p218(in Chinese) [王德武 1999 激光分离同位素理论及其应用(北京: 原子能出版社) 第218页]
- [2] Yamada K, Okada H, Tetsuka T, Yoshioka K 1993 *J. Nucl. Sci. Technol.* **30** 143
- [3] Yamada K, Tetsuka T, Deguchi Y 1990 *J. Appl. Phys.* **67** 6734
- [4] Yamada K, Tetsuka T, Deguchi Y 1991 *J. Appl. Phys.* **69** 8064
- [5] Yamada K, Tetsuka T 1994 *J. Nucl. Sci. Technol.* **31** 301
- [6] Kurosawa H, Hasegawa S, Suzuki A 2002 *J. Appl. Phys.* **91** 4818
- [7] Watanabe J, Okano K 1993 *Phys. Fluids. B* **1993** 3092
- [8] Ogura K, Kaburaki H, Shibata T 1993 *J. Nucl. Sci. Technol.* **30** 1248
- [9] Zhidkov A G 1998 *Phys. Plasmas* **5** 541
- [10] Matsui T, Tsuchida K, Tsuda S, Suzuki K, Shoji T 1996 *Phys. Plasmas* **3** 4367
- [11] Matsui T, Tsuchida K, Tsuda S, Suzuki K, Shoji T 1997 *J. Nucl. Sci. Technol.* **34** 923
- [12] Matsui T, Tsuda S, Tsuchida K, Suzuki K, Shoji T 1997 *Phys. Plasmas* **4** 3527

- [13] Matsui T, Tsuchida K, Tsuda S, Suzuki K, Shoji T 1997 *Phys. Plasmas* **4** 3518 (in Chinese) [谢国锋 2004 博士学位论文 (北京: 清华大学)]
- [14] Murakami M, Ueshima Y, Nishihara K 1993 *Jpn. J. Appl. Phys.* **32** 1471
- [15] Yan M 1994 *Ph. D. Dissertation* (Beijing: Tsinghua University) (in Chinese) [严敏 1994 博士学位论文 (北京: 清华大学)]
- [16] Xie G F 2004 *Ph. D. Dissertation* (Beijing: Tsinghua University)
- [17] Verboncoeur J P 2005 *Plasma Phys. Controlled Fusion* **47** A231
- [18] Tskhakaya D, Matyash K, Schneider R Taccogna F 2007 *Contrib. Plasma Phys.* **47** 563
- [19] Lu X Y, Yuan C, Zhang X Z, Zhang Z Z 2020 *Chin. Phys. B* **29** 045201
- [20] Smirnov B M 2001 *Phys. Usp.* **44** 221

## Numerical research on ion extraction with resonant charge exchange process

Lu Xiao-Yong<sup>1)†</sup> Yuan Cheng<sup>1)2)</sup> Gao Yang<sup>1)</sup>

1) (*Research Institute of Physics and Chemical Engineering of Nuclear Industry, Tianjin 300180, China*)

2) (*Department of Engineering Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China*)

( Received 17 January 2021; revised manuscript received 8 March 2021 )

### Abstract

The electric ion extraction, which plays an important role in productivity and abundance of product, is a critical step in laser isotope separation (LIS) technology. Several collision processes happen during the electric ion extraction, such as resonant and non-resonant charge exchange between ion and atom, the secondary ionization process and the ion-electron recombination. The resonant charge exchange process between target isotope ions and no-target background atoms is one of the major reasons of product contamination. As a result, the study of ion extraction with the consideration of resonant charge exchange process is essential. However, the resonant charge exchange process in ion extraction has not received enough attention. Besides, contradictory findings have been deduced in published studies. Therefore, it is necessary to clarify the effect of resonant charge exchange process in the electric ion extraction. In this article, the particle-in-cell (PIC) method and preprocessing hybrid-PIC method are adopted in both one- and two-dimensional numerical simulation. The preprocessing hybrid-PIC method is a calculation scheme by which accurate results can be obtained with less computational consumption. In this calculation scheme, the PIC method and hybrid-PIC method are used sequentially in different stages of ion extraction process. One-dimensional parallel type simulation cases are carried out under the circumstances of different initial plasma densities, applied voltages and background atom densities. The results show that the resonant charge exchange process happens in both shield layer and sheath layer. The ionic resonant charge exchange proportion in shield layer and sheath layer are related to the ion extraction time and average travel length in background vapor, respectively. Besides, they are proportional to the resonant charge exchange cross section and background atom density. And an empirical formula for deriving the resonant charge exchange ratio roughly is proposed. Two-dimensional simulations are carried out in four electrode configurations: parallel type, alternately biased parallel type, II-type, and M-type. The extraction mechanisms are discussed and compared with each other. The simulation results show that M-type electrode configuration has the minimum resonant charge exchange ratio and extraction time among the configurations above. The results and conclusions provide an important reference for designing the LIS device.

**Keywords:** resonant charge exchange, particle-in-cell method, sheath layer, shield layer

**PACS:** 52.20.Hv, 52.65.Ww, 52.65.-y

**DOI:** 10.7498/aps.70.20210105

† Corresponding author. E-mail: [lu-xy15@tsinghua.org.cn](mailto:lu-xy15@tsinghua.org.cn)