

6. Иванов В. Я. Информационное обеспечение системы «ТОПАЗ». — В кн.: Численные методы решения задач электронной оптики. — Новосибирск: изд. ВЦ СО АН СССР, 1979.
7. Иванов В. Я. Входные языки системы «ТОПАЗ». — Новосибирск: изд. ВЦ СО АН СССР, 1979. (Предпринт/АН СССР, Сиб. отд-ние, ВЦ; № 154).
8. Иванов В. Я. Проблемно-ориентированный язык описания данных для экстремальных задач электронной оптики. — Автометрия, 1980, № 3.
9. Астрелин В. Т., Иванов В. Я. Пакет программ для расчета характеристик интенсивных пучков релятивистских заряженных частиц. — Автометрия, 1980, № 3.

*Поступила в редакцию 10 августа 1981 г.*

УДК 621.384 : 663.0015

**В. Т. АСТРЕЛИН, В. Я. ИВАНОВ**

*(Новосибирск)*

## **ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТОЛКНОВИТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ В УСКОРИТЕЛЯХ РЭП**

**1. Введение.** При построении математических моделей сильноточных релятивистских электронных пучков (РЭП) в системах с газовым наполнением можно выделить ряд самостоятельных этапов: расчет электростатических полей в системах с произвольной конфигурацией границы, модель учета собственных электрических и магнитных полей движущихся частиц и механизм учета упругих и, главным образом, неупругих столкновений различного типа. Используемые в настоящей работе алгоритмы расчета внешних и собственных электромагнитных полей рассмотрены в [1], и поэтому будут описаны достаточно кратко, а основное внимание будет уделено вопросам моделирования столкновительных процессов.

Газовое наполнение пучковых систем приводит к полной или частичной компенсации объемного заряда пучка ионами или плазмой. Теоретическому рассмотрению проблем, связанных с поведением РЭП в плазме, и исследованию различного рода неустойчивостей посвящены монографии [2, 3]. Вопросы устойчивости частично или полностью нейтрализованных ионами пучков рассмотрены в работе [4]. Однако в этих случаях коэффициент компенсации объемного заряда пучка считается заданной величиной и механизм его формирования не рассматривается.

Учет ряда неупругих процессов в ускорителях проводился и ранее [5—7]. Так, в [5] в рамках одномерной теории исследовалось влияние ионизации нейтрального газа электронным пучком в диоде на его характеристики. Численное решение одномерного кинетического уравнения с учетом ионизации и резонансной перезарядки ионов позволило провести сравнение модели с экспериментом [6]. Одной из последних работ, наиболее близких по проблематике к данной, является [7], где детально рассматриваются одномерные и двумерные модели процессов ионизации и перезарядки в приближении «сильного» электрического поля.

В настоящей работе описываются двумерные математические модели и численные алгоритмы учета столкновительных процессов, свободные от ряда ограничений, присущих предшествующим работам. Учитывается передача энергии налетающих частиц, рожденных в актах неупругих столкновений, проведено существенное расширение используемого ассортимента столкновительных процессов. Принципиально новым моментом является комплексное использование нескольких различных моделей, позволяющее учитывать специфику физических процессов самых различных задач.

Другой важный аспект предлагаемой вниманию работы — высокая степень автоматизации проведения расчетов, позволяющая пользователю, практически не знающему программирования, описывать физические па-

параметры используемых моделей в наглядном и привычном символическом представлении, задавать самые различные виды столкновительных реакций, которые только могут встретиться на практике. Численные алгоритмы для вычисления столкновительных параметров разработаны ДУССИОНА

$$\varphi(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_V \frac{\rho(\mathbf{r}_1)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} d^3r_1 + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int_S \frac{\sigma(\mathbf{r}_2)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|} d^2r_2, \quad (1)$$

в котором  $\rho$  — плотность заряда в объеме  $V$ ,  $\epsilon_0$  — электрическая постоянная вакуума, а искомая плотность поверхностных зарядов  $\sigma$  на границе области  $S$  определяется из системы интегральных уравнений Фредгольма, получающихся в результате удовлетворения граничным условиям задачи: на проводящих поверхностях — это условие Дирихле или 1-го рода, на границе раздела диэлектрических сред — непрерывность вектора электростатической индукции или условие сопряжения, на границе симметрии — условие Неймана. Возможно также задание условий периодичности и некоторых других.

Для расчета траекторий заряженных частиц используется гидродинамическая модель «трубок тока». Стержневая траектория трубки описывается уравнением движения в импульсной форме:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = Z(-\nabla\varphi + [\mathbf{v}\mathbf{B}]), \quad \mathbf{v} = \mathbf{p}/M\sqrt{1 + (p/Mc)^2}. \quad (2)$$

Здесь  $\mathbf{p}$  — импульс,  $\mathbf{v}$  — скорость частицы с массой  $M$  и зарядом  $Z$ ,  $c$  — скорость света в вакууме,  $\mathbf{B}$  — вектор индукции внешних  $\mathbf{B}_0$  и собственных магнитных полей пучка, определяемый выражением

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \mathbf{B}_0(\mathbf{r}) + \frac{1}{4\pi\mu_0} \int_V \frac{[\mathbf{j}(\mathbf{r}_1) \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}_1)]}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|^3} d^3r_1, \quad (3)$$

$\mu_0$  — магнитная постоянная вакуума,  $\mathbf{j}$  — плотность тока трубки. Различным способам инжекции частиц в расчетную область соответствуют и разные начальные данные для скоростей и плотности тока, учитывающие возможность задания функций распределения по начальным энергиям и углам вылета. Так, в случае термоэмиссии плотность тока обусловлена модифицированным законом Богуславского — Ленгмюра, приведенным в работе [7]:

$$j = A(4\sqrt{2}/9)(\epsilon_0/\sqrt{M})(Z\delta\varphi)^{3/2}/Zd^2, \quad (4)$$

где  $A = (9/4)[\arcsin\sqrt{t} - \sqrt{t(1-t)}]^2/t^3$  — коэффициент, учитывающий присутствие в плотности объемного заряда  $\rho$  однородного фона  $\rho' = \rho - \rho_0$ , противоположного знаку заряда эмиттируемых частиц с плотностью  $\rho_0$  ( $t = (1/2)(1 - \rho/\rho_0)$ ), а  $\delta\varphi$  — потенциал относительно эмиттера точки, находящейся на достаточно малом расстоянии  $d$  от него).

Вклад заряженных частиц в объемный заряд найдем из уравнения неразрывности с учетом процессов рождения и уничтожения частиц:

$$\operatorname{div}(\rho_i \mathbf{v}_i) = \sum_k n_0 \sigma_{ik} \rho_k v_k. \quad (5)$$

Здесь  $\sigma_{ik}$  — сечение неупругого взаимодействия частицы  $k$ -го сорта с нейтральным газом плотности  $n_0$ , образовавшего (или уничтожившего при  $\sigma_{ik} < 0$ ) частицу  $i$ -го сорта.

Результирующую плотность объемного заряда можно представить в виде ряда  $\rho = \rho_0 + \rho_1 + \rho_2 + \rho_3 + \dots$ , где  $\rho_0$  — плотность исходных частиц,

$\rho_i$  — плотность частиц  $i$ -го поколения, появившихся в результате столкновения частиц  $(i-1)$ -го поколения с нейтральным газом. Для частиц с близкими по порядку величины массами можно записать соотношение  $\rho_i \sim d\rho_{i-1}/\lambda_{i-1}$ , где  $\lambda_{i-1}$  — характерная длина свободного пробега частиц  $(i-1)$ -го поколения,  $d$  — размер ускорительного промежутка.

Для учета неупругих процессов можно воспользоваться приближением «сильного поля» [7], предполагающим, что на длине свободного пробега  $\lambda$  частицы в электрическом поле  $E$  набирают энергию, значительно большую энергии  $I$ , теряемой при неупругих столкновениях:  $EZ\lambda \gg I$ . В этом случае порожденные частицы можно разделить на два типа: 1) сохранившие скорость налетевшей частицы (как, например, ион в случае процесса «обдирки» быстрого нейтрала) и 2) частицы со скоростью, пренебрежимо малой по сравнению со скоростью налетевшей частицы (как в процессе ионизации нейтрального атома, когда образовавшийся ион имеет энергию порядка энергии ионизации).

Вторичные электроны, возникающие в процессах ионизации и «обдирки» нейтральных частиц, в рассматриваемых моделях не учитываются. Это оправдано приближением «сильного поля», поскольку электроны в поле из-за малости их массы быстро набирают скорость и покидают систему, так что их вклад в объемный заряд мал по сравнению с вкладом ионов:  $\rho_e/\rho_i \sim \sqrt{M_e/M_i}$ .

Отметим, что приближение «сильного поля» подразумевает монотонность пространственного распределения потенциала и отсутствие «потенциальных ям», в которых могли бы накапливаться вторичные электроны и ионы, образуя при этом плазменное облако.

Выбор соответствующей модели для учета неупругих процессов зависит от величины параметра  $\alpha = d/\lambda$ . При достаточно малых значениях  $\alpha$  ряд для функции  $\rho$  сходится быстро, поэтому можно ограничиться небольшим количеством поколений. Для этого случая используется модель «дерева реакций», суть которой состоит в следующем. На каждом шаге интегрирования траектории первичной частицы в результате одной или более реакций рождается группа вторичных частиц — заряженных и, возможно, нейтралов. После продвижения первичной частицы на один шаг начинается перебор траекторий вторичных частиц, каждая из которых теперь выступает в роли первичной для частиц следующего поколения, т. е. продвигается на один шаг и порождает новый ансамбль частиц. Такой процесс развивается в глубину до некоторого заданного уровня. Траектории частиц последнего уровня интегрируются до конца, затем производится шаг интегрирования траектории следующей частицы данного уровня, а по исчерпанию их продвигается на один шаг частица предыдущего уровня. Хотя рожденные быстрые нейтралы и не вносят непосредственно вклада в объемный заряд, они становятся источниками реакций последующих уровней и их движение по инерции необходимо учитывать. Столь подробная модель столкновительных процессов обладает известной универсальностью, так как позволяет каждой реакции любого уровня независимым образом задавать все физические параметры: долю передаваемой энергии, удельный заряд продуктов реакции, функции распределения по углам и энергиям, зависимость сечения от энергии налетающей частицы и пр. Однако с ростом количества уровней объем перерабатываемой информации, пропорциональный общему числу траекторий, начинает расти в геометрической прогрессии.

В случае  $\alpha \gg 1$ , когда необходимо учитывать большое число членов ряда разложения вследствие лавинообразного роста числа траекторий, используется «каскадная» модель, рассмотренная в работе [7]. В этом случае сначала интегрируются траектории первичных частиц во всей области и накапливаются значения плотности токов вторичных. Затем осуществляется обратная прогонка всех вторичных частиц для определения их вклада в объемный заряд. Эти две фазы процесса можно повторять до самосогласования поля. В такой простейшей интерпретации характеристики всех продуктов реакций однородны. Более того, в этой

модели вторичные частицы не порождают новых типов реакций, что позволяет обойтись всего двумя двумерными функциями распределения плотности заряда в рассматриваемом объеме. Для учета новых типов порожденных частиц модель требует существенного усложнения, зато в простейшем ее варианте с двумя типами реакций учет всех возможных уровней происходит в процессе самосогласования поля и не требует лавинообразного роста числа траекторий.

Величина параметра  $\alpha$  в некоторых случаях определяет также и тип уравнений движения. Так, например, для реакции резонансной перезарядки скорость заряженной частицы после столкновения оказывается близкой к нулю, а первичный быстрый ион становится быстрым нейтралом. В этом случае при  $\alpha \gg 1$  можно рассматривать движение заряженной частицы в «диффузионном» приближении, считая, что она имеет среднюю скорость  $v = ZE\sqrt{2/(Mn_0\sigma|ZE|)}$ , где  $E$  — напряженность электрического поля, а  $\sigma$  — суммарное сечение реакций, в которых данная частица теряет энергию. В этом случае усредняется вклад единичных актов столкновений.

**3. Реализация алгоритмов пакета POISSON-2.** Описание задачи осуществляется на входном проблемно-ориентированном языке, за основу которого взят язык BEAMS [8], расширенный средствами задания физической модели столкновительных процессов. Для этой цели добавлены операторы: ПЛОТНОСТЬ — задание плотности нейтрального газа, УРОВНИ — определение параметров вывода информации о траекториях порожденных частиц, ИОНИЗАЦИЯ — описание механизма столкновений. Поскольку смысл первых двух операторов очевиден, остановимся на рассмотрении структуры оператора ИОНИЗАЦИЯ. В самом общем случае моделируемый процесс может иметь древовидную структуру произвольной сложности, в которой можно выделить реакции различных уровней, представляющие собой процессы ионизации, перезарядки, диссоциации, «обдирки» атомов или молекул и др.

Пусть, например, в описываемой нами модели участвуют  $K$  типов первичных частиц, каждая из которых порождает некоторое количество элементарных реакций. Любая из этих реакций, в свою очередь, может служить вершиной некоторого нового поддерева реакций следующего уровня. Запись таких процессов на языке имеет вид

ИОНИЗАЦИЯ: P1(P11, P12, ..., P1K), P2(P21, P22, ..., P2), ...  
..., PK(PK1, PK2, ..., PKM) \*

Здесь любая реакция, например P31, может быть либо элементарной, либо сложной структурой. Таким образом, структурированный процесс записывается в виде соответствующей последовательности вложенных скобочных структур. Описание элементарной реакции состоит из мнемонического имени и возможного набора параметров, детализирующих ее свойства. Параметры могут описываться в произвольном порядке и имеют следующий смысл:  $R$  — признак печати только координат траектории — считается определенным по умолчанию;  $V$  — печать координат и скоростей частиц — продуктов реакции;  $D$  — признак «диффузионного» характера движения;  $N$  — не интегрировать траектории частиц, порождаемых в реакциях «диффузионного» движения (при этом, однако, токи первичных частиц уменьшаются в соответствии с сечениями описанных «диффузионных» реакций);  $K$  — использование «каскадной» модели для реакции данного типа.

Для управления объемом выводимой информации среди параметров любой реакции может присутствовать число, определяющее разрежение печати. Например, число 5 будет задавать печать каждой пятой по счету точки траектории. Это позволяет задавать избирательную печать для выбранной реакции, в то время как оператор УРОВНИ задает признак разрежения для печати всех реакций данного уровня.

Для иллюстрации следует разобрать какой-нибудь характерный пример. Пакет программ предоставляет возможность описания пользователем любых реакций, встречающихся на практике. Однако всегда можно выделить достаточно условно некоторый набор реакций, которые встречаются наиболее часто. В такой набор «стандартных» реакций мы включили следующие процессы с водородом:

- |  |  |
|--|--|
| 1) ионизация водорода электронами      | $H_2 + \vec{e} = H_2^+ + \vec{e},$         |
| 2) перезарядка $H_2^+$ на водороде     | $\vec{H}_2^+ + H_2 = \vec{H}_2 + H_2^+,$   |
| 3) диссоциация $H_2^+$ в водороде      | $\vec{H}_2^+ = \vec{H}^+ + \vec{H},$       |
| 4) перезарядка $H^+$ на водороде       | $\vec{H}^+ + H_2 = \vec{H} + H_2^+,$       |
| 5) ионизация водорода ионами $H_2^+$   | $\vec{H}_2^+ + H_2 = \vec{H}_2^+ + H_2^+,$ |
| 6) ионизация водорода протонами $H^+$  | $\vec{H}^+ + H_2 = \vec{H}_1^+ + H_2^+,$   |
| 7) ионизация атомами водорода $H$      | $\vec{H} + H_2 = \vec{H} + H_2^+,$         |
| 8) ионизация молекулами водорода $H_2$ | $\vec{H}_2 + H_2 = \vec{H}_2 + H_2^+,$     |
| 9) «обдирка» атомов водорода $H$       | $\vec{H} + H_2 = \vec{H}^+ + H_2,$         |
| 10) «обдирка» молекул водорода $H_2$   | $\vec{H}_2 + H_2 = \vec{H}_2^+ + H_2.$     |

Здесь знаком « $\vec{\phantom{x}}$ » обозначены быстрые ионы и нейтрады. Эти процессы имеют максимальные значения сечений реакций и являются преобладающими при энергиях 0,5—1000 кэВ. Значения сечений как функции энергии первичной частицы взяты из работы [9]. При необходимости набор стандартных реакций может быть расширен разработчиками. Однако существует возможность временного расширения набора реакций пользователями для описания своих специфических реакций. Для этого необходимо стандартным образом написать текст подпрограммы CROSS, в которой для реакции номер  $I$  с именем NAME необходимо задать зависимость сечения реакции SIGMA от энергии ENERGY палетающей частицы, удельный заряд продукта реакции Z и долю PART скорости, передаваемой первичной частицей продукту. Так, для ионизации водорода протонным ударом текст подпрограммы может быть следующим:

```

SUBROUTINE CROSS (I, NAME, SIGMA, Z, ENERGY, PART)
GO TO (1, 2), I
1 NAME = 6HH + IH2 +
  SIGMA = 1.1E - 7 * ENERGY / (1. + 4.E - 4 * ENERGY ** 2)
  PART = 1.E - 6
  Z = 3675.
  RETURN
2 NAME = 5H КОНЕЦ
  RETURN
END

```

Определенное пользователем мнемоническое имя, в этом случае  $H + IH_2^+$ , можно использовать в описании информации на входном языке. В данном примере мы видим реакцию с именем КОНЕЦ. Это некоторая условность, позволяющая программно определить конец набора реакций, описываемых пользователем, с тем, чтобы при употреблении во входном задании имени реакции, не входящей ни в стандартный набор, ни в набор пользователя, выдать соответствующую диагностику РЕАКЦИЯ... НЕ ОПИСАНА.

Нами был проведен расчет методической задачи для первичных частиц двух типов: электронный пучок с катода и протонный с анода.

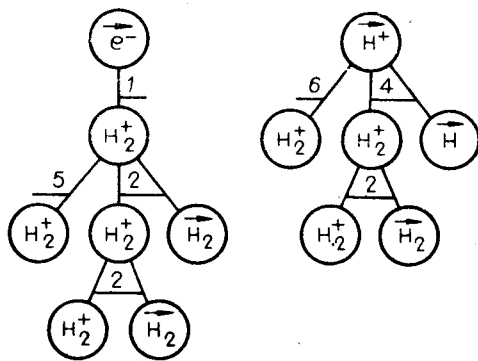


Рис. 1. Расчетная модель дерева реакций.

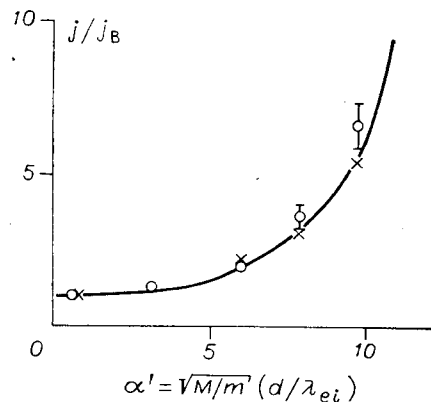


Рис. 2. Сравнительные характеристики коэффициента усиления тока для плоского диода.

Соответствующие деревья реакций изображены на рис. 1 и записываются следующим образом:

ИОНИЗАЦИЯ:  $e^- + H_2 \rightarrow (H_2^+ + H_2^+, H_2 + RH_2, H + 2H + 2(H_2 + RH_2, H + 2H + 2)), H + H_2^+, H + RH,$   
 $H + H + 2(H_2 + RH_2, H + 2H + 2)^*$

Цифры на рис. 1 указывают номера реакций. Общее число траекторий составляло 5256, расчет поля занял 19 с, время счета траекторий — 72 с.

Проверка правильности работы алгоритмов проводилась сравнением с результатами, полученными в работе [7]. Так, в [7] приводится пример численного решения одномерного интегрального уравнения относительно  $E$  — электрического поля в ускоряющем промежутке. Рассматривается процесс ионизации электронами нейтрального газа, сечение которого описывается формулой Томсона:  $\sigma_{ei}(\epsilon) = \sigma_{ei}^*(4I/\epsilon)(1 - I/\epsilon)$ , где  $I$  — энергия ионизации,  $\epsilon$  — энергия электрона,  $\sigma_{ei}^*$  — максимальное значение сечения ионизации. Для потенциала анода  $\phi_0 = 100I/Z$  получена зависимость тока пучка  $j/j_v$  от параметра  $\alpha'$ , где  $j_v$  — вакуумный ток диода,  $\alpha' = \sqrt{M_i/M_e} d/\lambda_{ei} = dn_0\sigma_{ei}^* \sqrt{M_i/M_e} d$  — диодный зазор,  $n_0$  — плотность нейтрального газа. Полученная в [7] зависимость представлена на рис. 2 сплошной линией. Для сравнения с этой зависимостью был проведен расчет с аналогичными параметрами (кресты на рис. 2). Кроме того, этот процесс был рассчитан с учетом перезарядки образующихся ионов с сечением перезарядки  $\sigma_p = 10\sigma_{ei}^*$  (кружки на рис. 2). Как следует из рис. 2, наблюдается хорошее соответствие полученных результатов с одномерным решением задачи. С ростом  $\alpha'$  плотность электронного тока диода значительно возрастает из-за частичной компенсации объемного заряда электронов ионами. Учет процесса перезарядки ионов также несколько увеличивает электронный ток диода за счет уменьшения средней скорости ионов и соответствующего увеличения их объемного заряда. Отметим, что при возрастании  $\alpha'$  (как и в работе [7]) значительно ухудшается процесс сходимости решения.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Астрелин В. Т., Иванов В. Я. Пакет программ для расчета характеристик интенсивных пучков релятивистских заряженных частиц. — Автометрия, 1980, № 3.
2. Девидсон Д. Теория заряженной плазмы. — М.: Мир, 1978.
3. Лоусон Дж. Физика пучков заряженных частиц. — М.: Мир, 1980.

4. Рухадзе А. А., Богданкевич Л. С., Росинский С. Е., Рухлин В. Г. Физика сильно-точных релятивистских электронных пучков.— М.: Атомиздат, 1980.
5. Иванова Н. С., Ульянов К. Н. Компенсация объемного заряда электронного пучка в диоде.— Радиотехника и электроника, 1972, с. 1920—1926.
6. Glebov V. V. et al. Studies of the Formation of High-Current Quasistationary Electron Beams in the Presence of Ions in Accelerating and Decelerating Electro-Optical Systems.— Proc. of the 3-rd Intern. Topical Conf. on High Power Electron and Ion Beam. Novosibirsk: INP, 1979, vol. II, p. 585—592.
7. Дзагуров Л. Ю. Методы расчета электронно-оптических свойств ускоряющих систем с газовым наполнением: Автореф. на соиск. учен. степени канд. физ.-мат. наук.— М.: изд. МФТИ, 1980.
8. Иванов В. Я. Входные языки системы «ТОПАЗ».— Новосибирск: изд. ВЦ СО АН СССР, 1979. (Препринт/АН СССР, Сиб. отд-ние, ВЦ; № 154).
9. Hantzsch E. Theorien des Kathodenfalls.— Beiträge aus d. Plasmaphysik, 1964, Bd 4, S. 165—208.

*Поступила в редакцию 10 августа 1981 г.*

---