

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОЛУЧЕНИЯ И ТРАНСПОРТИРОВКИ СИЛЬНОТОЧНЫХ ПУЧКОВ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ

Ключевые слова: *сильноточные пучки заряженных частиц, многозарядные ионы, электронные пучки, плазменные источники, извлекающая система.*

ВВЕДЕНИЕ

Проблема генерации интенсивных пучков заряженных частиц чрезвычайно актуальна для многих технологических процессов. Интенсивными называются пучки, в которых нельзя пренебречь силами кулоновского расталкивания, создаваемыми собственным объемным зарядом пучка. Такие пучки являются рабочим элементом в электронно- и ионно-оптических системах, которые широко используются в различных областях науки и техники. Так, ионные многозарядные пучки чрезвычайно важны, по крайней мере, для двух областей применения: для ускорителей тяжелых ионов и высокодозной ионной имплантации. Электронные пучки находят широкое технологическое применение в электронно-лучевой плавке и сварке. Оптимизация параметров источника частиц, обеспечение заданных свойств пучка, его стабильности, повышение мощности, а также минимизация потерь при транспортировке являются основными задачами в повышении эффективности плазменных источников заряженных частиц. В решении этих задач особая роль принадлежит численному моделированию, позволяющему выбрать наиболее оптимальный вариант конструкции источника и оценить влияние различных физических параметров на характеристики пучка.

Математически проблема исследования интенсивных пучков заряженных частиц сводится к решению нелинейной самосогласованной задачи, имеющей аналитическое решение лишь в простейших случаях. Поэтому основными математическими методами решения таких задач являются методы численного моделирования. Компьютерные модели генерации и транспортировки пучков заряженных частиц из плазмы с использованием конечно-разностной технологии впервые были применены в середине прошлого века для расчета электронной пушки [1]. В настоящее время существует огромное разнообразие компьютерных кодов, позволяющих моделировать формирование и извлечение пучка из плазмы, а также его транспортировку. Наиболее распространенными методами решения данных задач являются итерационные методы нижней релаксации, использующие закон Чайлда–Ленгмюра для плоского диода. В настоящей статье используется основанный на этом методе трехмерный код Кобра [2, 3], который позволяет учесть геометрию системы и преобразовать геометрическую информацию в сеточную. Первым шагом является решение уравнения Лапласа на трехмерной сетке с использованием конечно-разностной техники. Для решения системы уравнений используется метод последовательной релаксации. Уравнения движения заряженных частиц решаются прямым интегрированием, и полученные результаты используются для вычисления плотности пространственного заряда ионов в узлах сетки. На следующем этапе решается уравнение Пуассона с заданным распределением плотности заряда. Последовательно решая уравнения Пуассона, уравнения движения и переопределяя при каждой итерации распределение пространственного заряда, можно получить самосогласованное решение с заданной точностью.

В настоящей статье сделаны расчеты для различных геометрий как извлекающей системы, так и ускоряющего промежутка с тем, чтобы оптимизировать систему для получения устойчивого пучка с высоким током и малой расходимостью, а также минимизировать потери при транспортировке пучка в дрейфовом пространстве.

ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ОПИСАНИЕ МЕТОДА

Задача расчета интенсивных пучков заряженных частиц включает следующие вычислительные задачи: интегрирование уравнений движения заряженных частиц, вычисление потенциала электрического поля, расчет напряженности электрического поля и внешнего магнитного поля, расчет распределения объемного заряда и собственного магнитного поля. Первые три задачи относятся к классическим разделам вычислительной математики: численное решение обыкновенных дифференциальных уравнений, аппроксимация краевых задач, решение сеточных алгебраических уравнений, приближение функций. Однако простое перенесение известных методов в рассматриваемую проблемную область не обеспечивает их должной эффективности, так как необходимо учитывать важные специфические детали алгоритмов. В связи с этим возникает необходимость в адаптации известных и в создании новых алгоритмов решения данных задач. При моделировании интенсивных пучков необходимо разрабатывать алгоритмы расчета пучков с учетом собственных и внешних магнитных полей, а также численные алгоритмы расчета интенсивных пучков заряженных частиц в сложных физических условиях, включающих наличие подвижных плазменных границ, взаимодействие пучка с остаточным газом.

В качестве модели будем рассматривать бесстолкновительную плазму с однородно распределенными заряженными частицами. Система уравнений, описывающая движение плазмы, имеет вид

$$\Delta\varphi = \frac{\rho}{\varepsilon} \quad (\text{уравнение Пуассона}), \quad (1)$$

$$\frac{dv}{dt} = \frac{q}{m} (E + [v \times B]) \quad (\text{уравнение движения}), \quad (2)$$

$$\nabla \cdot j = 0 \quad (\text{уравнение сохранения заряда}), \quad (3)$$

где φ — электрический потенциал, E — напряженность электрического поля, B — магнитная индукция, v — скорость частиц, j — плотность тока, q — заряд частиц, m — масса частиц, ε — диэлектрическая проницаемость.

Алгоритм вычисления заключается в задании геометрии и распределении потенциалов на электродах оптической системы, а также первоначального положения плазменной поверхности и ее ионно-эмиссионных свойств. В модели применяется конечно-разностная технология, для решения уравнения Пуассона используется семиточечная конечно-разностная схема. Вначале находится решение уравнения Лапласа при заданных границах. При этом могут быть использованы граничные условия двух типов — Неймана и Дирихле. Условия первого типа используются при постоянном поле, а второго — при постоянном потенциале вдоль поверхностной границы. Полученная дискретная система уравнений решается методом итераций. Для улучшения сходимости используется метод последовательной релаксации, когда значение потенциала в каждом сеточном узле систематически пересчитывается,

$$\varphi_{i,j,k}^{n+1} = \alpha\varphi_{i,j,k} + (1-\alpha)\varphi_{i,j,k}^n, \quad (4)$$

здесь $\varphi_{i,j,k}^n$, $\varphi_{i,j,k}^{n+1}$ — соответственно старое и новое значения потенциала, $\varphi_{i,j,k}$ — поправка для сеточного узла (i, j, k) , при вычислении которой используются значения потенциала в данной и соседних точках, α — параметр релаксации, который может изменяться в процессе вычисления для улучшения сходимости и находится в интервале $0 < \alpha < 2$.

После вычисления значений потенциала в каждом узле решаются уравнения движения. Совокупность траекторий заряженных частиц рассчитывается в зависимости от положения индивидуальной частицы, ее начальной энергии и углов, определяющих ориентацию вектора начальной скорости. Для решения уравнений (2) используется прямое интегрирование:

$$\begin{aligned} v_x &= \int C_1 (E_x - v_x C_2 + v_y B_z - v_z B_y) dt, \\ v_y &= \int C_1 (E_y - v_y C_2 + v_z B_x - v_x B_z) dt, \\ v_z &= \int C_1 (E_z - v_z C_2 + v_x B_y - v_y B_x) dt, \end{aligned} \quad (5)$$

где

$$C_1 = \frac{q}{m} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}, \quad C_2 = \frac{E_x v_x + E_y v_y + E_z v_z}{c^2} \quad (6)$$

(здесь c — скорость света).

После решений уравнений движения создается карта плотности распределения частиц по узлам сетки и решается уравнение Пуассона с полученным распределением заряда. Для обеспечения самосогласованного решения применяются повторные итерации.

С точки зрения вычислительного процесса не имеет существенного значения, какими именно физическими процессами создается плазма — специфические физические проблемы описываются только начальными и граничными условиями. Таким образом, модель может быть применена к любым плазменным источникам как для положительных ионов, так и отрицательных, как для низкотемпературных плазменных ионных источников, так и для высокотемпературных лазерных ионных источников. Однако дебаевская длина $\lambda_D = \sqrt{\frac{\epsilon_0 k T_e}{n_e e^2}}$ должна быть меньше харак-

терных размеров сетки. Поэтому более высокая степень дискретизации будет лучше описывать физические условия и для моделирования генерации пучков заряженных частиц систему следует разбить на отдельные подсистемы — плазменный источник, извлекающая система, ускоряющий промежуток, дрейфовое пространство и т.п.

Если расчетная область осесимметрична и рассмотрение проводится для стационарного случая, то вычислительная задача существенно упрощается и моделирование пучка можно осуществлять методом трубок. В этом случае применяется метод интегральных уравнений с вычислением потенциала φ в точке \vec{r} через поверхность σ и пространственную плотность заряда ρ

$$\varphi(\vec{r}) = \int_S \frac{\sigma \cdot d^2 \vec{R}}{|\vec{R} - \vec{r}|} + \int_V \frac{\rho \cdot d^3 \vec{R}}{|\vec{R} - \vec{r}|} \quad (7)$$

с набором граничных условий на поверхностях Γ_i , описывающих симметричность и периодичность,

$$\begin{aligned} (\varphi + a \varphi'_n) |_{\Gamma_1} &= b(\Gamma), \quad \epsilon_1 \varphi'_n |_{\Gamma_1} = \epsilon_2 \varphi'_n |_{\Gamma_2}, \\ \varphi(x + L_x, y + L_y) |_{\Gamma_3} &= \varphi(x, y), \\ \varphi(-x, -y) &= M_x M_y \varphi(x, y), \quad M_x, M_y = \pm 1. \end{aligned} \quad (8)$$

В общем случае магнитное поле в системе вычисляется как сумма внешних полей B_0 и собственного магнитного поля пучка, создаваемого плотностью тока \vec{j} :

$$B(\vec{r}) = \vec{B}_0(\vec{r}) + \frac{1}{c} \int_V \frac{[\vec{j} \times (\vec{R} - \vec{r})] d^3 \vec{R}}{|\vec{R} - \vec{r}|^3} \quad (9)$$

с граничным условием $\vec{B} = 0$ на бесконечности.

Поток заряженных частиц вычисляется методом трубок тока произвольной ширины с центральной траекторией. Плотность объемного заряда находится из уравнения непрерывности: $\text{div } \rho \vec{v} = 0$. Итерационные методы с релаксацией объемного заряда и магнитного поля используются для нахождения самосогласованного решения

$$\rho^k = \omega_k \hat{\rho}^k + (1 - \omega_k) \rho^{k-1}, \quad \vec{B}^k = \omega_k \hat{\vec{B}}^k + (1 - \omega_k) \vec{B}^{k-1}, \quad (10)$$

где k — номер итерации, ω_k — параметр релаксации, $\hat{\rho}^k, \hat{\vec{B}}^k$ — соответственно плотность и магнитное поле, определенные из вычисленных характеристик трубок тока, $\rho^0 = 0, \vec{B}^0 = 0$.

МОДЕЛЬ ПЛАЗМЕННОГО ИОННОГО ИСТОЧНИКА И ФОРМИРОВАНИЕ ИОННОГО ПУЧКА

Для извлечения и ускорения ионов в плазменных ионных источниках используется трехэлектродная система, принципиальная схема которой представлена на рис. 1.

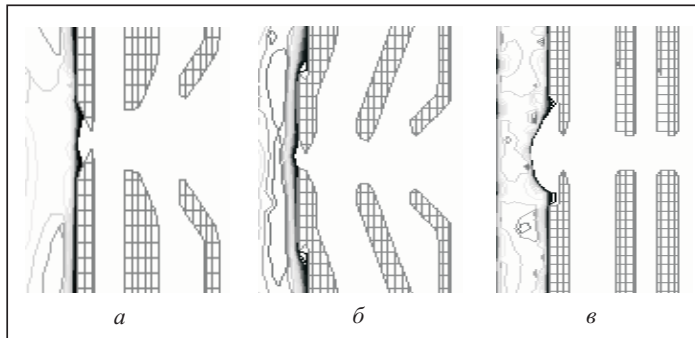


Рис. 1. Трехэлектродная схема ионно-оптической системы для трех различных типов геометрии

Из плазмы, находящейся слева от первого электрода, с помощью набора электродов извлекается пучок ионов. На электродах поддерживаются заданные значения потенциалов. На определенном расстоянии от плазменного электрода располагается ускоряющий

электрод, на который подается отрицательный потенциал, что связано с необходимостью создания потенциального барьера для электронов плазмы ионного пучка. За ним находится электрод под нулевым потенциалом (потенциал Земли). В зависимости от геометрии электродов, их расположения относительно друг друга, разности потенциалов и величины плотности тока ионный пучок будет характеризоваться соответствующей конфигурацией. Если эмитирующая поверхность фиксирована, то оптимальная плотность тока может быть вычислена по закону Чайлда–Ленгмюра: $j = \frac{4\epsilon_0}{9} \sqrt{\frac{2q}{m}} \frac{\varphi^{3/2}}{d^2}$, где d — диаметр отверстия.

При расчетах движения плазмы необходимо учитывать ее полную электрическую нейтральность. Считается, что ионы в плазме компенсируются электронами, для которых предполагается Больцмановское распределение

$$n_e = n_{e0} \exp\left(-\frac{e(\varphi_{pl} - \varphi)}{kT_e}\right), \quad (11)$$

где φ_{pl} — потенциал плазмы, T_e — электронная температура, n_{e0} — плотность

электронов в невозмущенной плазме.

При моделировании сильноточного многозарядного ионного пучка в дополнение к учету внешних полей необходимо принимать во внимание важность пространственного заряда. Для многозарядной плазмы его можно представить в виде

суммы по всем зарядовым состояниям: $\rho = \sum_{i=1}^N \frac{j_i}{v_i}$, где N — максимальный заряд

ионов в пучке. Необходимо учитывать также собственное магнитное поле, создаваемое непосредственно частицами и оказывающее обратное действие на них, $B = \mu_0 \mu_r \frac{j}{r}$, здесь j — плотность тока, $\mu_0 \mu_r$ — магнитная проницаемость.

Степень эффективности ионного источника прямо пропорциональна величине угловой расходимости пучка. Поэтому определение условий, при которых пучок имеет минимальное угловое расхождение, является одной из важнейших задач моделирования пучков. Из плазмы ионы вылетают перпендикулярно ее поверхности. Если плазменная граница имеет вогнутую форму, то вектор скорости ионов имеет составляющую, направленную к оси пучка, и пучок будет фокусироваться, однако при этом увеличивается плотность в пучке, а следовательно и кулоновское расталкивание, что приводит к расфокусировке пучка. Таким образом, имеют место два противоположных процесса и должны быть условия, соответствующие оптимальному варианту — минимальной расходимости ионного пучка.

Положение эмиссионной границы определяется взаимодействием ускоряющего электрического поля с плазмой разряда. Если параметры плазмы n_i (плотность ионов) и T_e постоянны, то плотность тока также постоянна и положение плазменной границы определяется ускоряющей разностью потенциалов. На рис. 1 приведены эмиссионные границы, полученные в результате расчетов трех типов конструкций ионного источника. В зависимости от характеристик пучка, которые необходимо получить, можно использовать ту или иную конструкцию. На рис. 2 приведены траектории пучка, полученные в результате расчета. Так, геометрия на рис. 1, *а* дает наименьшую расходимость пучка, геометрия на рис. 1, *б* обеспечивает большую силу тока извлекаемого пучка, чем геометрия на рис. 1, *б*.

При расчетах плазма считается электронной. Ускоряющий электрод экранирует электроны, создавая для них потенциальный барьер. Однако вблизи ускоряющего электрода скорость ионов настолько велика, что эффектом объемного заряда можно пренебречь. На определенном расстоянии от плоскости ускоряющего электрода находится область, где объемный заряд ионного пучка скомпенсирован электронами, возникающими как при ионизации остаточного газа, так и за счет вторичной ионно-электронной эмиссии. Для расчета транспортировки пучка в дрейфовом пространстве необходимо также учитывать компенсацию объемного заряда пучка электронами, поскольку интенсивный пучок заряженных частиц может свободно распро-

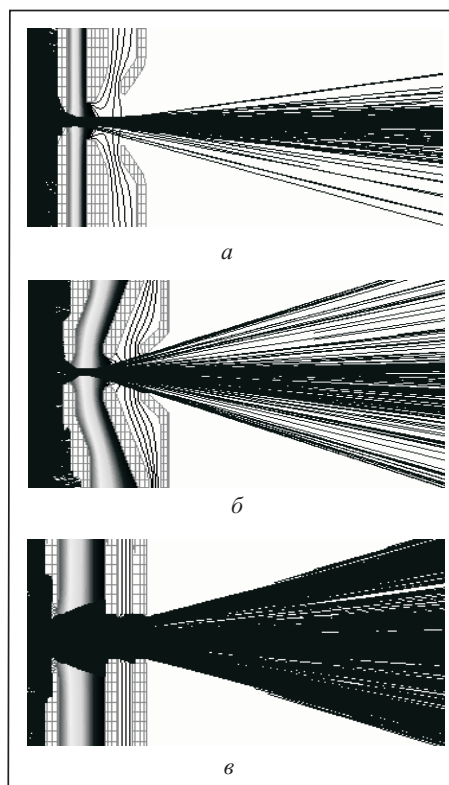


Рис. 2. Расчетные траектории пучка для различных геометрий плазменных источников, сечения которых представлены на рис. 1

страняться в среде только в случае нейтрализации его пространственного заряда.

МОДЕЛЬ ПЛАЗМЕННОГО ИСТОЧНИКА ЭЛЕКТРОНОВ НА ОСНОВЕ ПОЛОГО КАТОДА

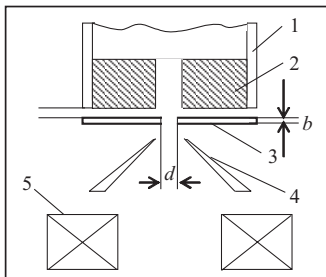


Рис. 3. Электродная схема электронного источника

Принципиальная схема плазменного источника электронов на основе полого катода представлена на рис. 3. Для генерации плазмы в устройстве используется разряд с полым катодом 1, который содержит катодную вставку 2, предназначенную для уменьшения рабочей области анода. Отбор электронов осуществляется вдоль оси системы через центральное отверстие в аноде 3. За ускоряющим электродом 4 расположена магнитная фокусирующая система 5. Поскольку одним из основных условий получения острого пучка является использование одного эмиссионного отверстия, то первоочередная задача, требующая разрешения,

— установление максимальных значений эмиссионного тока, которые могут быть получены при извлечении электронов из плазмы разряда с полым катодом через одно отверстие в эмиссионном электроде. Кроме того, необходимо определить эффективность извлечения, т.е. отношение эмиссионного тока к току разряда.

Использование одного эмиссионного отверстия вместо множества (как при получении цилиндрического пучка) означает уменьшение эмиссионной поверхности плазмы. Это уменьшение неизбежно вызывает снижение эмиссионного тока. В связи с этим в процессе численного моделирования предстоит решить две основные задачи: нахождение оптимального соотношения между диаметром d отверстия в эмиссионном электроде 3 и его толщиной b (см. рис. 3), а также определение оптимальной концентрации плазмы в области эмиссии для повышения плотности эмиссионного тока.

Рассмотрим случай, когда эмиссия электронов ограничена пространственным зарядом. Поскольку возможны потери пучка как в ускоряющем промежутке, так и в дрейфовом пространстве, то во внимание принимается компенсация пространственного заряда пучка. Электронный пучок распространяется в дрейфовом пространстве при потенциале Земли, и его пространственный заряд компенсируется присутствием ионов, которые образуются посредством ионизации остаточного газа. Компенсация пространственного заряда уменьшает кулоновское расталкивание электронов и способствует повышению плотности тока в пучке.

Расчеты были выполнены для различных размеров и форм отверстия эмиссионного электрода с тем, чтобы установить характер и степень влияния факторов на геометрические параметры пучка. Соответствующие сечения и эмиссионные границы представлены на рис. 4. Первый слева электрод соответствует полному катоду на рис. 3 и находится под плазменным потенциалом.

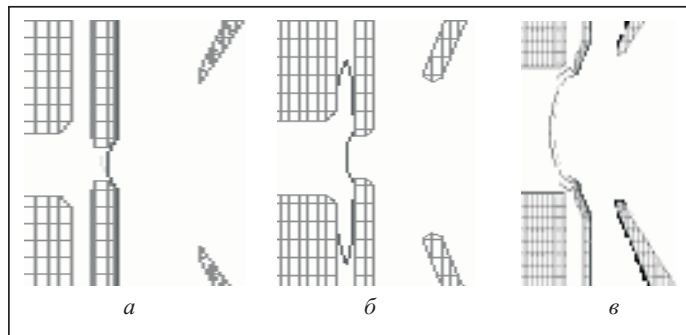


Рис. 4. Схема извлечения электронного пучка и эмиссионная граница для разных геометрий эмиссионного электрода: цилиндрического отверстия (а), цилиндрического с меньшим диаметром (б), конического (в)

Объемный заряд электронов вблизи плазменной границы компенсируется ионами и вычисляется согласно выражению $1 - \alpha_p \cdot \exp\left(-\frac{\varphi_{pl} - \varphi}{kT_i}\right)$,

где T_i — ионная температура, φ_{pl} — плазменный потенци-

ал, φ — потенциал в вычисляемом узле, α_p — параметр, описывающий расстояние от невозмущенной плазмы к стартовой точке траектории. Значения α_p лежат в диапазоне $0 \div 1$ (0 — отсутствие компенсации пространственного заряда при любых значениях φ ; 1 — полная компенсация при $\varphi = \varphi_{pl}$). Эмиссионная граница располагается внутри или за анодным отверстием в зависимости от ускоряющего напряжения и имеет вогнутую форму, что приводит к фокусировке пучка.

Траектории электронов определяются в основном формой плазменной границы. Выпуклая форма приводит к возникновению расходящегося пучка, в то время как вогнутая поверхность плазмы образует сходящийся пучок. Исходя из этого можно определить механизм воздействия ускоряющего напряжения и концентрации эмитирующей плазмы на расходимость пучка, поскольку возрастание напряжения отодвигает плазменную границу, а следовательно, делает ее менее выпуклой. Увеличение концентрации плазмы, напротив, сокращает промежуток между плазмой и ускоряющим электродом, а значит, приводит к возрастанию кривизны плазменной поверхности.

На рис. 5 приведены соответствующие расчетные траектории для приведенных на рис. 4 конструкций извлекающей системы (без учета магнитного поля). Из сравнения интенсивности электронных пучков на выходе видно, что максимальным является ток для конструкции на рис. 4, а и потери минимальны для конструкции на рис. 4, в. Расчет показывает, что существует оптимальный диаметр отверстия в эмиссионном электроде. С увеличением диаметра отверстия эмиссионный ток возрастает (на рис. 4, б и 4, а диаметр отверстия — 1 мм и 1,5 мм соответственно), однако при диаметрах более 1,8 мм получить пучок не удастся ввиду проникновения плазмы из разрядной области в ускоряющий промежуток. Эти результаты расчетов согласуются с результатами экспериментальных работ [7, 8]. Форма отверстия также играет важную роль в формировании пучка (см. рис. 4, в).

Для получения острогофокусированных пучков большую роль играют положение фокусирующей системы и величина магнитного поля. На рис. 6 приведены траектории пучка в фокусирующем магнитном поле и в дрейфовом пространстве.

Результаты численного расчета показывают, что модель электронного плазменного источника, представленная на рис. 3, позволяет получать пучки с током до 0,1 А. Для эмиссионных токов, меньших 0,5 А, с ростом ускоряющего напряжения расходимость пучка уменьшается. Для эмиссионных токов, больших 0,6 А, найдено оптимальное напряжение, позволяющее получить максимальную интенсивность пучка и минимальное расхождение при прохождении пространства дрейфа. При ускоряющем напряжении 10 кВ – 20 кВ и фокусирующем токе 900–1200 А на виток можно получать пучки с диаметром, значительно меньшим, чем эмиссионное отверстие, и на достаточно больших расстояниях от фокусирующей системы. Такие пучки могут иметь широкое технологическое применение, например для резки и сварки металлических деталей. Эти результаты хорошо согласуются с результатами экспериментальных работ [4, 8] и могут служить основой для оптимизации параметров плазменных источников.

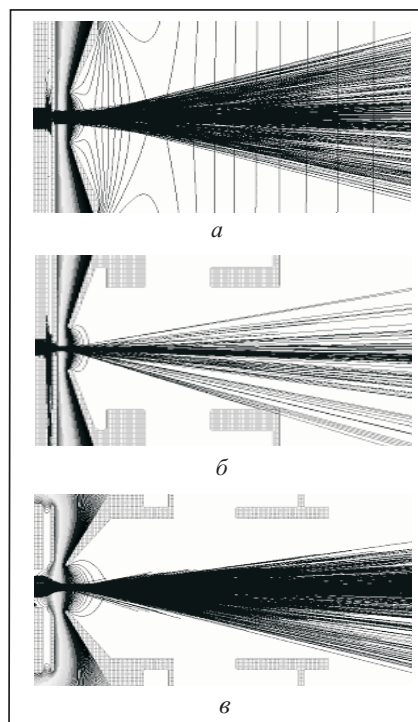


Рис. 5. Расчетные траектории для различных геометрий плазменных источников, представленных на рис. 4

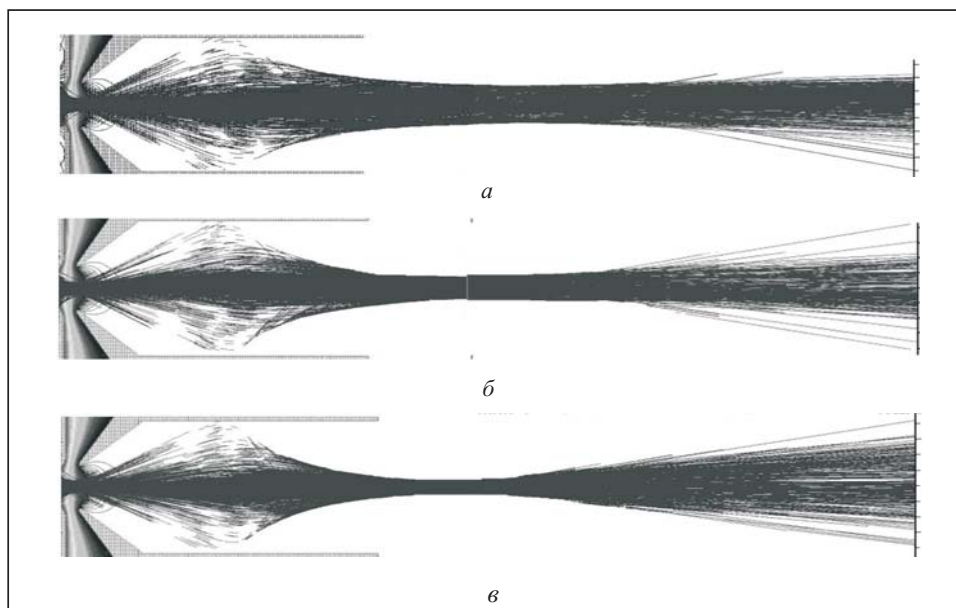


Рис. 6. Траектории электронного пучка в фокусирующем магнитном поле и в дрейфовом пространстве в зависимости от величины фокусирующего тока: 900 А на виток (а), 1000 А на виток (б), 1100 А на виток (в)

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей статье построены модели для плазменных потоков и исследованы их характеристики. Результаты подтверждают, что геометрия извлекающей системы играет существенную роль в формировании пучка, интенсивность и расходимость пучка в значительной степени зависят от формы плазменного электрода и диаметра отверстия. На качество, интенсивность и фокусировку пучка существенно влияет величина потенциалов на плазменном и экранирующем электродах, а также плотность эмиссионного тока. Получен оптимальный эмиссионный ток, дающий максимальную интенсивность пучка и минимальное его расхождение. С ростом ускоряющего напряжения фокусировка электронного пучка существенно улучшается. Все полученные результаты качественно согласуются с результатами эксперимента [4, 8] и позволяют оптимизировать конструкции плазменных источников и параметры для получения пучков заряженных частиц.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Self S. A. Exact solution of the collisionless plasma-sheath equation // *Phys. Fluids*. — 1963. — N 6. — P. 1762–1774.
2. Spaedtke P. Computer simulation of extraction // *The Physics and Technology of Ion Sources*, 2nd edition. Eds: I.G. Brown. — Berlin: Wiley-VCH, 2004. — P. 35–105.
3. Spaedtke P., Emig H., Klambunde J. Acceleration of high-current ion beams // *Rev. Sci. Instrum.* — 1996. — **67**, N 3. — P. 1146–1151.
4. Brown I.G., Feinberg B., Galvin J.E. Multiply stripped ion generation in the metal vapor vacuum arc // *J. Appl. Phys.* — 1988. — **63**. — P. 4889–4892.
5. Paolini F.J., Brown I.G. Some observation of the effect of magnetic field and arc current on the vacuum arc ion charge state distribution // *Rev. Sci. Instrum.* — 1995. — **66**, N 1. — P. 7–11.
6. Anders A., Brown I., Dickinson M., MacGill R. High ion charge states in a high-current, short-pulse vacuum arc ion source // *Rev. Sci. Instrum.* — 1996. — **67**, N 3. — P. 1202–1206.
7. Окс Е. Источники электронов с плазменным катодом. — Томск: Томск. гос. ун-т, 2005. — С. 3–78.
8. Burdovitsin V., Oks E. Hollow cathode plasma electron gun for beam generation // *Rev. Sci. Instrum.* — 1999. — **70**, N 5. — P. 2975–2978.
9. Zirkov I., Burdovitsin V., Litovko I., Oks E. Generation of focused electron beam by plasma electron gun // *Изв. вузов. Физика. Приложение С*. — 2006. — № 11. — С. 67–69.

Поступила 04.07.2007