

ФИЗИКА

УДК 537.5

АЛГОРИТМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДВИЖЕНИЯ ИОННОГО ПОТОКА И ХАРАКТЕРИСТИК ИОННОГО ПУЧКА

канд. техн. наук, доц. О.Н. ПЕТРОВИЧ, И.С. РУСЕЦКИЙ
(Полоцкий государственный университет)

Предложен алгоритм численного расчета ионных пучков в совмещенных электростатическом и магнитостатическом полях. Разработаны алгоритмы моделирования ионного потока, основанные на гидродинамическом методе и методе больших частиц.

Ключевые слова: численное моделирование, методы расчета ионно-оптических систем, метод деформируемых трубок тока, метод больших частиц, гидродинамический метод.

Введение. Развитие нанотехнологий и создание современных наноматериалов активизировало теоретические и прикладные исследования в области разработки источников положительных ионов и плазмы. Развитие методов моделирования ионно-плазменных систем осложняется подвижностью плазменной поверхности, служащей эмиттером положительных ионов. В работе [1] предложен алгоритм численного расчета формирования и движения положительных ионных пучков в электростатическом поле ионно-оптической системы с плазменным эмиттером, основанный на дискретизации потока ионов токовыми трубками с учетом подвижности границы плазма – ионный пучок [2].

В рамках данного исследования алгоритм, предложенный в работе [1], был усовершенствован с целью построения численных методов расчета формирования и движения ионного пучка в совмещенных аксиально-симметричных электростатическом и магнитостатическом полях с применением технологии декомпозиции расчетной области [3] и технологии построения квазиструктурированных сеток [4].

Для электростатических систем формирования и ускорения ионного потока с компенсацией пространственного заряда в статье предложен алгоритм, основанный на гидродинамическом методе, который не требует нахождения траекторий частиц потока. В случае источника ионов, испускаемых с поверхности неоднородной плазмы, разработан алгоритм, основанный на методе больших частиц [5].

Алгоритм моделирования движения ионного потока в аксиально-симметричных электростатическом и магнитостатическом полях. Численное моделирование электромагнитных полей проводится на квазиструктурированной сетке с наложением расчетных областей по алгоритму, изложенному в работе [4]. Плотность тока j_{i0} ионов пучка, инжектированных свободной поверхностью плазмы, находится с учетом возможного движения плазменного эмиттера в ускоряющий промежуток с направленной скоростью [1]:

$$j_{i0} = en_{pl} \left(0, 61 \sqrt{kT_e / m_i} - v_{pl-i} \right), \quad (1)$$

где v_{pl-i} – скорость движения границы раздела плазма – ионный пучок;

e и m_i – заряд и масса положительного иона соответственно;

n_{pl} – концентрация плазмы;

k – постоянная Больцмана;

T_e – температура плазменных электронов.

В этом алгоритме движение потока ионов описывается токовыми трубками. Уравнение граничной траектории трубки тока ионов в цилиндрической системе координат (r, θ, z) в меридианной плоскости в дифференциальной форме [6]:

$$\frac{d^2 r}{dz^2} = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} - \frac{\partial \Phi}{\partial z} \frac{dr}{dz} \right) \left(1 + \left(\frac{dr}{dz} \right)^2 \right) / \left(2(\Phi - \Phi_{pl}) - \frac{m_i \mathcal{Q}_0^2}{e} \right), \quad (2)$$

где \mathcal{Q}_0 – начальная скорость ионов, эмитированных плазмой с потенциалом Φ_{pl} ;

Φ – эквивалентный потенциал, который определяется скалярным потенциалом электростатического поля Φ и магнитным потоком Ψ азимутальной составляющей векторного потенциала A_θ :

$$\Phi = \varphi(r, z) + \frac{e}{8\pi^2 m_i} \frac{(\Psi - \Psi_0)^2}{r^2}, \quad \Psi = A_0 2\pi r, \quad (3)$$

где Ψ_0 – магнитный поток, пронизывающий поверхность эмиттера.

Численное интегрирование уравнения (2) позволяет определить фазовую характеристику пучка заряженных частиц и значения радиуса пучка в каждом поперечном сечении потока для заданного значения начальной энергии частиц.

Азимутальная координата ионов, движущихся на границе токовой трубки, рассчитывается путем численного решения дифференциального уравнения:

$$\frac{d\theta}{dz} = -\frac{e}{2\pi m_i} \frac{\Psi - \Psi_0}{r^2} \sqrt{\frac{1 + \left(\frac{dr}{dz}\right)^2}{g_0^2 - \frac{2e}{m_i}(\Phi - \varphi_{pl})}}. \quad (4)$$

Плотность тока j_i и объемный заряд ρ_i ионов, эмитированных плазмой, определяются по формулам

$$j_i = \frac{j_{i0} S_0}{S_n(z)}, \quad (5)$$

$$\rho_i = \frac{j_{i0} S_0}{\sqrt{g_0^2 - \frac{2e}{m_i}(\varphi - \varphi_{pl})} S_n(z)}, \quad (6)$$

где $S_n(z)$ – площадь поперечного сечения трубки тока пучка;

$j_{i0} S_0$ – ионный ток эмиссии;

S_0 – площадь эмиссионной поверхности плазмы для каждой трубки тока.

В исходном приближении объемный заряд ионного пучка считается равным нулю, и проводится расчет поля электродов и трубок тока в этом поле. В каждом последующем приближении поле рассчитывается уже с учетом объемного заряда, распределенного по трубкам тока. Вычисления продолжаются до получения достаточно малых отклонений в ходе траекторий в двух последовательных приближениях. По завершении итерационного процесса изменяется положение поверхности плазменного эмиттера и форма плазменного мениска в соответствии с граничными условиями

$$\varphi|_{pl} = \varphi_{pl}, \quad n_{pl} k T_e = \frac{\varepsilon_0 E|_{pl}^2}{2}, \quad (7)$$

где $\varphi|_{pl}$ – потенциал и $E|_{pl}$ – напряженность поля на границе плазмы;

ε_0 – электрическая постоянная.

Расчеты продолжаются до тех пор, пока положение и форма эмиссионной поверхности не будут определены с заданной точностью.

Алгоритм моделирования движения ионного потока и характеристик ионного пучка, основанный на методе больших частиц. В случае неоднородной плазмы в источниках ионов с плазменным эмиттером плотность тока на разных участках поверхности эмиттера может существенно отличаться. В этом случае для корректного расчета влияния сил пространственного заряда ионов, приводящих к уширению пучка, необходимо увеличивать число трубок тока. В результате количество граничных траекторий токовых трубок возрастает. В этом случае при разбиении эмиттера на большое число слоев площадью S_{0k} , которые представляют собой начало каждой трубки тока, для расчета характеристик ионного пучка применим следующий подход. Будем рассматривать трубку тока как траекторию большой частицы, начальная площадь которой S_{0k} . При движении большой частицы ее площадь может изменяться вследствие расхождения (или сближения) физических частиц, составляющих большую частицу.

Аппроксимируем движение физических частиц на границах k -й токовой трубки (большой частицы) внутри ячейки квазиструктурированной сетки как совокупность равноускоренных движений по координатным осям, так как напряженность поля в достаточно малой области ячеек сетки можно считать постоянной. Рассчитаем компоненты скорости и координаты такой частицы при смещении ее на один шаг сетки h_z вдоль оси z (рисунок).

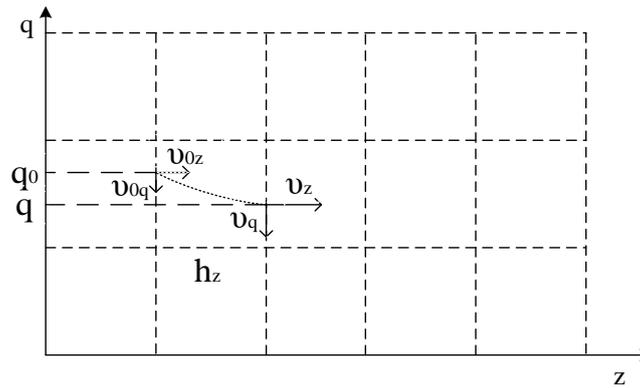


Рисунок. – Движение физической частицы внутри ячейки сетки расчетной области

Проекции ускорений на координатные оси внутри рассматриваемой ячейки сетки найдем из уравнений Ньютона

$$m_i \ddot{q} = -e \frac{\partial \varphi}{\partial q}, \quad (8)$$

где $q = \{r, z\}$ для цилиндрического потока и $q = \{x, y, z\}$ для ленточного.

Рассчитаем проекцию скорости на ось z и время смещения t частицы на один шаг сетки h_z по оси z :

$$\vartheta_z = \sqrt{\vartheta_{0z}^2 + 2h_z \ddot{z}}, \quad t = \frac{\vartheta_z - \vartheta_{0z}}{\ddot{z}}. \quad (9)$$

Определим компоненты скорости и координаты вдоль других координатных осей:

$$\vartheta_q = \vartheta_{0q} + \ddot{q}t, \quad q = q_0 + \vartheta_{0q}t + \frac{1}{2}\ddot{q}t^2. \quad (10)$$

Через значения координат границ большой частицы рассчитаем площадь ее поперечного сечения (площадь трубки тока) S_k в плоскости $z = const$.

Плотность тока j_i и объемный заряд ρ_i ионов, вносимый большой частицей в узлы сетки расчетной области, определим по формулам

$$j_i = \frac{j_{i0} S_{0k}}{S_k}, \quad \rho_i = \frac{j_{i0} S_{0k}}{\sqrt{\vartheta_q^2 + \vartheta_z^2} S_k}. \quad (11)$$

Далее повторяем алгоритм, смещая большую частицу на следующий шаг сетки вдоль оси z .

Алгоритм моделирования формирования и ускорения ионного потока с компенсацией пространственного заряда. Построение экономичного алгоритма моделирования формирования ионного потока с компенсацией пространственного заряда вследствие ионизационных процессов или принудительного введения в пучок частиц противоположного знака требует отказа от траекторного анализа движения различных видов заряженных частиц в электростатических системах. С этой целью предлагается технология [6], которая позволяет рассчитать распределения плотности объемных зарядов различных видов заряженных частиц без построения траекторий их движения.

Основу данной технологии составляет гидродинамическое уравнение неразрывности потока и уравнения движения частиц потока в электростатическом поле:

$$\frac{\partial \rho_u}{\partial t} = \rho_c - \text{div}(\rho_u \cdot \vec{\vartheta}_u), \quad (12)$$

$$m \dot{r} = -e \frac{\partial \varphi}{\partial r}, \quad m \ddot{z} = -e \frac{\partial \varphi}{\partial z}, \quad (13)$$

где $\rho_u, \vec{\vartheta}_u$ – плотность объемного заряда и скорость движения заряженных частиц u -го вида в потоке; m и e – масса и заряд частицы соответственно; ρ_c – пространственный заряд частиц, введенных в ионный пучок.

Радиальная и аксиальная компоненты полной скорости частицы $\vec{\mathfrak{Q}}_u$ рассчитываются через значения полной скорости в соответствии с законом сохранения энергии.

$$|\mathfrak{Q}_{ur}| = \frac{|\mathfrak{Q}_u|}{\sqrt{1 + \left(\frac{\sum \frac{\partial \varphi}{\partial z}}{\sum \frac{\partial \varphi}{\partial r}} \right)^2}}, \quad |\mathfrak{Q}_{uz}| = \frac{|\mathfrak{Q}_u|}{\sqrt{1 + \left(\frac{\sum \frac{\partial \varphi}{\partial r}}{\sum \frac{\partial \varphi}{\partial z}} \right)^2}}. \quad (14)$$

Значения плотности тока и объемных зарядов различных видов заряженных частиц вычисляются из уравнения неразрывности. Площадь поперечного сечения пучка и его радиус R_i определяются из условия, в соответствии с которым поток вектора j_i через площадь, ограниченную окружностью радиуса R_i , превышает 90% значения тока пучка.

Заключение. Разработан алгоритм численного метода решения нелинейных самосогласованных задач по расчету движения ионного потока в электростатических и магнитостатических полях, основанный на аппроксимации пучка заряженных частиц деформируемыми трубками тока. Для случая неоднородной плазмы, а также при моделировании электростатических систем формирования ионного пучка с компенсацией объемного заряда предложены алгоритмы, основанные на методе больших частиц и гидродинамическом описании потока. Изложенные алгоритмы могут быть использованы при численном моделировании электростатических и магнитостатических систем формирования, ускорения, транспортировки ионных пучков, при компьютерном проектировании вакуумных и газоразрядных приборов ионной техники, электрофизического оборудования для плазменно-пучковых технологий.

Работа выполнена при финансовой поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (проект № Ф17-122).

ЛИТЕРАТУРА

1. Петрович, О.Н. Алгоритм моделирования ионно-оптической системы с плазменным эмиттером / О.Н. Петрович, И.С. Русецкий // Вестн. Полоц. гос. ун-та. Сер. С, Фундам. науки. – 2016. – № 12. – С. 71–74.
2. Stekolnikov, A.F. Simulation of formation of an intensive electron beam in bipolar electron-optical system with the plasma anode / A.F. Stekolnikov, V.A. Gruzdev, O.N. Petrovich // Problems of Atomic Science and Technology. Series: Plasma Physics. – 2002. – № 5. – С. 113–114.
3. Sveshnikov, V.M. Simulation of a Moving Boundary in Plasma Electron Sources / V.M. Sveshnikov, O.N. Petrovich, L.V. Vshivkova // IEEE Transactions on Plasma science. – 2013. – Vol. 41. – Issue 8. – Part 2. – P. 2166–2170.
4. Петрович, О.Н. Численные методы расчета электромагнитных полей на квазиструктурированных сетках в устройствах плазменной эмиссионной электроники / О.Н. Петрович, И.С. Русецкий // Вестн. Полоц. гос. ун-та. Сер. С, Фундам. науки. – 2018. – № 4. – С. 124–127.
5. Хокни, Р. Численное моделирование методом частиц / Р. Хокни, Дж. Иствуд. – М.: Мир, 1987. – 640 с.
6. Петрович, О.Н. Моделирование электронно-оптических систем с плазменным эмиттером : дис. ... канд. техн. наук : 05.13.18 / О.Н. Петрович. – Новополоцк, 2012. – 199 л.

Поступила 30.08.2019

ALGORITHMS OF SIMULATION OF ION FLOW MOTION AND CHARACTERISTICS OF THE ION BEAM

O. PETROVICH, I. RUSETSKI

The algorithm of numerical calculation of the ion beams in combined electrostatic and magnetostatic fields is proposed. Algorithms of simulation of the ion flow based on the hydrodynamic method and the method of large particles are developed.

Keywords: numerical simulation, methods of calculating of ion-optical systems, method of deformable current tubes, large particle method, hydrodynamic method.