

P5-2003-100

Л. В. Бобылева, Е. П. Жидков, И. В. Кузнецов,
Э. А. Перельштейн

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ИОНОВ
В СЕПАРАТОРЕ ВИНА**

Направлено в журнал «Математическое моделирование»

Введение

Фильтры Вина находят широкое применение в ядерной физике /1,2/ и прикладных исследованиях (ионно-лучевая имплантация, изучение медико-биологических объектов, диагностика поверхности твердых тел) /3,4/. Фильтры Вина представляют собой сепараторы по массе и энергии, действие которых основано на разделении заряженных частиц в скрещенных электрических и магнитных полях, перпендикулярных друг другу. В ядерно-физических экспериментах с низкоэнергетическими пучками (20 – 100 кэВ) фильтры Вина используются в области сравнительно легких масс ядер (с массовым числом $A = 10 - 80$). В последние годы в ОИЯИ реализуется проект, направленный на получение пучков радиоактивных нейтронно-обогащенных ядер низкой энергии для изучения осколков деления с $A = 60 - 140$ /5,6/. Для проведения указанных экспериментальных исследований на пучках низкоэнергетических осколков достаточно использовать масс-сепаратор с умеренным разрешением ($R \geq 100 - 200$). Для этой цели вполне подходит фильтр Вина.

До сих пор динамика частиц в фильтре Вина исследовалась аналитически в одночастичном подходе и линейном приближении /3,4/. Современное развитие фильтров Вина в различных областях применения требует улучшения характеристик сепарируемых пучков (уменьшение аберрационных эффектов, повышение разрешения, увеличение токов пучков). Соответственно, при создании новых сепараторов возникает проблема анализа динамики многокомпонентных пучков заряженных ионов, учета собственного пространственного заряда пучков с большими токами и нелинейности движения частиц. Поэтому для решения сложных нелинейных задач динамики ионных пучков в сепараторах необходимо использовать математическое моделирование.

В данной работе для описания динамики ионов в фильтре Вина используется метод макрочастиц, получивший широкое распространение при моделировании процессов в плазме, ускорителях и в технике СВЧ /8, 9/. Динамика пучка ионов представляется движением большого числа $N \gg 1$ модельных макрочастиц с зарядом на единицу длины пучка nZe и массой nAM , где e и M — заряд и масса протона, соответственно, Z — зарядность иона, A — его массовое число, $n = \frac{N_s}{N}$ — параметр укрупнения, N_s — число ионов на единицу длины пучка.

Моделирование динамики ионов реализуется путем интегрирования уравнений движения макрочастиц в общем случае в 6-мерном фазовом пространстве (трехмерное пространство координат и трехмерное пространство скоростей частиц) с заданным начальным шестимерным распределением частиц. Для моделирования начального распределения частиц в фазовом пространстве используется специальный генератор начального распределения /9/.

При интегрировании уравнений движения макрочастиц электрическое и магнитное поля, действующие на частицы, представляются в виде суммы внешних и собственных полей пространственного заряда пучка:

$$\begin{aligned}\vec{E} &= \vec{E}_e + \vec{E}_s, \\ \vec{B} &= \vec{B}_e + \vec{B}_s.\end{aligned}\quad (1)$$

Внешние электромагнитные поля считаются заданными функциями координат и времени. Собственные поля пространственного заряда пучка пересчитываются на каждом элементарном временном шаге интегрирования путем решения уравнений Максвелла. В интересующем нас случае нерелятивистских ионных пучков с медленно меняющимися во времени параметрами достаточно использовать квазистатическое приближение и искать электростатические поля ионного пучка с помощью уравнения Пуассона, а также пренебрегать собственным магнитным полем пучка. Кроме того, ионный пучок достаточно однороден вдоль оси распространения z и различные сечения пучка движутся практически с одинаковыми скоростями v_0 . Это позволяет считать электрическое поле не зависящим от координаты вдоль распространения пучка (продольной координаты). Таким образом, мы приходим к использованию двумерного уравнения Пуассона. При численном моделировании требуется, чтобы шаг интегрирования уравнений движения макрочастиц был достаточно мал по сравнению с характерными временами (расстояниями вдоль продольной координаты) задачи. Такой подход обеспечивает решение самосогласованной задачи динамики пучка, поскольку макрочастицы движутся с учетом собственного поля, которое определяется движением всех частиц пучка. Математическая модель реализована в виде модульной СИ++ программы IBS (Ion Beam Simulation).

1. Математическая модель

1.1. Начальное распределение частиц в фазовом пространстве

В задачах транспортировки и сепарации ионных источников начальное распределение частиц в фазовом пространстве определяется распределением ионов на выходе источника ионов. Источник работает в стационарном режиме и ионный пучок непрерывный. Таким образом обеспечиваются условия стационарного распределения пучка. Разбросом по продольным скоростям пучка можно пренебречь, т.е. считать пучок моноэнергетическим. В результате фазовое пространство фактически четырехмерное, соответствующее движению частиц в поперечных сечениях пучка. Особенность моделирования транспортировки и сепарации пучка состоит в том, что детальное распределение на выходе ионного источника обычно практически неизвестно. Определены лишь такие основные параметры пучка, как ток I_a , размеры пучка a_x , a_y (или его среднеквадратичные размеры x_{RMS} , y_{RMS}) и угловой разброс пучка θ_x , θ_y (или среднеквадратичный угловой разброс θ_{xRMS} , θ_{yRMS}), которые выражаются через моменты функции распределения пучка в фазовом пространстве до второго порядка. Поэтому для моделирования используются простые начальные распределения, которые дают значения моментов до второго порядка, совпадающие с заданными. Мы используем здесь два модельных распределения: распределение Владимирского–Капчинского (ВК) /10/ и гауссовское распределение. Достоинство первого из них состоит в том, что оно дает равномерное, ограниченное эллипсами, распределение плотности во всех проекциях на координатные плоскости фазового пространства (в декартовой системе координат) и достаточно хорошее приближение плотности пучка на выходе из источника. Второе достоинство ВК-распределения состоит в том, что в линейных по отклонениям от оси движения пучка электромагнитных полях оно приводит к известным уравнениям для огибающих пучка (для поперечных размеров пучка, меняющихся по длине его распространения). При условии малости нелинейности полей среднеквадратичные размеры произвольного пучка на конечном интервале времени близки к соответствующим среднеквадратичным размерам, полученным с использованием ВК-распределения. Поэтому это распределение удобно для тестирования метода макрочастиц. И наконец, третье достоинство, связанное с ограниченностью ВК-распределения в фазовом пространстве, заключается в том, что его представление макрочастицами требует меньшего их числа, т.е. приводит к меньшим затратам памяти и времени вычислений при моделировании. Однако, используя начальное ВК-распределение, мы теряем возможность анализировать эффекты, связанные с начальной неоднородностью плотности пучка по его сечению, и, как следствие этого, влияние нелинейности собственных полей по отклонениям от оси пучка. Этот недостаток компенсируется здесь сравнительным анализом результатов гауссовского и ВК-распределений.

Гауссовское и ВК-распределение строятся на основе общего для них положения о выборе однородного распределения на поверхностях вложенных четырехмерных гиперэллипсоидов с общим центром симметрии. При построении генераторов начальных распределений использовался алгоритм, разработанный в /11/. Вложенные гиперэллипсоиды в этом алгоритме — подобные и характеризуются одним параметром F . Генерация начального распределения заполнения фазового объема осуществляется по заданным значениям начальных размеров и угловых расходимостей пучка.

Поверхности гиперэллипсоидов задаются с помощью параметров F и заданных начальных размеров и угловых расходимостей уравнением

$$F = A_x^2 + A_y^2, \quad (2)$$

где функции A_x и A_y для распределения ВК описывают семейство эллипсов на фазовых плоскостях

$(x, x' = \frac{dx}{dz})$ и $(y, y' = \frac{dy}{dz})$ соответственно

$$A_x^2 = \frac{x^2}{\theta_x^2} + \frac{x'^2}{a_x^2}, \quad A_y^2 = \frac{y^2}{\theta_y^2} + \frac{y'^2}{a_y^2}. \quad (3)$$

В случае гауссовского распределения параметры пучка на входе в канал заменяются их среднеквадратичными значениями.

Таким образом, начальная функция распределения частиц в четырехмерном фазовом пространстве $f(x, x', y, y')$ равна

$$f = \frac{dN}{dx dy dx' dy'} = f(F). \quad (4)$$

Функция распределения нормируется на единицу:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, x', y, y') dx dx' dy dy' = 1. \quad (5)$$

Заметим, что функция распределения N частиц тогда есть Nf .

В простейшем случае распределения ВК (называемого также микроканоническим) все частицы расположены с равномерной плотностью на поверхности одного гиперэллипсоида с параметром F , равным единице.

Для гауссовского распределения макрочастицы расставляются по гиперэллипсоидам согласно функции распределения:

$$f(F) = \frac{1}{4\pi^2} e^{-\frac{F}{2}}. \quad (6)$$

На рис.1а, б представлены результаты моделирования начального распределения частиц: микроканонического (ВК) – рис.1а и распределения Гаусса – рис.1б. Параметры распределения: $N = 10\,000$ - количество частиц, размеры пучка $a_x = 1$, $a_y = 0.5$ и угловой разброс пучка $\theta_x = \theta_y = 0.015$.

Качество генерации начального распределения частиц характеризуется относительной ошибкой

$$\delta = \left| \frac{\varepsilon_{\text{выч}} - \varepsilon}{\varepsilon} \right| \quad \text{вычисленных среднеквадратичных эмиттансов } \varepsilon_{\text{выч}} \text{ пучка.}$$

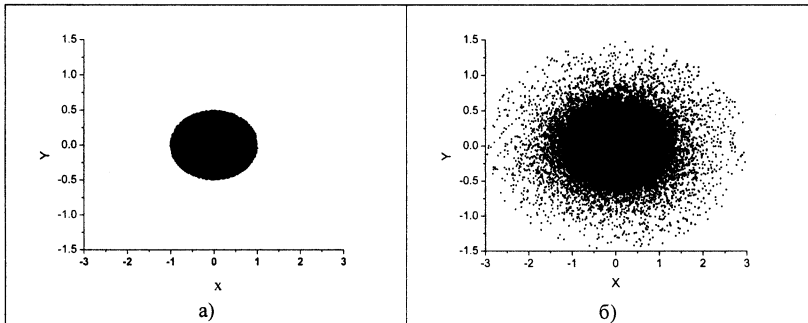


Рис. 1. Начальные распределения частиц

Эмиттансы ε (нормализованные) пучка определены таким образом, что для распределения ВК и ориентации полуосей гиперэллипсоида по координатным осям они, соответственно, равны $\varepsilon_x = a_x \theta_x$, $\varepsilon_y = a_y \theta_y$, причем среднеквадратичные их значения $\varepsilon_{xRMS} = \frac{a_x \theta_x}{4}$, $\varepsilon_{yRMS} = \frac{a_y \theta_y}{4}$. Для гауссовского распределения среднеквадратичные эмиттансы равны $\varepsilon_{xRMS} = a_{xRMS} \theta_{xRMS}$, $\varepsilon_{yRMS} = a_{yRMS} \theta_{yRMS}$. Относительные ошибки среднеквадратичных эмиттансов пучка для $N = 10\,000$ не превышали $\delta = 5 \cdot 10^{-5}$ для равномерного распределения и $\delta = 3 \cdot 10^{-4}$ для распределения Гаусса, соответственно.

1.2. Уравнения движения макрочастиц

Здесь рассматривается движение многокомпонентного ионного пучка в модельном «сепараторе Вина», который включает квадрупольный дублет линз, собственно фильтр Вина и свободные промежутки. Схема сепаратора Вина представлена на рис. 2. Ионный пучок, пройдя квадрупольный дублет, влетает в пространство между потенциальными пластинами длиной L (см), в котором на ионы действуют скрещенные, пространственно однородные, электрическое поле с напряженностью E (направленное по оси Y) и магнитное поле с индукцией B (направленное по оси X). Плоскость анализирующей щели расположена на расстоянии l от фильтра. Предполагается, что влияние краевых

полей устранено путем использования специальных вставок, поперечные размеры пучка внутри фильтра Вина намного меньше расстояний между пластинами и полюсными наконечниками магнита, пространственная однородность электрического и магнитного полей обеспечивается специальным образом [7].

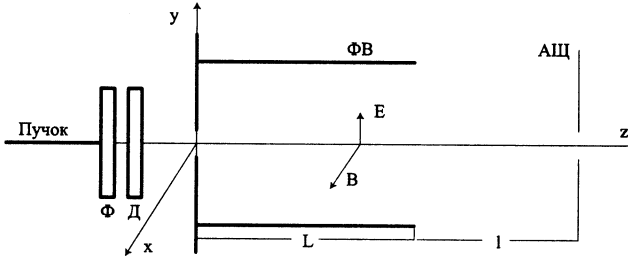


Рис. 2. Схема сепаратора Вина, принятая в рассматриваемой модели:

Ф – фокусирующая линза, Д – дефокусирующая линза,

ФВ – фильтр Вина, АЩ – анализирующая щель

Для моделирования динамики пучка в фильтре Вина необходимо задать внешние электромагнитные поля в трех типовых областях (по продольной координате): в областях магнитных квадруполов, в свободном от полей пространстве и в области скрещенных статических электрического и магнитного полей (собственно в фильтре Вина).

В области магнитного квадрупольа уравнения движения макрочастиц имеют вид:

$$\frac{dx}{dz_0} = v_x, \quad \frac{dy}{dz_0} = v_y, \quad \frac{dz}{dz_0} = v_w, \quad (7)$$

$$\frac{dv_x}{dz_0} = -g_Q v_w x + \frac{Z}{A} E_{sx}, \quad \frac{dv_y}{dz_0} = g_Q v_w y + \frac{Z}{A} E_{sy}, \quad \frac{dv_w}{dz_0} = g_Q (v_x x - y v_y),$$

где $z_0 = v_0 t$, $g_Q = ZeG / AMc v_0$, G – градиент магнитного поля квадрупольа.

Начальные условия в соответствии с (1.7) задаются следующим образом:

$$x|_{z_0=0} = x, \quad y|_{z_0=0} = y, \quad v_x|_{z_0=0} = x', \quad v_y|_{z_0=0} = y', \quad z|_{z_0=0} = 0, \quad v_w|_{z_0=0} = v_0.$$

В области собственно фильтра Вина уравнения движения макрочастиц следующие:

$$\frac{dx}{dz_0} = v_x, \quad \frac{dy}{dz_0} = v_y, \quad \frac{dz}{dz_0} = v_w, \quad (8)$$

$$\frac{dv_x}{dz_0} = \frac{Z}{A} E_{sx}, \quad \frac{dv_y}{dz_0} = g_w (E - v_w \beta B) + \frac{Z}{A} E_{sy}, \quad \frac{dv_w}{dz_0} = g_w v_y B,$$

где $g_w = \frac{eZ}{AMc^2 \beta^2}$, $\beta = \frac{v_0}{c}$, E – напряженность электрического поля и B – индукция магнитного поля в фильтре Вина.

В свободных промежутках движение макрочастиц определяется уравнениями типа вышеприведенных с нулевыми внешними полями.

В данной работе для численного интегрирования уравнений движения макрочастиц выбран метод Рунге – Кутты четвертого порядка точности.

1.3. Численное решение уравнения Пуассона

Потенциал пространственного заряда пучка Φ для заданного распределения плотности пространственного заряда ρ находится из решения двумерного уравнения Пуассона

$$\Delta \Phi = -4\pi \rho. \quad (9)$$

В процессе моделирования использовались безразмерные потенциал и плотность заряда, которые соответственно равны:

$$U = \frac{c}{I_A \beta^2} \Phi, \quad Q = \frac{4\pi\rho c}{I_A \beta^2}, \quad (10)$$

где $I_A = 3.13 \cdot 10^7 (A)$.

С учетом соотношений (10) уравнение Пуассона примет вид

$$\Delta U = -Q. \quad (11)$$

Для решения уравнения Пуассона выбран метод преобразования Фурье [8,12]. В соответствии с требованиями используемых стандартных программ Быстрого Преобразования Фурье на область, включающую сечение пучка, накладывается прямоугольная сетка с равноотстоящими узлами, причем число узлов сетки является целой степенью 2.

В двумерных декартовых координатах уравнение Пуассона и соответствующие граничные условия Дирихле для потенциала U на границе прямоугольной области Γ с поперечными размерами $a \times b$ записываются следующим образом:

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} = -Q(x, y), \quad U(\Gamma) = 0. \quad (12)$$

Плотность пространственного заряда пучка и неизвестная функция потенциала в узлах сетки представляются в виде рядов Фурье:

$$U_{ij} = \sum_{n=1}^{N_x-1} \sum_{m=1}^{N_y-1} \bar{U}_{nm} \sin\left(\frac{\pi ni}{N_x}\right) \sin\left(\frac{\pi mj}{N_y}\right), \quad (13)$$

$$Q_{ij} = \sum_{n=1}^{N_x-1} \sum_{m=1}^{N_y-1} \bar{Q}_{nm} \sin\left(\frac{\pi ni}{N_x}\right) \sin\left(\frac{\pi mj}{N_y}\right), \quad (14)$$

где N_x, N_y – число узлов сетки по x и по y соответственно.

Прежде всего определяется распределение пространственного заряда макрочастиц среди узлов сетки. В данной работе выбран такой способ распределения, при котором заряд каждой частицы с координатами (x_n, y_n) распределяется среди ближайших четырех узлов обратно пропорционально расстоянию от частицы до каждого узла. При этом

$$Q_{ij} = Q_0 \sum_{n=1}^N \left(1 - \frac{|x_n - x_i|}{h_x}\right) \left(1 - \frac{|y_n - y_j|}{h_y}\right), \quad (15)$$

где h_x, h_y – шаг сетки по x и по y соответственно. Весовой коэффициент Q_0 связан с плотностью пространственного заряда моделируемой частицы ρ_0 соотношением

$$Q_0 = \frac{4\pi\rho_0\beta c}{I_A \beta^3} = \frac{4\pi I_a}{NI_A \beta^3 h_x h_y}, \quad (16)$$

где $I_a (A)$ – ток ионного пучка (для многокомпонентного ионного пучка соответственно ток компоненты).

После определения плотности пространственного заряда макрочастиц Q_{ij} в узлах сетки поле объемного заряда пучка находят из решения уравнения Пуассона. Компоненты электрического поля в узлах сетки находятся дифференцированием сеточной функции потенциала, причем для вычисления производных использовались разностные формулы четвертого порядка точности по h ($h = h_x = h_y$ – шаг сетки). Необходимые для интегрирования уравнений движения значения напряженности электрического поля в местонахождении макрочастиц находятся с использованием интерполяции полученных сеточных функций $E_{x_{ij}}, E_{y_{ij}}$.

Чтобы оценить погрешность численного решения уравнения Пуассона, сравнивались результаты вычислений напряженности собственного электрического поля для равномерного и гауссовского распределений плотности заряда с соответствующими точными значениями (для случаев, когда напряженности собственного электрического поля имеют простые аналитические выражения).

Для ВК-распределения плотность заряда равномерно распределена в круге радиуса a :

$$\rho = eN_s \frac{1}{\pi a^2}, \quad \text{где } N_s \text{ – линейная плотность заряда. Соответственно, } Q = \frac{4\pi e N_s c}{I_A \beta^3 \pi a^2} = \frac{4I_a}{I_A \beta^3 a^2},$$

$I_a = eN_a \beta c$ — ток пучка. Напряженность электрического поля для круга с равномерной плотностью заряда равна

$$E_r = \frac{2}{\beta^3} \frac{I_a}{I_A} \frac{r}{a^2}. \quad (17)$$

Для гауссовского распределения плотности пучка с азимутальной симметрией плотность заряда

$$\rho = \frac{eN_a}{2\pi r_{RMS}^2} \exp\left(-\frac{r^2}{2r_{RMS}^2}\right), \text{ где } r_{RMS} \text{ — среднеквадратичный радиус пучка. Аналитическое выражение}$$

для напряженности электрического поля

$$E_r = \frac{2}{\beta^3} \frac{I_a}{I_A} \frac{1 - \exp\left(-\frac{r^2}{2r_{RMS}^2}\right)}{r}. \quad (18)$$

Тестирование проводилось для числа крупных частиц $N = 10\,000$ и количества разбиений сетки $q = 2^5$ ($q = q_x = q_y$) при следующих выбранных параметрах: $I_a = 10^{-6}$ (А), $a = 1$ см, $E = 20$ кэВ, $Z = 1$, $A = 100$. На рис. 3 а, б приведены графики аналитических (17, 18) и численных зависимостей значений напряженностей собственного электрического поля E_r от радиуса r (см) для равномерного и гауссовского распределения плотности заряда пучка. Значения $E_{r \text{ точн}}$ (линия С) и $E_{r \text{ выч}}$ на прямых $y = 0$ (В) и $y = x$ (F) для равномерного распределения плотности приведены на рисунке 3 а. Значения $E_{r \text{ точн}}$ (линия D) и $E_{r \text{ выч}}$ на прямых $x = 0$ (В) и $y = 0$ (С) для гауссовского распределения плотности - рис. 3 б. Как видно из рисунков, использование в расчетах $N = 10\,000$ и $q = 2^5$ обеспечивает хорошее совпадение аналитических и численных значений напряженностей собственного электрического поля.

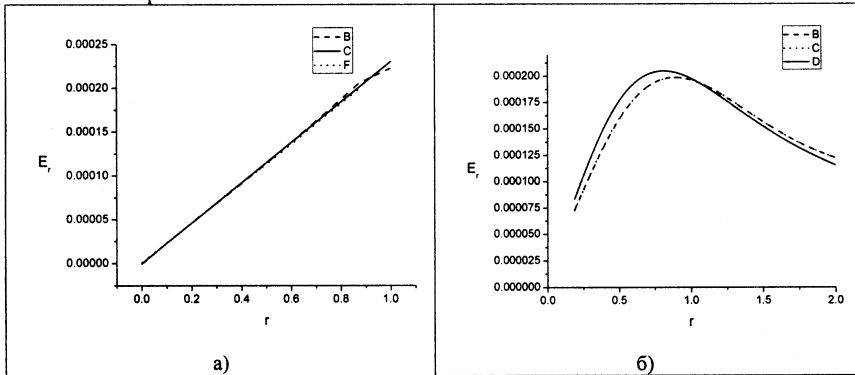


Рис. 3. Напряженности собственного электрического поля E_r для равномерного и гауссовского распределения плотности заряда пучка

Контроль точности численного решения уравнения Пуассона осуществлялся также с использованием относительной ошибки выполнения теоремы Гаусса

$$g = 1 - \frac{\left| \int E_n dl \right|}{\left| \int Q dS \right|}, \quad (19)$$

где E_n — нормальная компонента напряженности электрического поля на контуре L , охватывающем площадку S , где расположены заряды. При тестировании программы были получены следующие значения параметра g : для равномерного распределения плотности заряда пучка $g = 7.105 \cdot 10^{-4}$, для гауссовского — $g = 7.121 \cdot 10^{-4}$.

1.5. Свободный разлет пучка

С целью тестирования используемой модели крупных частиц приведем здесь сравнительные результаты численного решения задачи о свободном разлете пучка заряженных частиц с учетом углового разброса и пространственного заряда пучка с помощью данной модели и решения той же задачи по известным аналитическим модельным уравнениям для огибающей пучка.

Моделирование крупными частицами выполнялось с начальным равномерным распределением (типа ВК) частиц с параметрами, которые дают круговое сечение пучка с постоянной плотностью внутри круга радиуса $a = a_x = a_y = 1$ см. Эмиттанс пучка выбирался равным $\epsilon = 1.2$. Моделировалось движение ионов с зарядностью $Z = 1$, массовым числом $A = 100$, энергией $E = 20$ кэВ и значениями тока $I_a = 0$, $I_a = 10^{-2}$ (А).

Известное модельное уравнение, которое определяет огибающую $a(z)$ вдоль оси движения пучка z , имеет вид

$$\frac{d^2 a}{dz^2} = \frac{\epsilon^2}{a^3} + \frac{2ZI_a}{A\beta^3 I_A} \frac{1}{a} \quad (20)$$

Результаты вычислений зависимостей огибающих пучка от продольной координаты z (см) при свободном разлете по модели крупных частиц ($a_{\text{выч}}$ – линия С) и по уравнению (21) (a – линия В) приведены на рис. 4а, б. Графики огибающих пучка на рис. 4а характеризуют точность представления начального распределения крупными частицами при их числе $N = 10\,000$ и точность интегрирования уравнений движения крупных частиц без учета пространственного заряда пучка. Хорошее совпадение этих решений позволяет сделать вывод о хорошей точности счета. Графики на рис. 4б, кроме указанных характеристик, наглядно демонстрируют высокую точность нахождения собственного электрического поля в случае учета пространственного заряда пучка ($I_a = 10^{-2}$ (А), $N = 10\,000$, $q = 2^5$).

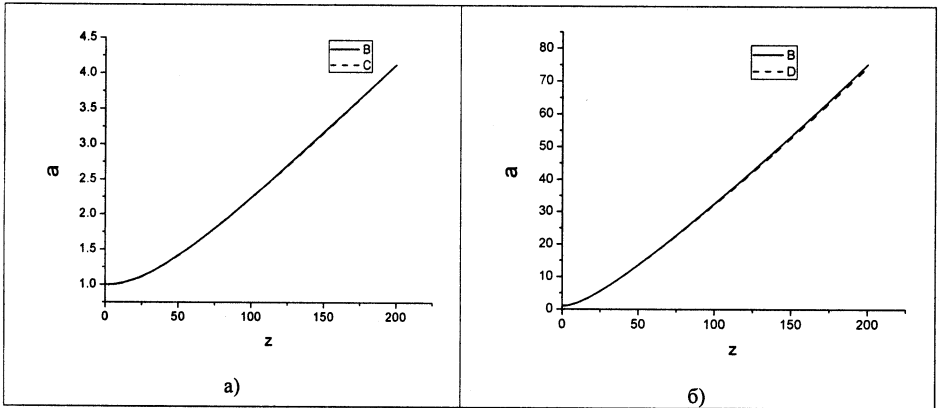


Рис. 4. Графики зависимостей огибающих пучка от продольной координаты при свободном разлете

По результатам вычислений были получены значения относительных погрешностей среднеквадратичных огибающих пучка $\Delta R_a = \left| \frac{a_{\text{выч}} - a}{a} \right|$, причем максимальное значение

$\max \Delta R_a = \max_{0 \leq z \leq 200} \left| \frac{a_{\text{выч}} - a}{a} \right| \leq 0.009$. Таким образом, можно сделать вывод о хорошей точности результатов вычислений.

2. Численное моделирование динамики ионов в сепараторе Вина методом крупных частиц с учетом собственного пространственного заряда пучка

2.1 Оптимизация фильтра Вина

Первоначальный анализ движения частиц в фильтре Вина без учета пространственного заряда пучка и оптимизация его параметров проводились на основе метода моментов /13/ в упрощенной схеме сепаратора Вина (см. рис. 2), не содержащей квадрупольных линз /14/.

Для выделенной ионной компоненты (соответствующие ей координаты и скорости будем обозначать индексом 0) электромагнитное поле в фильтре Вина выбирается таким образом, что выполняется соотношение

$$E - \frac{v_0}{c} B = 0. \quad (21)$$

Центральная частица выделенной компоненты движется вдоль оси z с постоянной скоростью v_0 . Малые вертикальные отклонения δy_0 в плоскости анализирующей щели для компоненты с массой $m_0 + \Delta m$ (m_0 -масса выделенной, распространяющейся вдоль оси z , компоненты) характеризуются дисперсионной функцией /4/:

$$D_m = \delta y_0 \frac{m_0}{\Delta m} = \frac{L}{2\theta_L} (1 - \cos\theta_L + \frac{l}{L}\theta_L \sin\theta_L). \quad (22)$$

где $\theta_L = \frac{eZBL}{cMAv_0}$. Считая на входе в фильтр величины вертикальных отклонений и скоростей частиц,

а также разброса по продольным скоростям статистически независимыми (инжекция частиц в фильтр Вина проводится в кроссовере пучка), для среднеквадратичного вертикального размера пучка $a_{yRMS}(L+l)$ в плоскости анализирующей щели можно получить соотношение

$$a_{yRMS}^2(L+l) = a_{yRMS}^2(0) + \frac{\overline{\delta v_z^2(0)}}{v_0^2} L^2 \Sigma_z^2 + \mathcal{G}_{yRMS}^2(0) L^2 \Sigma_y^2, \quad (23)$$

где $a_{yRMS}(0)$ и $\mathcal{G}_{yRMS}(0)$ – среднеквадратичный вертикальный размер и угловой разброс пучка на

входе в фильтр Вина, $\sqrt{\frac{\overline{\delta v_z^2(0)}}{v_0^2}}$ – среднеквадратичный относительный разброс продольных

скоростей. Функции $\Sigma_{z,y}$ равны:

$$\Sigma_z = \frac{1}{\theta_L} (\cos\theta_L - 1 - \frac{l}{L}\theta_L \sin\theta_L) = -2 \frac{D_m}{L}, \quad (24)$$

$$\Sigma_y = \frac{1}{\theta_L} (\sin\theta_L + \frac{l}{L}\theta_L \cos\theta_L). \quad (25)$$

Для пучков с большой угловой расходимостью имеет смысл оптимизировать параметры фильтра Вина таким образом, чтобы получить минимальные допустимые значения функции Σ_y и максимально возможные значения дисперсионной функции. Это достигается при значениях параметра θ_L , близких к $\frac{\pi}{2}$. Оптимальные значения отношениях l/L , соответствующие $\Sigma_y = 0$,

находятся с использованием формулы (25). Например, значению $\theta_L = 1.7$ соответствуют $l/L = 4.527$ и $D_m/l = 2.577$ см. Определим разрешающую способность фильтра Вина как

$$R_{m(E)} = \frac{m_0}{\Delta m} = \frac{E_0}{\Delta E_0} = \frac{|D_m|}{4a_{yRMS}(L+l)}. \quad (26)$$

Проведенная выше оптимизация приводит к тому, что разрешающая способность фильтра Вина

$$\text{становится близкой к предельной } R_{m(E)} \approx \frac{|D_m|}{4a_{yRMS}(0)}.$$

Для иллюстрации возможности разделения тяжелых осколков приведем результаты численного моделирования фильтра Вина без учета пространственного заряда пучка методом крупных частиц. Радиоактивные пучки осколков деления низкой энергии в ОИЯИ могут быть получены по следующей схеме /5,6/:



Рис.5. Схема получения радиоактивных пучков осколков деления низкой энергии в ОИЯИ

Электронный пучок с энергией 25 МэВ и током 20 мкА генерирует тормозное излучение на конвертере, под действием которого происходит деление ^{238}U , расположенного в нагретой до высокой температуры (больше 2000°C) камере. Осколки деления из камеры вместе с рабочим газом поступают в ионный источник. Планируется использование источников как с электронным ударом, так и с поверхностной ионизацией. Однозарядные ионы осколков деления и рабочего вещества из источника вытягиваются и ускоряются электрическим полем до энергии 20 – 25 кэВ, что достаточно для эффективного отбора ионов и формирования пучка ионов. Далее сложный по массовому составу пучок ионов направляется к масс-сепаратору для выделения осколков требуемой массы.

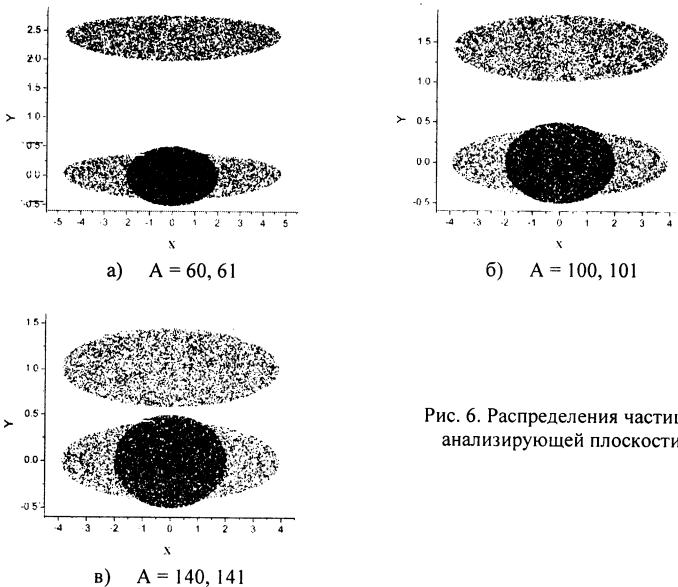


Рис. 6. Распределения частиц в анализирующей плоскости

Моделирование динамики пучка в сепараторе Вина проводилось на основе параметров, близких к оптимальным для $A = 100$. При значении индукции магнитного поля $B = 8$ кГс и энергии ионов 20 кэВ, которая соответствует напряжению на ЭЦР-источнике, требуется сравнительно невысокое значение напряженности электрического поля (1.56 кВ/см). Полагая $\theta_L = 1.7$, близким к оптимальному значению, получаем длину фильтра Вина $L = 43.4$ см. Сепарация различных ионов производится за счет изменения индукции магнитного поля. Начальное распределение в фазовом пространстве поперечных координат и скоростей частиц выбиралось в виде микроканонического распределения Владимирского – Капчинского /12/. Для имитации ленточного пучка полуразмеры эллиптического

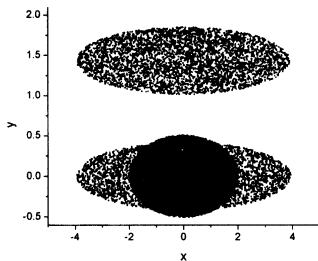
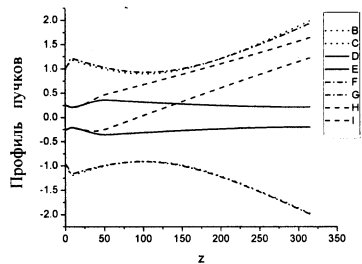
сечения пучка в координатной плоскости задавались как $a_x = 2$ см, $a_y = 0.5$ см. Угловой разброс пучка на входе ограничивался значениями, одинаковыми для обоих направлений $\vartheta_x = \vartheta_y = 0.015$ рад. Пучок считался моноэнергетическим. Канал сепаратора Вина в результате оптимизации с использованием моделирования характеризуется следующими параметрами. При моделировании пучок инжектируется непосредственно в магнитный дублет. Параметры магнитного дублета: градиент квадрупольной линзы - 2 кГс/см, длина линзы (по полю) - 4 см. Расстояние между дублетом и фильтром Вина - 2.7 см. Длина фильтра Вина - 43.4 см, индукция магнитного поля - 8 кГс. Расстояние от фильтра Вина до анализирующей щели ~ 261 см. Длина сепаратора равна $L_{\text{сеп}} \cong 316$ см. Полученные в результате расчета распределения частиц в анализирующей плоскости для выделяемых пучков с $A = 60, 100, 140$ и соответственно пучков с $A = 61, 101$ и 141 показаны на рис.6 а, б, в. Как видно из этих рисунков, в оптимальном варианте фильтра Вина можно получить разрешение на уровне выше 10^2 и обеспечить сепарацию тяжелых ионов с высокими значениями массовых чисел.

2.2. Результаты моделирования динамики ионов в сепараторе Вина с учетом собственного пространственного заряда пучка

С помощью данной модели можно также исследовать эффекты пространственного заряда в сепараторе Вина. Эффекты пространственного заряда, связанные с собственным электрическим полем пучка, могут привести к ухудшению разрешения сепаратора и, таким образом, ограничивают сверху токи ионного пучка. Рассматривались два вида начальных распределений частиц. Первое - распределение Владимирского - Капчинского дает линейную силу расталкивания частиц, отклонившихся от оси движения. Для учета нелинейных эффектов и анализа их влияния на динамику ионов используется распределение гауссовского типа.

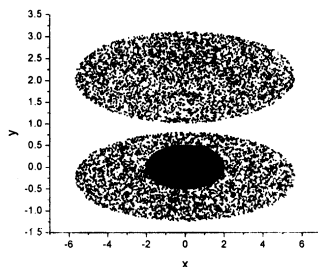
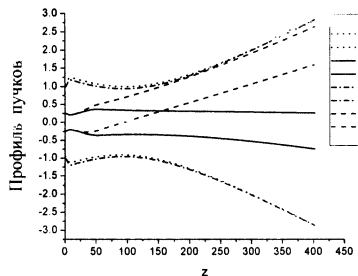
Моделирование динамики пучка в сепараторе Вина проводилось на основе параметров, близких к оптимальным. Эти параметры приведены в разделе 2.1. Начальные распределения однозарядных ионов выбирались с совпадающими для двух типов распределений среднеквадратичными размерами по поперечным координатам. Ток пучков ионов с $A = 100$ и 101 менялся от нуля до 5 мкА. Расстояние от фильтра Вина до анализирующей щели - 261 см для $I_a = 10^{-6}$ (А) и 347 см для $I_a = 5 \cdot 10^{-6}$ (А). Длина сепаратора равна $L_{\text{сеп}} \cong 316$ см для $I_a = 10^{-6}$ (А) и $L_{\text{сеп}} \cong 402$ см для $I_a = 5 \cdot 10^{-6}$ (А). Результаты вычисления среднеквадратичных огибающих пучков как функций длины сепаратора на рис. 7 приведены профили пучков в плоскостях XZ и YZ для равномерного распределения ($I_a = 0$ - рис. 7а, $I_a = 5 \cdot 10^{-6}$ (А) - рис. 7в) и гауссовского распределения ($I_a = 0$ - рис. 7д, $I_a = 5 \cdot 10^{-6}$ (А) - рис. 7ж), соответственно. Линии В и С соответствуют профилю пучка в плоскости XZ, D и E - в плоскости YZ для компоненты $A = 100$. Линии F и G соответствуют профилю пучка в плоскости XZ, H и I - в плоскости YZ для компоненты $A = 101$. Как видно из рисунка, в указанных пределах тока ионов сепаратор Вина дает хорошее разрешение на уровне 10^2 и влияние нелинейности собственного поля сказывается на него несущественно. Для наглядности на рис. 7 б, г, е, з показаны распределения плотности частиц в поперечных сечениях пучка на входе сепаратора и в плоскости анализирующей щели.

В выбранной нами схеме сепаратора используется источник ионов на основе электронноциклотронного резонанса, так называемый ЭЦР - источник. Для его работы применяются различные балластные газы. Токи ионов балластного газа значительно превосходят токи сепарируемых ионов, поэтому влияние собственного заряда ионов балластного газа на динамику сепарируемых ионов может оказаться существенным. Проблема работоспособности сепаратора с учетом ионов балластного газа анализировалась и решалась здесь в рамках модели макрочастиц на примере расчета динамики в сепараторе ионного пучка с атомными номерами $A = 100, 101$, распространяющегося вместе с ионами балластного газа - гелия ($A = 4$).



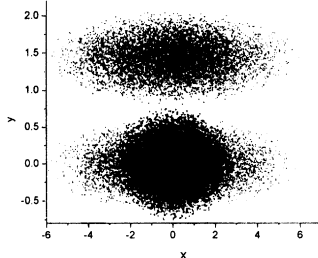
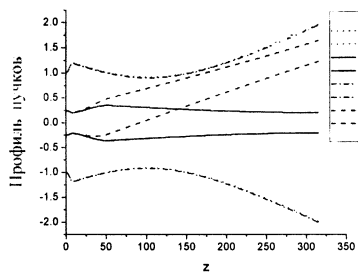
а)

б)



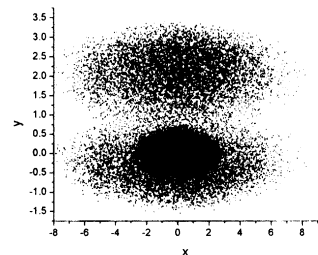
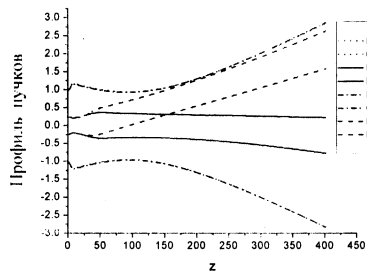
в)

г)



д)

е)



ж)

з)

Рис. 7. Профили пучков и распределения плотности частиц на входе сепаратора и в плоскости анализирующей щели

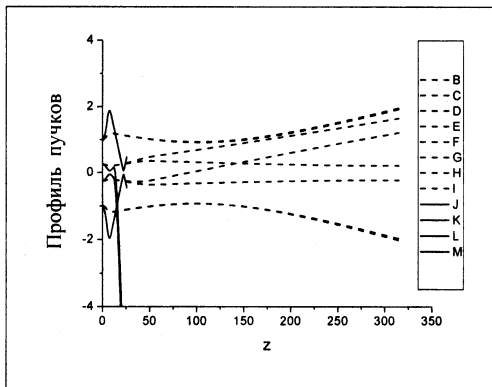


Рис. 8. Влияние балластного газа — гелия на динамику ионных пучков

Рис.8 иллюстрирует влияние балластного газа — гелия на динамику рассмотренных ионных пучков. Геометрические начальные параметры пучка гелия совпадают с параметрами сепарируемых пучков. Ток пучка гелия равен $I_a = 10^{-4}(A)$. Из рисунка следует, что балластный пучок (линии J, K, L, M) можно отсечь в районе фильтра Вина и влияние его на сепарируемые пучки невелико.

Для оценки точности вычислений по программе IBS расчеты проводились для различных значений шага интегрирования уравнений движения: $h1=0.1(см)$, $h2=2h1=0.2(см)$ для токов пучка $I_a = 0$, $I_a = 5 \cdot 10^{-6}(A)$ и компонент $A=100$, $A=101$. По результатам вычислений были получены значения относительных погрешностей среднеквадратичных огibaющих пучка

$$\Delta R_x = \max \left| \frac{x_{RMS}^h - x_{RMS}^{2h}}{x_{RMS}^h} \right|, \quad \Delta R_y = \max \left| \frac{y_{RMS}^h - y_{RMS}^{2h}}{y_{RMS}^h} \right|.$$

Значения относительных погрешностей

$$\Delta R = \max_{0 \leq z \leq L_{cen}} (\Delta R_x, \Delta R_y) \leq 0.033$$

и, таким образом, можно сделать вывод о хорошей точности

результатов вычислений, полученных с использованием программы IBS.

Список литературы

1. Anne R., Mueller C. LISE3: a magnetic spectrometer - Wien filter combination for secondary radioactive beam production. // NIM, B 70, 1992, p. 276-285.
2. Rogalla D., Theis S., Campajola L. et al, // NIM, A 437, 1999, p.266-273.
3. Seliger R.L. E×B Mass - Separator Design. - Journ. of Appl. Phys., 1972, v.43, № 5, p. 2352-2357.
4. Соловьев А.В., Толстогузов А.Б. Определение ионно-оптических характеристик фильтра Вина с однородными ортогональными полями. // ЖТФ, 1987, Т.57, № 5, с. 953- 958.
5. G.G. Gulbekian, Yu. Ts. Oganessian. DRIBs: The Dubna Project for Radioactive Ion Beams // Nuclear Shells - 50 Years: Proc. Intern. Conf. On Nuclear Physics: 49th Meeting on Nuclear Spectroscopy and Nuclear Structure. Dubna, 1999, p.61-76.
6. Yu.E. Penionzhkevich. Low energy radioactive ion beams in Dubna // Workshop on Low Energy Radioactive Ion Beams in Dubna (project DRIBs). Dubna, 1999, p. 35.
7. L. Wahlin. The colutron, a zero deflection isotope separator. // NIM, V. 27. 1964. p. 55-60.
8. Рошаль А.С. Моделирование заряженных пучков. – М.: Атомиздат, 1979, 224 с.
9. V.S. Alexandrov, Yu.K. Batygin, V.f. Shevtsov, G.D. Shirkov. The Programm Library for Numerical Simulation of Charged Particle Dynamics in Transportation Lines. Препринт ОИЯИ, Е9-98-148, Дубна, 1998, 14 с.
10. I.M. Kapchinsky, V.V. Vladimirovsky. // Proc. of the Internat. Conf. On High Energy Accelerat. And Instrum., CERN, Geneva, 1959, p. 274
11. Yu. K. Batygin. Distribution Generator in 4-D Phase Space. // AIP Conference; Proceedings 297, Los Alamos, 1993, p. 419.

12. *W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling. Numerical Recipes the Art of Scientific Computing. Cambridge University Press, 1986.*
13. *A.D. Дымников, Е.А. Перельштейн. // НИМ, V.148, 1978, p.567; Препринт ОИЯИ, P9-10620, Дубна, 1977.*
14. *Бобылева Л.В., Кузнецов И.В., Перельштейн Э.А., Перельштейн О.Э. Об использовании фильтра Вина в исследованиях на низкоэнергетических пучках радиоактивных ядер. Письма в ЭЧАЯ, 2002, №6[115], с.5.*

Получено 26 мая 2003 г.

Бобылева Л. В. и др.

P5-2003-100

Моделирование динамики ионов в сепараторе Вина

Разработана математическая модель сепаратора Вина, который можно использовать в исследованиях радиоактивных свойств нейтронно-обогатенных ядер. На основе метода моментов проведена оптимизация его параметров с целью получения максимальной разрешающей способности. Динамика ионного пучка и возможность разделения тяжелых осколков иллюстрируются результатами численного моделирования сепаратора Вина методом крупных частиц с учетом пространственного заряда пучка и нелинейности собственного электрического поля. Показано, что в оптимальном варианте сепаратор Вина обеспечивает эффективную сепарацию тяжелых ионов с высокими значениями массовых чисел.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных реакций им. Г. Н. Флерова ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2003

Перевод авторов

Bobyleva L. V. et al.

P5-2003-100

Ion Dynamics Simulation in Wien Separator

The simulation of the Wien separator for the neutron-enriched nuclei study is under consideration. Using the moment method, a parameter optimization has been fulfilled to obtain the maximum resolution. The ion beam dynamics and heavy ion separation have been illustrated using the macroparticle simulation with the account of beam space charge and electric self-field nonlinearity. It is shown that the Wien separator provides an effective separation of the fission fragments with the high atomic numbers.

The investigation has been performed at the Flerov Laboratory of Nuclear Reactions, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2003

Редактор *М. И. Зарубина*
Макет *Н. А. Киселевой*

Подписано в печать 27.06.2003.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 0,87. Уч.-изд. л. 2,3. Тираж 315 экз. Заказ № 53986.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.
E-mail: publish@pds.jinr.ru
www.jinr.ru/publish/