

Мамонтов Ю.И., Лисенков В.В., Пономарев А.В.

РАСЧЕТ КИНЕТИЧЕСКИХ КОЭФФИЦИЕНТОВ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ДИНАМИКИ ПУЧКА УБЕГАЮЩИХ ЭЛЕКТРОНОВ

Аннотация. Разработана компьютерная программа, вычисляющая кинетические коэффициенты методом Монте-Карло для описания динамики пучка убегающих электронов. Проведено сравнение вычисленных кинетических коэффициентов с экспериментальными значениями.

Ключевые слова: убегающие электроны, режим непрерывного ускорения, метод Монте-Карло, кинетические коэффициенты, константа скорости ионизации, дрейфовая скорость электронов.

Abstract. A computer program calculating the kinetic coefficients by Monte Carlo method for subsequent description of runaway electrons beam dynamics is developed. The calculated coefficients have been compared with corresponding experimental values.

Keywords: runaway electrons, continuous acceleration mode, a Monte-Carlo method, kinetic coefficients, an ionization rate coefficient, electron drift velocity.

Введение

В настоящее время на производстве для обработки, модификации и стерилизации материалов широко используются источники электронов, представляющие собой вакуумные диоды. Основным недостатком подобных устройств – малый срок службы металлической фольги, служащей для вывода электронов и разделяющей вакуумный объем ускорительного промежутка и газовый объем пространства дрейфа. Разрушение фольги происходит под действием примерно 10^6 - 10^7 импульсов электронного пучка. Момент разрыва фольги носит стохастический характер. Ее разрыв приводит к нарушению вакуумных условий в ускорительном промежутке, выходу из строя устройства в целом и, в конечном счете, к срыву производства.

В лаборатории квантовой электроники Института электрофизики УрО РАН ведутся работы по исследованию возможности использования убегающих электронов для генерации сильноточных электронных пучков. Эффект «убегания» заключается в том, что электроны на длине свободного пробега в газовом промежутке получают от поля больше энергии, чем теряют в столкновениях, и вследствие этого постоянно ускоряются полем [1]. Создается устройство, в котором будет использоваться это явление для получения мощного сильноточного электронного пучка, данное устройство подробно описано в [2]. Чтобы описать динамику ускоряемых электронов и оценить эффективность генерации электронного пучка в условиях готовящегося

эксперимента построена теоретическая модель, сводящаяся в одномерном приближении к решению системы дифференциальных уравнений, представленной в [3]:

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} + \frac{\partial n_e \mu_e E}{\partial x} = \nu_i(E) n_e + \int_{\varepsilon_{th}}^{\infty} V(E) n_{fe}(\varepsilon, x) \sigma_i(\varepsilon) d\varepsilon - \nu_{esc}(E) n_e - k_r n_e n_i, \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} - \frac{\partial n_i \mu_i E}{\partial x} = \nu_i(E) n_e + \int_{\varepsilon_{th}}^{\infty} V n_{fe}(\varepsilon, x) \sigma_i(\varepsilon) d\varepsilon - k_r n_e n_i, \quad (2)$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \frac{e}{\varepsilon_0} (n_e - n_i) \quad (3)$$

где n_e и n_i – концентрации, соответственно, медленных плазменных электронов и ионов, μ_e и μ_i – подвижности, соответственно, электронов и ионов, E – напряженность электрического поля, ν_i – частота ионизации, V – дрейфовая скорость электронов, n_{fe} – концентрация быстрых электронов, σ_i – сечение ионизации, ν_{esc} – частота перехода электронов в режим убегания, k_r – константа ион-электронной рекомбинации, ε_{th} – условная граница энергии, разделяющая медленные плазменные и быстрые электроны.

Данная система уравнений включает в себя два уравнения баланса частиц – медленных плазменных электронов (1) и ионов (2), а также уравнение Пуассона (3). Однако для ее решения необходимо знать значения входящих в нее кинетических коэффициентов и их зависимость от приложенного электрического поля: частоты ионизации $\nu_i(E)$, дрейфовой скорости электронов $V(E)$ и частоты перехода электронов в режим убегания $\nu_{esc}(E)$. Данные кинетические коэффициенты можно оценить, используя метод Монте-Карло для моделирования движения электронов через газонаполненный промежуток в электрическом поле. В настоящей работе описывается разработанный на языке C++ алгоритм, использующий метод Монте-Карло для вычисления кинетических коэффициентов. Кроме того, рассчитанные значения искомым коэффициентов сравниваются с экспериментальными значениями, представленными в [4], для оценки правильности работы написанного алгоритма.

Описание работы алгоритма

Алгоритм реализован в среде Microsoft® Visual Studio 2015©. Моделируется большое число (порядка 10^6) столкновений электрона с молекулами азота при его движении в электрическом поле. При этом считается,

что столкновения мгновенны и не меняют координаты электрона, однако меняют направление вектора его скорости, а также кинетическую энергию в случае неупругого взаимодействия. Возможными процессами электрон-молекулярного взаимодействия считаются упругое рассеяние электрона на молекуле, возбуждение электронных и колебательных уровней молекулы и ионизация. Исходными параметрами для работы алгоритма служат данные по эффективным сечениям этих процессов в зависимости от энергии электрона [5]. Влияние пространственного заряда на электрон не учитывается (то есть, считается, что плазма в промежутке не образуется). На Рисунке 1 приведена блок-схема написанного алгоритма.

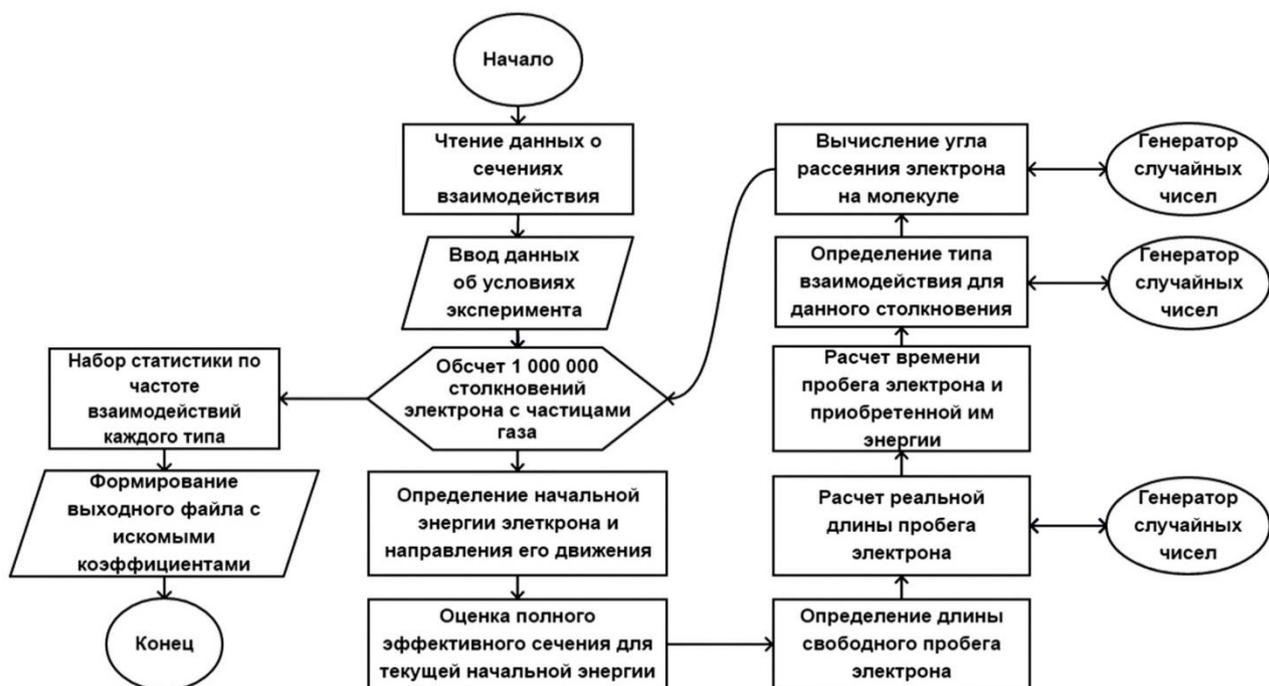


Рисунок 1 – Блок-схема, описывающая работу алгоритма для моделирования движения электрона через газонаполненный промежуток в электрическом поле методом Монте-Карло.

В начале работы алгоритма пользователь вводит данные по условиям проведения моделирования: задается концентрация частиц газовой среды, температура газа, а также диапазон изменения напряженности электрического поля. После ввода данных начинается процесс моделирования движения электрона.

Основная часть алгоритма – цикл, рассчитывающий заданное число столкновений электрона с молекулами. Расчет ведется в двух системах отсчета (СО): в лабораторной, связанной с условным катодом моделируемой системы – точки, из которой стартует рассматриваемый электрон, – и в системе отсчета,

связанной с центром масс электрона и рассеивающей молекулы (фактически в этой СО молекула неподвижна, и центр масс совпадает с ее геометрическим центром из-за большой разницы масс электрона и молекулы). Необходимость введения второй СО обусловлена тем, что рассмотрение рассеяния электрона на молекуле должно происходить именно в системе отсчета, связанной с центром масс электрона и рассеивающей частицы, а не лабораторной. Нужно отметить, что обе СО обладают осевой симметрией, причем ось симметрии лабораторной СО сонаправлена с вектором напряженности электрического поля, а ось симметрии СО центра масс – с направлением вектора его скорости непосредственно перед столкновением.

В лабораторной СО рассматривается пространство координат электрона, в котором рассчитывается траектория его движения, а также пространство скоростей, где моделируется эволюция вектора скорости в результате ускорения электрона электрическим полем и рассеяния электрона на частицах газа. В СО центра масс рассматривается только вектор скорости электрона и изменение его направления в результате рассеяния. Траектория движения электрона и вектор его скорости (в обеих СО) вычисляются как в декартовых, так и в сферических координатах. Исходя из того, что осью симметрии СО центра масс является направление вектора скорости электрона непосредственно перед столкновением, переход от лабораторной СО к СО центра масс осуществляется путем поворота осей лабораторной СО на углы, которые соответствуют сферическим координатам вектора скорости электрона в лабораторной СО.

В первую очередь, при моделировании движения электрона до каждого следующего столкновения определяются начальные условия: энергия электрона (в первую итерацию за начальную энергию условно принимается средняя тепловая энергия электронов при заданной пользователем температуре) и направление его движения после рассеяния в предыдущем столкновении (в первую итерацию считается, что электрон движется в направлении вектора электрического поля, знак заряда электрона опускается, а первый акт рассеяния происходит фактически в лабораторной СО, так как оси обеих СО на данном этапе совпадают по направлениям). Далее оценивается полное эффективное сечение для текущей начальной энергии, исходя из которого определяется средняя длина свободного пробега электрона. При этом считается, что на длине свободного пробега значение полного сечения меняется мало. Затем с помощью генератора случайных чисел определяется реальная длина пробега электрона до следующего столкновения в предположении, что вероятность пройти расстояние x для электрона уменьшается по экспоненциальному закону с

ростом x . Из реальной длины пробега электрона находится время пробега (движение электрона в электрическом поле считается равноускоренным), а также вычисляется приобретенная электроном энергия. По вычисленной энергии снова оцениваются величины сечений процессов электрон-молекулярного взаимодействия и с помощью генератора случайных чисел определяется конкретный тип взаимодействия для данного столкновения. Таким образом набирается статистика по частоте взаимодействий каждого типа, а также суммируются времена отдельных пробегов для вычисления времени совершения электроном заданного числа столкновений.

Параллельно вычисляется угол рассеяния электрона при столкновении с молекулой азота. Угол определяется в СО центра масс с помощью генератора случайных чисел, исходя из зависимости дифференциального сечения рассеяния электрона на молекуле азота от угла рассеяния. Эта зависимость аппроксимируется с помощью приближения Борна [6].

Таким образом, удастся моделировать процесс движения электрона через газонаполненный промежуток электрическом поле. Результаты расчета кинетических коэффициентов на основе моделирования приведены в следующем разделе.

Результаты и обсуждение

Исследования правильности работы алгоритма проводились для давления азота 10^5 Па при температуре 300 К (то есть, фактически, для условий, близких к атмосферным). На Рисунке 2 представлен график, на котором приводится сравнение рассчитанной зависимости константы скорости ионизации (отличается от частоты ионизации делением на концентрацию частиц) от приведенной напряженности поля с экспериментальной зависимостью.

По Рисунку 2 видно, что рассчитанная с помощью алгоритма и экспериментальная кривые удовлетворительно согласуются друг с другом как качественно, так и количественно.

На Рисунке 3 представлен график, на котором приводится сравнение рассчитанной зависимости дрейфовой скорости электронов от приведенной напряженности поля с экспериментальной. По графику очевидно, что для относительно малых приведенных напряженностей электрического поля меньше 100 Тд форма рассчитанной зависимости отличается от экспериментальной, хотя рассчитанные значения дрейфовой скорости согласуются с экспериментальными по порядку величины. В области приведенных напряженностей поля порядка 1000 Тд наблюдается хорошее

согласие рассчитываемых значений дрейфовой скорости электронов с экспериментальными. Стоит отметить, что для авторов представляют интерес именно высокие приведенные напряженности, так как эффект «убегания» становится существенным только при превышении некоторого порогового значения приведенной напряженности поля.

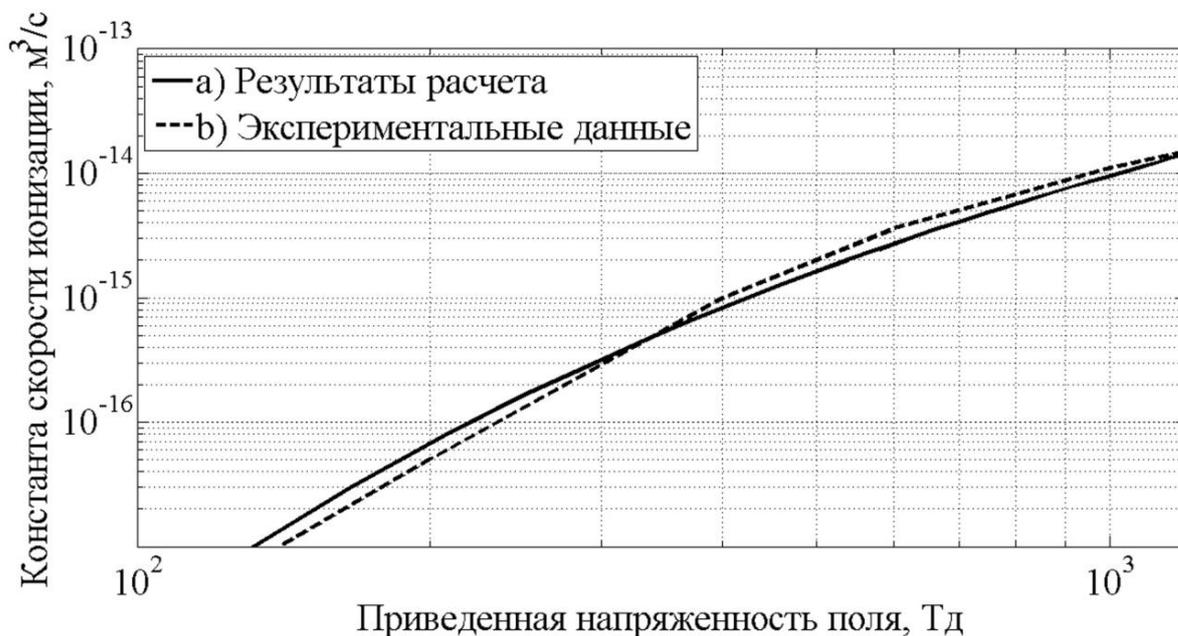


Рисунок 2 – Рассчитанная (а) и экспериментальная (б) зависимости константы скорости ионизации (в м³/с) от приведенной напряженности поля (в Тд)

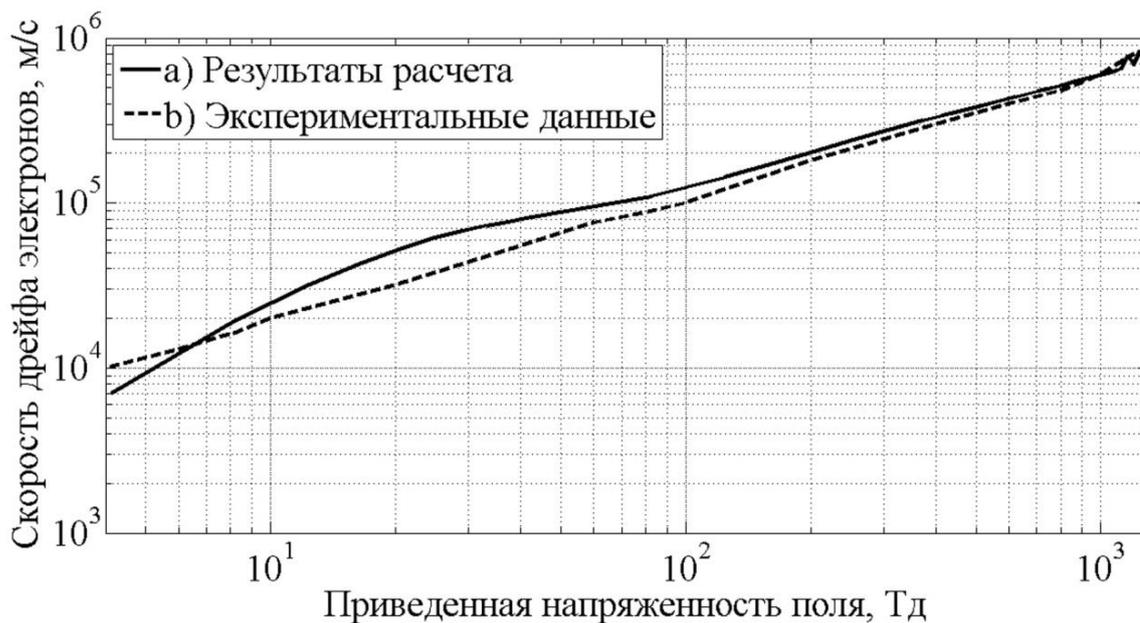


Рисунок 3 – Рассчитанная (а) и экспериментальная (б) зависимости скорости дрейфа электрона (в м/с) от приведенной напряженности поля (в Тд).

Наблюдаемые отклонения в рассчитанных значениях кинетических коэффициентов (особенно дрейфовой скорости) могут быть вызваны имеющимися погрешностями в данных по сечениям электрон-молекулярного взаимодействия. Согласно [5], относительная погрешность сечений взаимодействия вблизи максимумов их зависимостей от энергии электрона оказывается порядка 20%, а при увеличении энергии и соответствующем уменьшении сечений относительная погрешность может достигать 50%. Кроме того, реальный характер зависимости дифференциального сечения от угла рассеяния отличается от используемого в алгоритме приближения Борна. Вклад погрешности данного типа оценить сложно, поэтому правильность работы алгоритма анализируется по совпадению рассчитываемых зависимостей кинетических коэффициентов от приведенной напряженности поля с экспериментальными данными.

С помощью алгоритма была также рассчитана частота перехода электронов в режим непрерывного ускорения (другими словами, частота убегания). Результаты вычислений приведены на Рисунке 4.

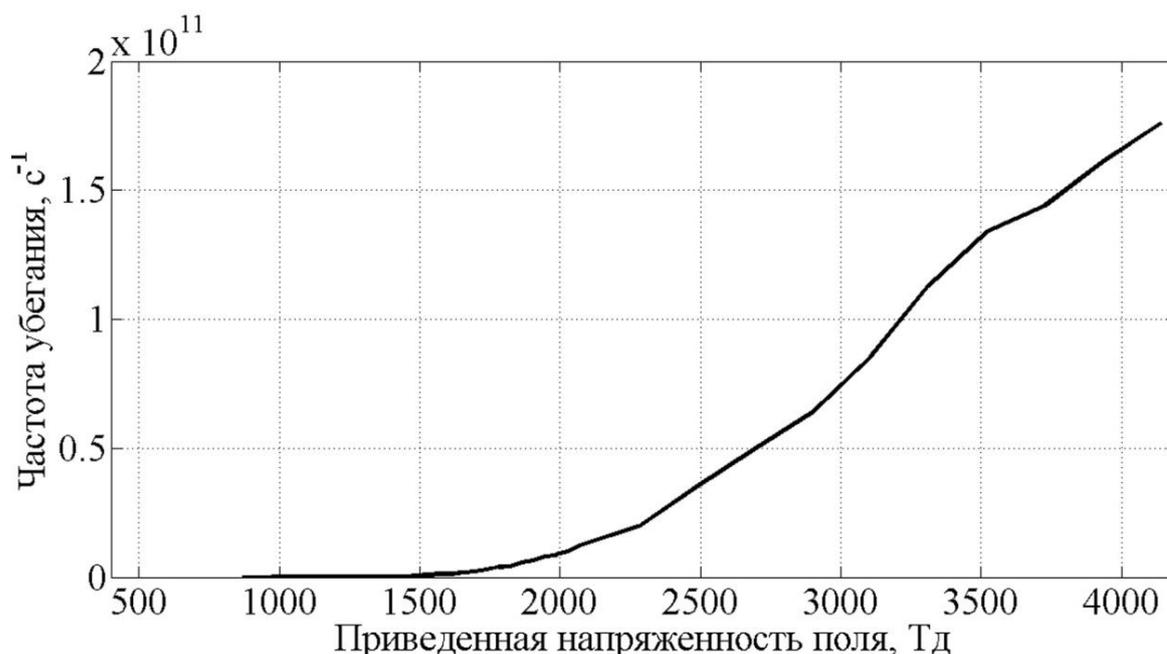


Рисунок 4 – Рассчитанная зависимость частоты перехода электронов в режим непрерывного ускорения (в с⁻¹) от приведенной напряженности поля (в Тд).

Для диапазона приведенных напряженностей поля, в котором проводилось сравнение рассчитанных зависимостей константы скорости ионизации и дрейфовой скорости электрона с экспериментальными данными (от 1 до 1000 Тд), рассчитанная частота перехода электронов в режим

убегания оказалась практически нулевой. По Рисунку 4 видно, что частота убегания начинает нарастать в области приведенной напряженности поля порядка 2000 Тд. С дальнейшим увеличением приведенной напряженности поля частота убегания растет по закону, близкому к линейному, и в области приведенной напряженности поля порядка 4000 Тд частота убегания достигает величины около $1.7 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1}$. Нужно отметить, что столь высокая приведенная напряженность поля в 4000 Тд (соответствует напряженности электрического поля в 1 МВ/см при нормальном атмосферном давлении) является труднодостижимой при проведении экспериментов, так как требует сложной дорогостоящей высоковольтной техники, способной создавать разность потенциалов порядка мегавольт за времена порядка наносекунд. Однако вблизи катода ускорительного промежутка высокая напряженность электрического поля может обеспечиваться наличием микроострий и впадин на поверхности самого катода. Возможно, микрогеометрия катода может помочь обеспечить эффективный переход электронов в режим убегания, поэтому расчет частоты убегания для приведенных напряженностей поля порядка 4000 Тд является оправданным. К сожалению, авторы не располагают известными экспериментальными данными о дрейфовой скорости электронов и константе скорости ионизации при столь высоких приведенных напряженностях поля.

Заключение

В данной работе описан алгоритм расчета кинетических коэффициентов методом Монте-Карло для дополнения теоретической модели, описывающей динамику электронов, ускоряемых в газонаполненном промежутке. Проведено сравнение рассчитанных зависимостей с экспериментальными значениями. Показано, что рассчитываемые кинетические коэффициенты находятся в удовлетворительном согласии с экспериментом, что говорит о состоятельности алгоритма.

Также рассчитана зависимость частоты перехода электронов в режим непрерывного ускорения от приведенной напряженности электрического поля в широком диапазоне ее значений. Обнаружено, что частота убегания начинает нарастать в области приведенной напряженности поля порядка 2000 Тд, а с дальнейшим увеличением приведенной напряженности поля до 4000 Тд частота убегания достигает величины порядка $1.7 \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1}$. Столь высокая приведенная напряженность поля может быть обеспечена микрогеометрией катода ускорительного промежутка.

Конечная цель проводимых исследований – создание устройства, использующего явление убегающих электронов для формирования мощного электронного пучка. Авторы надеются, что использование этого явления позволит упростить и удешевить существующие устройства для генерации корпускулярного и волнового излучения и значительно увеличить их ресурс работы за счет отказа от использования фольги для разделения пространства дрейфа и ускоряющего промежутка.

Благодарность

Работа поддержана грантом РФФИ №16-08-00894-а.

Библиографический список

1. Тарасенко В. Ф. Механизм убегания электронов в плотных газах и формирование мощных субнаносекундных электронных пучков / В. Ф. Тарасенко, С. И. Яковленко // Успехи физических наук. – 2004. – Т. 174, № 9. – С. 953–971.
2. Способ генерации пучков быстрых электронов в газонаполненном промежутке и устройство для его реализации (варианты) : патент 2581618 Рос. Федерация : МПК H05H 15/00 / Осипов В. В., Лисенков В. В., Тихонов Е. В. ; патентообладатель Ин-т электрофизики Урал. отд-ния Рос. акад. наук (ИЭФ УрО РАН). – № 2014140012/07 ; заявл. 02.10.2014 ; опубл. 20.04.2016, Бюл. № 11.
3. Lisenkov V. V. Numerical Modeling of Generation of Fast Electron Beams in Subnanosecond Gas Discharge / V. V. Lisenkov, V. V. Osipov // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2012. – Т. 55, № 10/3. – С. 256–259.
4. Phelps A. V. Anisotropic scattering of electrons by N₂ and its effect on electron transport / A. V. Phelps, L. C. Pitchford // Physical Review A. – 1985. – Vol. 31, I. 5. – P. 2932–2949.
5. Electron impact excitation of the electronic states of N₂. I. Differential cross sections at incident energies from 10 to 50 eV / D. C. Cartwright [et al.] // Physical Review A. – 1977. – Vol. 16, I. 3. – P. 1013.
6. Кольчужкин А. М. Введение в теорию столкновений / А. М. Кольчужкин, В. В. Учайкин. – Томск : Изд-во Томского ун-та, 1979. – 141 с.