

УДК 53.072; 53:681.3

© С. С. Оленникова, А. П. Щербаков

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАЗОНАПОЛНЕННЫХ СЕПАРАТОРОВ. II. ФЛУКТУАЦИИ ИОННОГО ЗАРЯДА

Предложена математическая модель флуктуации ионного заряда при столкновениях с молекулами газа, учитывающая процессы захвата одного электрона и процессы потери одного или двух электронов, являющаяся простейшим обобщением модели одноэлектронных процессов флуктуации и приводящая к асимметрии равновесных зарядовых распределений. Показано, что в случае симметричных зарядовых распределений ионов в пучке флуктуации ионного заряда приводят к увеличению среднего радиуса кривизны траектории иона в магнитном поле. Для зарядовых распределений с асимметрией средний радиус кривизны траектории в магнитном поле может как увеличиваться, так и уменьшаться. На основе численного моделирования движения ионов в газонаполненных сепараторах показано, что учет двухэлектронных процессов приводит к существенному изменению пространственных распределений ионов пучка в фокальной плоскости сепаратора.

ВВЕДЕНИЕ

Настоящая работа, являющаяся продолжением работы [1], посвящена построению математической модели флуктуации ионного заряда при движении быстрой заряженной атомной частицы в газовой среде ионно-оптических трактов газонаполненных сепараторов.

Флуктуации заряда наряду с угловым рассеянием ионов при многократных столкновениях с молекулами газа вносят основной вклад в уширение ионного пучка. В основном этими факторами определяется разрешение газонаполненного сепаратора [2]. Определенный, но существенно меньший вклад в размеры фокального пятна вносит разброс ионов по скоростям и скоростная зависимость среднего равновесного заряда. Все эти факторы неустранимы в силу самого принципа действия газонаполненного сепаратора. Поэтому построение адекватных и эффективных математических моделей указанных процессов является определяющим при создании компьютерной модели газонаполненного сепаратора.

В разработанных к настоящему времени математических моделях газонаполненных сепараторов процессы флуктуаций ионного заряда трактуются либо в одноэлектронном приближении [3, 4], либо вообще не обсуждаются [5]. Учет захвата и потери ионом только одного электрона при принятой в работах [3, 4] аппроксимации сечений этих процессов приводит к симметричным распределениям по зарядам ионов в пучке. Между тем экспериментальные данные свидетельствуют о наличии заметной асимметрии в равновесных зарядовых распределениях ионов в МЭВ-диапазоне энергий при их прохождении через ве-

щество [6–8]. Кроме того, в указанном диапазоне энергий сечения потери ионом двух и более электронов при столкновении с молекулой газа становятся сравнимыми с сечениями захвата и потери одного электрона [6].

В настоящей работе предлагается математическая модель флуктуации ионного заряда при столкновениях с молекулами газа, учитывающая процессы захвата одного электрона и процессы потери одного или двух электронов. Исследуется влияние флуктуации ионного заряда на распределение ионов пучка в фокальной плоскости сепаратора.

СРЕДНИЙ РАДИУС КРИВИЗНЫ ТРАЕКТОРИИ В МАГНИТЕ

В дипольном магните радиус кривизны траектории иона массы m с зарядом q равен

$$\rho = mv/qB, \quad (1)$$

где v — составляющая скорости иона, ортогональная вектору магнитной индукции \mathbf{B} . Пусть $q = q_n + \Delta q$, где q_n — номинальное значение заряда, соответствующее магнитной жесткости, на которую настроен дипольный магнит. Обычно настройка ведется на величину среднего равновесного заряда $q_n = \bar{q}$.

Полагая $\Delta q/q_n \ll 1$ и раскладывая (1) в ряд Тейлора в окрестности q_n , имеем

$$\rho(q) = \rho_n \sum_{k=0}^{\infty} (-\Delta q/q_n)^k,$$

где $\rho_n = mv/q_n B$ — номинальное значение радиуса кривизны траектории. Усредняя по распределению заряда и учитывая, что $q_n = \bar{q}$, получаем

$$\bar{\rho} = \rho_n \sum_{k=0}^{\infty} \overline{(-\Delta q / \bar{q})^k}.$$

Для симметричного относительно среднего значения распределения заряда при нечетных значениях k выполняется $\overline{(\Delta q)^k} = 0$, и в сумме остаются только положительные слагаемые. Поэтому $\bar{\rho} > \rho_n$, и превышение среднего радиуса кривизны по сравнению с номинальным значением тем больше, чем меньше среднее равновесное значение заряда и чем шире распределение. Заметим, что торможение ионов в газе приводит к уменьшению радиуса кривизны траектории, и в этом смысле потери энергии и симметричные флуктуации заряда — противоположно действующие факторы.

Для несимметричных распределений (с отличными от нуля нечетными центральными моментами) среднее значение радиуса кривизны траектории может быть как больше, так и меньше номинального значения.

Приведенное выше рассмотрение свидетельствует о необходимости разработки в рамках общей модели газонаполненного сепаратора математической модели флуктуации ионного заряда, учитывающей многоэлектронные процессы, приводящие к асимметрии равновесного распределения зарядов в пучке.

КИНЕТИКА ФЛУКТУАЦИЙ ИОННОГО ЗАРЯДА

При движении иона со скоростью v в газовой среде флуктуации его заряда описываются кинетическим уравнением

$$\frac{dF_q(t)}{dt} = \sum_{q' \neq q} [\alpha(q', q)F_{q'}(t) - \alpha(q, q')F_q(t)], \quad (2)$$

где $F_q(t)$ — вероятность зарядового состояния q в момент времени t , $\sum_q F_q = 1$; $\alpha(q', q) = n\sigma(q', q)v$ — частота столкновений иона с молекулой газа с переходом из зарядового состояния q' в зарядовое состояние q , $\sigma(q', q)$ — соответствующее сечение перехода, n — концентрация молекул среды. Величину F_q можно считать долей ионов в пучке в зарядовом состоянии q .

Следует отметить, что сечение перехода $\sigma(q', q)$, входящее через $\alpha(q', q)$ в уравнение (2), относится к основному состоянию иона. Это на-

кладывает ограничение на плотность газовой среды: она должна быть достаточно мала, чтобы среднее время между столкновениями $1/\alpha$ было больше времени релаксации иона, возбужденного в результате предыдущего столкновения. В противном случае в уравнении (2) необходимо учитывать зависимость сечения перехода от электронного состояния иона. Вопрос о влиянии плотности газовой среды на средний равновесный ионный заряд обсуждался в работе [9].

Если скорость иона постоянна, то удобнее в уравнении (2) от времени перейти к величине $x = tvn$ — "толщине" мишени. Тогда

$$\frac{dF_q(x)}{dx} = \sum_{q' \neq q} [\sigma(q', q)F_{q'}(x) - \sigma(q, q')F_q(x)].$$

Равновесное, не зависящее от x зарядовое распределение $F(q) \equiv F_q(\infty)$ определится из соотношения

$$\sum_{q' \neq q} [\sigma(q', q)F(q') - \sigma(q, q')F(q)] = 0, \quad (3)$$

Кроме того, для равновесного распределения при произвольной фиксированной величине заряда q должно выполняться

$$\sum_{q' < q \leq q''} [F(q')\sigma(q', q'') - F(q'')\sigma(q'', q')] = 0. \quad (4)$$

Отсюда, если ограничиться одноэлектронными процессами, когда $|q' - q| = 1$, для равновесного распределения $F_0(q)$ получаем

$$F_0(q)\sigma_c(q) = F_0(q+1)\sigma_c(q+1), \quad (5)$$

где $\sigma_c(q)$ — сечение захвата, а $\sigma_l(q)$ — сечение потери одного электрона.

Если, следуя работам [3, 4], принять экспоненциальную аппроксимацию для сечений:

$$\begin{aligned} \sigma_c(q) &= A_c \exp(a_c(q - q_0)); \\ \sigma_l(q) &= A_l \exp(-a_l(q - q_0)), \end{aligned} \quad (6)$$

то соотношению (5) удовлетворяет гауссово распределение [6]

$$F_0(q) = (1/\sqrt{2\pi}d_0) \exp\{-(q - \bar{q})/2d_0^2\}, \quad (7)$$

где

$$1/d_0^2 = a_c + a_l, \quad A_l = A_c \exp[(a_c - a_l)/2]. \quad (8)$$

В этих формулах q — текущее значение заряда, $\bar{q} = q_0$ — среднее равновесное значение заряда иона, d_0 — стандартное отклонение гауссова распределения.

Простейшим обобщением модели одноэлектронных процессов флуктуации ионного заряда является дополнительный учет процессов потери двух электронов. Как отмечалось в работах [6–8], такой процесс является весьма вероятным в МЭВ-диапазоне энергий.

Обозначим сечение потери ионом в столкновении двух электронов $\sigma_{2l}(q)$. Тогда соотношение (4) для равновесного распределения принимает вид

$$F(q)[\sigma_l(q) + \sigma_{2l}(q)] + F(q-1)\sigma_{2l}(q-1) = F(q+1)\sigma_c(q+1).$$

Отсюда, учитывая соотношение (5), имеем

$$\frac{F(q+1)}{F(q)} = \frac{F_0(q+1)}{F_0(q)} + \left[\sigma_{2l}(q) + \frac{F(q-1)}{F(q)}\sigma_{2l}(q-1) \right] / \sigma_c(q+1). \quad (9)$$

Второе слагаемое в правой части соотношения (9) зависит от сечений потери двух электронов. Поскольку это слагаемое положительно, равновесное распределение $F(q)$ при $q < q_m$ растет быстрее, а при $q > q_m$ убывает медленнее соответствующего гауссова распределения (7). Это приводит к сдвигу среднего равновесного заряда \bar{q} относительно q_0 и к появлению асимметрии в равновесном распределении.

Естественно предположить, что сечение $\sigma_{2l}(q)$ потери двух электронов, как и сечение $\sigma_l(q)$ потери одного электрона, убывает с ростом величины положительного заряда иона q : вероятность отрыва последующих электронов от иона при столкновении уменьшается с уменьшением числа оставшихся электронов. Поэтому в качестве аппроксимации $\sigma_{2l}(q)$ примем выражение, аналогичное выражению (6):

$$\sigma_{2l}(q) = A_{2l} \exp(-a_{2l}(q - q_0)). \quad (10)$$

В соответствии с принятыми аппроксимациями (6) и (10) в нашей модели имеется семь параметров $A_c, a_c, A_l, a_l, A_{2l}, a_{2l}, q_0$, из которых вследствие соотношений (8) и условия нормировки для вероятностей перехода независимых остается четыре.

РЕЛАКСАЦИЯ ЗАРЯДОВОГО РАСПРЕДЕЛЕНИЯ К РАВНОВЕСНОМУ

Представим процесс изменения зарядового состояния иона при движении в газовой среде в виде однородной цепи Маркова $\{\pi_0, \mathbf{T}\}$ с числом со-

стояний $z+1$. Здесь π_0 — вектор распределения начальных зарядовых состояний, $\mathbf{T} = \{p_{ik}\}$ — матрица вероятностей перехода, p_{ik} — вероятность перехода из состояния с зарядом $q=i$ в состояние с зарядом $q=k$ ($i, k = 0, 1, \dots, z$), z — атомный номер иона.

Вероятности переходов определяются из соотношений

$$\begin{aligned} p_c(q) &= \sigma_c(q) / \sigma_l(q); \\ p_l(q) &= \sigma_l(q) / \sigma_l(q); \\ p_{2l}(q) &= \sigma_{2l}(q) / \sigma_l(q), \end{aligned} \quad (11)$$

где

$$\sigma_l(q) = \sigma_c(q) + \sigma_l(q) + \sigma_{2l}(q) \quad (12)$$

полное сечение изменения заряда.

В соответствии с выбранной моделью, учитывающей захват ионом одного электрона и отрыв от него одного или двух электронов (формулы (6) и (10)), переходная матрица \mathbf{T} трехдиагональна: для каждого данного состояния с $q=i > 0$ отличны от нуля вероятности переходов только в состояния с $q=i-1, i+1, i+2$.

Вектор распределения зарядовых состояний после n переходов

$$\pi_n = (\mathbf{T}^T)^n \pi_0 = (\mathbf{T}^n)^T \pi_0,$$

где \mathbf{T}^T — транспонированная матрица перехода.

В соответствии с теоремой об асимптотическом поведении (см., например, [10], с. 286) в случае положительной матрицы перехода существует предельный вектор состояний $\pi = \lim_{n \rightarrow \infty} \pi_n$, не зависящий от начального состояния π_0 . Этот вектор является собственным вектором матрицы $\mathbf{M} = \lim_{n \rightarrow \infty} (\mathbf{T}^T)^n$ с характеристическим числом 1. Матрица \mathbf{M} состоит из одинаковых столбцов, каждый из которых совпадает с предельным вектором зарядовых состояний π .

В нашем случае матрица \mathbf{T} является лишь неотрицательной. Однако численные эксперименты показали, что для широкого диапазона значений параметров нашей модели предельная матрица \mathbf{M} существует. Скорость сходимости зависит от величины относительной доли "перемешивающего" члена $p_{2l}(q)$ в матрице перехода.

Задавшись порядком малости элементов матрицы перехода ε , мы фиксируем ее размерность. В частности, при $\varepsilon = 10^{-4}$ размерность матрицы перехода 9×9 , при $\varepsilon = 10^{-5}$ — 12×12 , при $\varepsilon = 10^{-7}$ — 17×17 . Примем в качестве критерия установления процесса сходимости ту же величину ε . Численные

эксперименты показали, что при $A_c = A_l$, $A_{2l} = A_l / 2$ для получения предельной матрицы, а тем самым и равновесного зарядового распределения требуется: 20 переходов при $\epsilon = 10^{-4}$, 25 переходов при $\epsilon = 10^{-5}$ и 35 переходов при $\epsilon = 10^{-7}$. Если уменьшать долю $p_{2l}(q)$, необходимое число переходов возрастает. Так, при $A_{2l} = A_l / 4$ и $\epsilon = 10^{-5}$ для достижения равновесного распределения требуется уже 60 переходов.

Определив матрицу \mathbf{M} , мы находим равновесное зарядовое распределение π , для которого в работе вычислялись среднее значение равновесного заряда \bar{q} , дисперсия d^2 и коэффициент асимметрии $s = \mu_3 / d^{3/2}$, где μ_3 — третий центральный момент. Именно эти параметры приводятся в качестве экспериментальных данных по зарядовым распределениям пучков ионов при их прохождении через вещество [6–8]. Сопоставление вычисленных нами значений моментов с этими экспериментальными данными позволяет выбрать значения параметров нашей модели.

На рис. 1 в качестве примера представлены равновесные зарядовые распределения, вычисленные на основе описанной выше методики при $A_c = A_l$, $A_{2l} = A_l / 2$, $a_c = a_l = 1$, $a_{2l} = 0.5$ для трех значений q_0 . Все три распределения имеют примерно одинаковые ширины: стандартное отклонение $d = 1.1$ и заметный коэффициент асимметрии $s = 0.28$. Заметим, что для одноэлектронного приближения с гауссовым равновесным распределением (7) соотношение (8) для выбранных значений параметров дает $d_0 = 1.0$ и $s_0 = 0$.

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ИОНОВ В ПЛОСКОСТИ ПРИЕМНИКА СЕПАРАТОРА

Модель флуктуации ионного заряда является составной частью компьютерной модели газонаполненного сепаратора. Она реализована в виде монте-карловской процедуры. При влете иона в газонаполненный тракт сепаратора ему случайным образом приписывается заряд в соответствии с экспериментально определенным начальным зарядовым распределением. Заряд иона постоянен на длине свободного пробега l , которая генерируется в соответствии с соотношением $l = -\bar{\lambda} \ln R$, (R — равномерно распределенное на промежутке $[0,1)$ случайное число). В точке столкновения заряд иона изменяется в соответствии с вероятностями перехода (11).

В нашей модели параметром является средняя длина свободного пробега $\bar{\lambda}$, которая связана

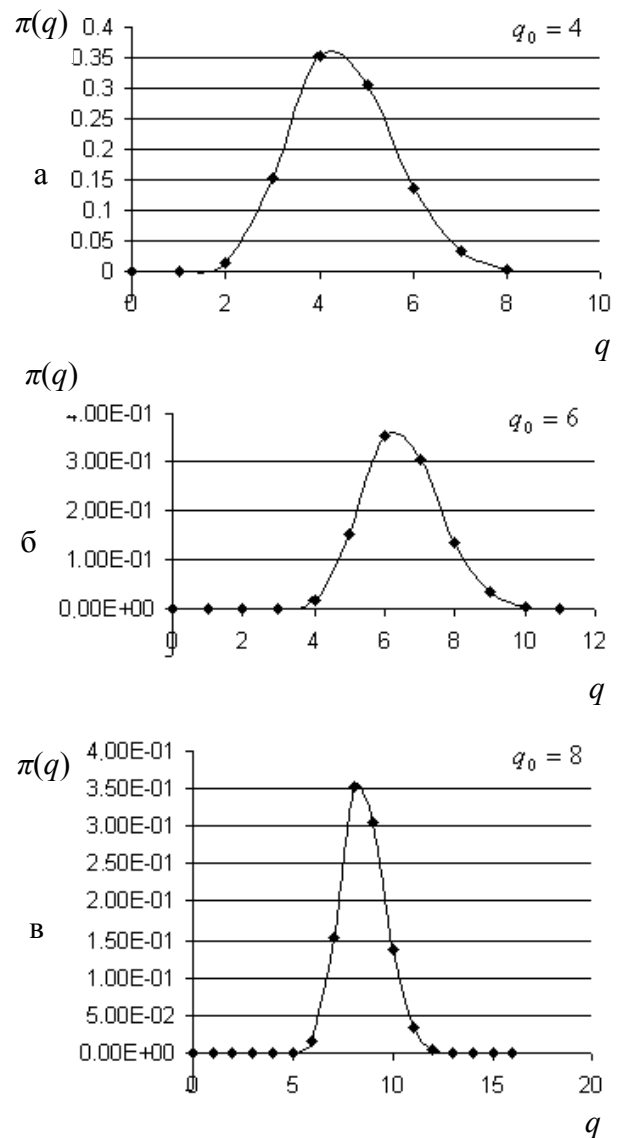


Рис. 1. Равновесные зарядовые распределения $\pi(q)$ при $A_c = A_l$, $A_{2l} = A_l / 2$, $a_c = a_l = 1$, $a_{2l} = 0.5$ для различных значений q_0 : а — 4, б — 6, в — 8

с полным сечением σ_l процесса изменения заряда (12) и с концентрацией n молекул газа соотношением $\bar{\lambda} = 1/(n\sigma_l)$. В программе задается $\bar{\lambda}$ и отношение между амплитудами сечений A_c , A_l и A_{2l} в соотношениях (6) и (10).

Экспериментальные оценки [11] показывают, что тяжелый ион со средней энергией в несколько десятков МэВ при движении в газе при давлении $p = 1$ торр ($n \approx 3 \times 10^{16} \text{ см}^{-3}$) изменяет

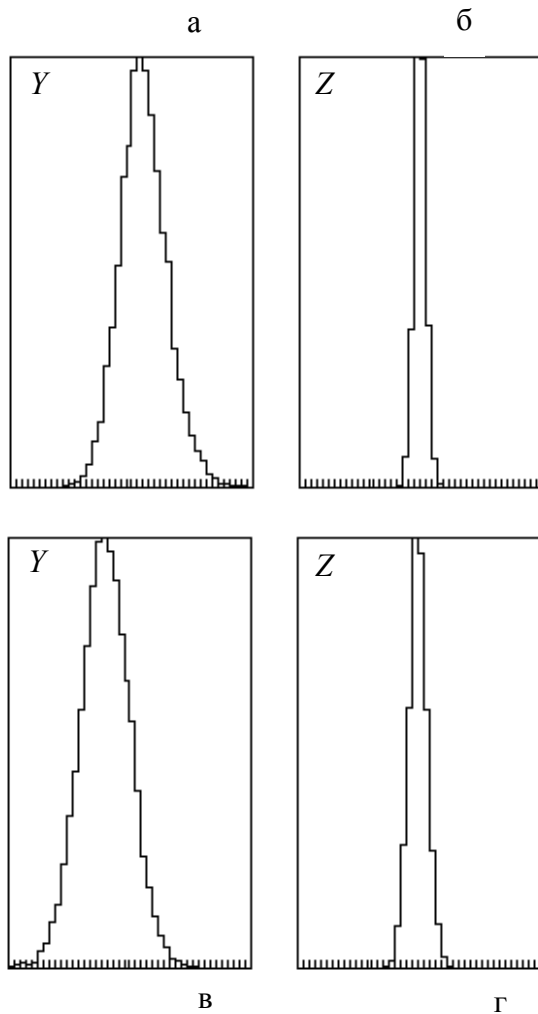


Рис. 2. Распределение ионов в области приемника газонаполненного сепаратора в вертикальном (Y) и в горизонтальном (Z) направлениях при $a_c = a_l = a_{2l} = 2$ (узкое зарядовое распределение) без учета двухэлектронных процессов (а, б) и с учетом двухэлектронных процессов (в, г)

свое зарядовое состояние при атомных столкновениях 100–1000 раз на 1 м пути. Это означает, что длина свободного пробега $\bar{\lambda}$ лежит в пределах 0.1–1.0 см.

На рис. 2 и 3 представлены рассчитанные гистограммы пространственного распределения ионов с массой 254 а.е. после прохождения сепаратора, заполненного водородом с давлением 1 торр. Сепаратор построен по схеме $DQ_h Q_v$ и состоит из дипольного магнита D и расположенных за ним квадрупольных линз, фокусирующих в горизонтальном (Q_h) и в вертикальном (Q_v) направлениях. Ионно-оптическая схема и геометрические

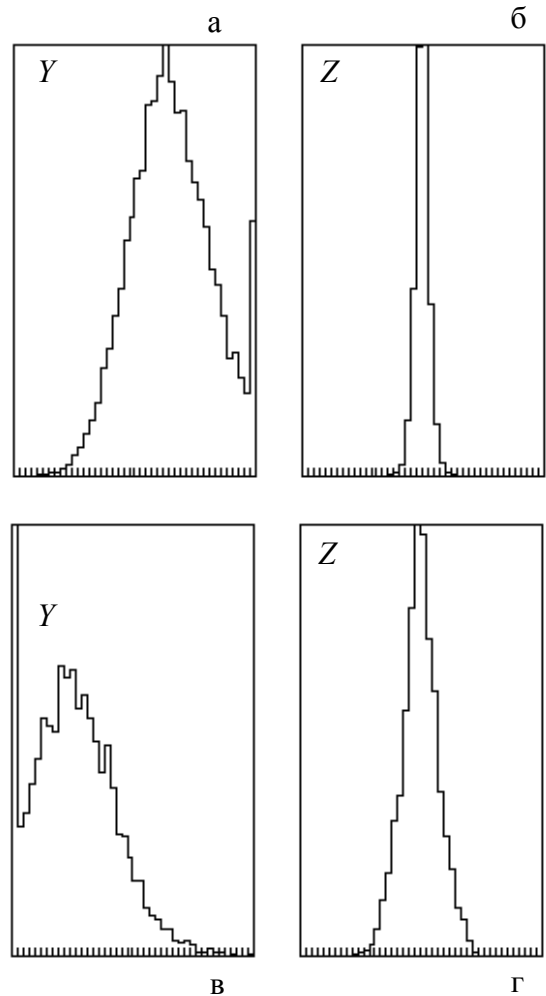


Рис. 3. Распределение ионов в области приемника газонаполненного сепаратора в вертикальном (Y) и в горизонтальном (Z) направлениях при $a_c = a_l = a_{2l} = 0.4$ (широкое зарядовое распределение) без учета двухэлектронных процессов (а, б) и с учетом двухэлектронных процессов (в, г)

размеры соответствуют газонаполненному сепаратору Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ (Дубна) [5]. Длина первого бесполевого промежутка в нем составляет 39.5 см, поэтому равновесное зарядовое распределение ионов устанавливается уже до входа в дипольный магнит.

Гистограммы распределений рассчитаны в плоскости приемника в горизонтальном (Y — в плоскости дисперсии) и в вертикальном (Z) направлениях. Диапазон изменения координат Y и Z одинаков: $-100 \div 100$ мм. Значения параметров сечений изменения заряда $a_c = a_l = a_{2l} = 2.0$ (рис. 2) соответствуют узкому равновесному

зарядовому распределению: соответствующее гауссово распределение при одноэлектронных процессах имеет стандартное отклонение $d_0 = 0.5$. Значения параметров $a_c = a_l = a_{2l} = 0.4$ (рис. 3) соответствуют широкому равновесному зарядовому распределению — $d_0 = 1.1$.

Первый ряд гистограмм (а, б на рис. 2 и 3) соответствует одноэлектронным процессам ($A_{2l} = 0$). Второй ряд гистограмм (в, г на рис. 2 и 3) соответствует дополнительному учету потери двух электронов. Отметим кардинальное изменение гистограмм: Y - и Z -распределения уширились и Y -распределение сместилось в сторону меньших значений.

Уширение пространственных распределений обусловлено уширением равновесных зарядовых распределений при учете двухэлектронных процессов. Характеристики равновесных зарядовых распределений на входе в дипольный магнит для узкого зарядового распределения (рис. 2): $\bar{q}_0 = 6.7$, $d_0 = 0.5$, $s_0 = 0$ — при учете только одноэлектронных процессов; $\bar{q} = 7.0$, $d = 0.86$, $s = 0.25$ — при учете двухэлектронных процессов. Соответствующие характеристики для широкого зарядового распределения (рис. 3): $\bar{q}_0 = 6.7$, $d_0 = 1.1$, $s_0 = 0$ — при учете только одноэлектронных процессов; $\bar{q} = 7.6$, $d = 1.4$, $s = 0.14$ — при учете двухэлектронных процессов. Таким образом, учет потери двух электронов приводит к увеличению среднего заряда и дисперсии распределения и к появлению отличной от нуля асимметрии.

Сдвиг Y -распределений в сторону меньших значений обусловлен двумя причинами. Во-первых, описанным в первом разделе работы уменьшением среднего радиуса кривизны траектории ионов в дипольном магните в случае наличия асимметрии в зарядовом распределении по сравнению со средним радиусом кривизны траектории ионов с симметричным зарядовым распределением при прочих равных условиях. И, во-вторых, увеличением среднего равновесного заряда при учете двухэлектронных процессов по сравнению со средним равновесным зарядом при учете только одноэлектронных процессов.

ВЫВОДЫ

1. В случае симметричных зарядовых распределений ионов в пучке флуктуации ионного заряда приводят к увеличению среднего радиуса кривизны траектории иона в магнитном поле. Для зарядовых распределений с асимметрией средний радиус кривизны траектории в магнитном поле мо-

жет как увеличиваться, так и уменьшаться.

2. Предложена математическая модель флуктуации ионного заряда при столкновениях с молекулами газа, учитывающая процессы захвата одного электрона и процессы потери одного или двух электронов. Эта модель, являющаяся простейшим обобщением модели одноэлектронных процессов флуктуации, приводит к существенно изменению равновесных зарядовых распределений, включая появление асимметрии в распределениях, отсутствующей в модели одноэлектронных процессов.

3. На основе численного моделирования движения ионов в газонаполненных сепараторах показано, что учет двухэлектронных процессов приводит к уширению пространственных распределений ионов пучка в фокальной плоскости сепаратора и к их сдвигу, что необходимо учитывать при калибровке компьютерной модели газонаполненного сепаратора.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мележик А.В., Щербаков А.П. Компьютерное моделирование газонаполненных сепараторов. I. Конфигурирование ионно-оптической схемы // Научное приборостроение. 2004. Т. 14, № 1. С. 58–66.
2. Lawin H. et al. The Jülich on-line separator for fission products "JOSEF" // Nucl. Instr. and Meth. 1976. V. 137. P. 103–117.
3. Paul M. et al. Heavy ion separation with a gas-filled magnetic spectrograph // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res., A. 1989. V. 277. P. 418–430.
4. Ninov V. et al. Separation of actinide-made transurania by a gas-filled magnetic separator // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res., A. 1995. V. 357. P. 486–494.
5. Subotic K. et al. Evaporation residue collection efficiencies and position spectra of the Dubna gas-filled recoil separator // Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res., A. 2002. V. 481. P. 71–80.
6. Betz H.D. Charge states and charge-changing cross sections of fast heavy ions penetrating through gaseous and solid media // Rev. Mod. Phys. 1972. V. 44, N 3. P. 465–539.
7. Wittkower A.B., Betz H.D. Equilibrium charge-state distributions of 2–15 MeV tantalum and uranium ions stripped in gases and solids // Phys. Rev., A. 1973. V. 7, N 1. P. 159–167.
8. Betz H.D. Heavy ion charge states // Applied Atomic Collision Physics. 1983. V. 4. P. 1–42.
9. Oganessian Yu.Ts. et al. Average charge states of heavy atoms in dilute hydrogen // Phys. Rev., C. 2001. V. 64, 064309.
10. Беллман Р. Введение в теорию матриц. М.: Наука, ГРФМЛ, 1976. 352 с.

11. *Leino M.* In-flight separation with gas-filled systems // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res., B. 1997. V. 126. P. 320–328.

Институт аналитического приборостроения РАН, Санкт-Петербург

Материал поступил в редакцию 6.01.2005.

COMPUTER SIMULATION OF GAS-FILLED SEPARATORS. II. ION CHARGE FLUCTUATIONS

S. S. Olennikova, A. P. Shcherbakov

Institute for Analytical Instrumentation RAS, Saint-Petersburg

The paper presents a mathematical model of ion charge fluctuations at collisions with gas molecules, which takes into account one-electron trapping and one- or two-electron loss effects. The model is the simplest generalization of the single-electron fluctuation model and gives asymmetrical equilibrium charge distributions. It is shown that for symmetrical charge distributions in the ion beam, ion charge fluctuations lead to an increase in the average radius of curvature of the ion trajectory in a magnetic field. For asymmetrical charge distributions, this radius may either increase or decrease. The results of numerical modeling of ion motion in gas-filled separators show that the allowance for two-electron processes yields substantially different ion distributions in the beam in the focal plane of the separator.