

УДК 537.534.7: 621.928.3 / .9

© А. П. Щербаков, М. И. Явор

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ИОНОВ В ГАЗОНАПОЛНЕННЫХ МАГНИТНЫХ МАСС-СЕПАРАТОРАХ

В работе представлены параметризации основных процессов ионно-молекулярного взаимодействия в газонаполненных магнитных масс-сепараторах. С их использованием разработаны две программы расчетов движения ионов в газонаполненных сепараторах: одна с применением метода матриц перехода в параксиальном приближении и вторая — основанная на пакете SIMION 7.0. Приведены примеры тестовых расчетов фокусировки ионов — продуктов реакций слияния ядер в сепараторе DGFRS Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ в г. Дубна.

ВВЕДЕНИЕ

Газонаполненные масс-сепараторы обладают высоким акцептансом по заряду и скорости разделяемых ионов. Они широко используются в тех областях ядерной физики, где требуется высокое пропускание пучков заряженных частиц с широким зарядовым распределением и где их основной недостаток — невысокая разрешающая способность по массам — не играет большой роли [1]. Одна из таких областей — исследование продуктов полного слияния ядер в асимметричных реакциях с образованием сверхтяжелых элементов при бомбардировке быстрыми ионами твердых мишеней [2]. Чрезвычайная редкость процессов синтеза (сечение в 10^{11} раз меньше суммарного сечения всех остальных реакций) делает актуальным усовершенствование ионно-оптических схем газонаполненных сепараторов, направленное на увеличение их чувствительности и повышение эффективности очистки от продуктов побочных реакций.

В литературе представлено несколько работ, посвященных построению компьютерных моделей газонаполненных сепараторов [3–8]. Все эти модели основаны на методе статистического моделирования и привязаны к конкретным схемам сепараторов: GARIS в Осаке [3], HECK в Дармштадте [5], RITU в Jyväskylä [8], DGFRS в Дубне [6], BGS в Беркли [7]. Диспергирующим элементом сепаратора является дипольный магнит. С целью увеличения пропускания этот магнит либо имеет наклонные границы поля, обеспечивающие вертикальную фокусировку (GARIS, HECK, DGFRS), либо перед магнитом установлена вертикально фокусирующая квадрупольная линза (RITU, BGS). В работе [4] моделировался сепаратор на основе магнитного спектрографа, состоящего из двух магнитных диполей с общей обмоткой, разделенных областью слабого магнитного поля.

В указанных работах с той или иной степенью подробности учитывались основные физические процессы, происходящие при движении тяжелой заряженной частицы в газовой среде ионно-оптического тракта сепаратора и влияющие на его характеристики. Такими процессами являются: 1) торможение ионов и уширение их энергетических распределений; 2) рассеяние на малые углы при столкновениях с молекулами газа; 3) флуктуации ионного заряда вследствие захвата и потери электронов при столкновениях.

Как отмечалось в работе [9], можно выделить четыре независимые составляющие вклада в полные размеры изображения в фокальной плоскости сепаратора:

- ионно-оптические аберрации и поперечные размеры пучка на выходе из мишени;
- скоростная зависимость среднего равновесного заряда иона;
- флуктуации ионного заряда;
- рассеяние ионов в газе.

Разрешающая способность сепаратора определяется главным образом последними тремя из указанных факторов. Уширение изображения пучка ионов в плоскости детектора за счет эффектов ионно-молекулярных столкновений существенно доминирует над вкладом в это уширение нелинейных эффектов движения ионов в магнитных полях.

Несмотря на большой объем моделирования, проведенного при разработке существующих схем газонаполненных сепараторов, в имеющейся литературе недостаточно полно приведено описание используемых при этом математических моделей. Настоящая работа призвана дополнить существующие описания для того, чтобы сделать возможным адекватный синтез и анализ различных схем газонаполненных сепараторов.

Отметим, что такой анализ требует развития существующего математического обеспечения расчетов газонаполненных сепараторов в двух аспектах. Во-первых, оптимизация новых ионно-оптических схем требует разработки методов моделирования сепараторов, построенных на основе комбинации достаточно широкого набора дипольных и квадрупольных элементов, порядок следования которых может варьироваться. Метод компьютерного конфигурирования таких схем был разработан в работе [10]. Во-вторых, требуют уточнения и модели физических процессов, происходящих при транспортировке быстрых тяжелых ионов в газовых средах.

В настоящей работе представлена компьютерная модель широкого множества газонаполненных сепараторов, построенных на основе дипольных и квадрупольных магнитов. Модель реализована в виде двух компьютерных процедур. Первая основана на расчете матриц перехода в параксиальном приближении и обеспечивает имитационное моделирование на широком множестве ионно-оптических схем с минимальными временными затратами на генерирование ионно-оптической схемы и на получение статистики большого объема. Вторая внедрена в пакет SIMION 7.0 и позволяет проводить численное моделирование без ограничений, налагаемых параксиальным приближением при расчете траекторий. В работе приведены примеры расчетов по указанным моделям, которые могут являться основой для усовершенствования ионно-оптических схем трактов газонаполненных магнитных сепараторов.

1. МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАЕКТОРИЙ

Для описания траекторий использовалась стандартная техника статистического моделирования. В ее основу положена микроскопическая модель движения ионов в газовой среде, учитывающая процессы обмена электронами иона с молекулами газа, рассеяние ионов на малые углы в результате многократных столкновений и потери энергии. В этой части работы мы следуем в основном работам [4–6].

В настоящей работе мы не затрагиваем проблем моделирования начальных распределений ионов, которые в газонаполненных сепараторах формируются в результате реакций взаимодействия первичных пучков энергетических атомов с веществом бомбардируемой ими мишени. Отметим лишь, что эти распределения в типичных случаях отличаются широким зарядовым, энергетическим и угловым распределениями ионов.

1.1. Моделирование флуктуаций ионного заряда в сепараторе

Начальное зарядовое состояние иона после выхода из мишени может быть представлено, например, нормальным распределением

$$p(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_q} \exp\left(-\frac{(q - q_{in})^2}{2\sigma_q^2}\right), \quad (1)$$

где q_{in} — средний равновесный заряд ионов, составляющий, как правило, несколько десятков единиц элементарного заряда. Здесь и в дальнейших формулах под зарядом иона q подразумевается (как это принято в литературе, посвященной газонаполненным сепараторам) зарядовое число, т. е. отношение заряда иона к заряду протона. На практике модель начального зарядового распределения не имеет заметного влияния на результат расчетов движения ионов в сепараторе, поскольку трансформация начального зарядового распределения в равновесное распределение для ионов в газе со значениями среднего заряда в несколько единиц реализуется всего за несколько десятков столкновений. Поскольку тяжелый ион при движении в разреженном газе с давлением 1 Торр изменяет свое зарядовое состояние при атомных столкновениях 10^2 – 10^3 раз на 1 м пути в зависимости от типа иона и газа [15], то данная релаксация происходит на промежутке в несколько десятков сантиметров. Поэтому, если длина бесполового промежутка от мишени до первого ионно-оптического элемента сепаратора больше длины релаксации, траектории ионов в сепараторе не зависят от вида начального зарядового распределения.

В качестве промежутка дискретизации траектории принимается случайная величина — длина пробега l между двумя последовательными столкновениями, в которых происходит изменение заряда иона. Длина пробега генерируется в соответствии с соотношением

$$l = -\bar{\lambda} \ln R, \quad (2)$$

где R — равномерно распределенное на промежутке $[0,1]$ случайное число. Средняя длина пробега $\bar{\lambda}$ определяется полным сечением σ_i процесса изменения заряда и концентрацией n молекул газа

$$\bar{\lambda} = 1/(n\sigma_i). \quad (3)$$

Отметим, что сечение изменения заряда тяжелых ионов при движении в гелии существенно больше сечения при движении в водороде [9]. Средняя длина пробега между столкновениями с изменением заряда для тяжелых атомных ионов

в водороде при давлении 1 Торр составляет порядка 3–5 мм, в гелии эта длина порядка 1 мм.

Представленные в литературе модели обычно ограничиваются учетом одноэлектронных процессов обмена зарядом, т. е. захватом или потерей ионом одного электрона. Как показано в работе [11], в более адекватную модель следует включить процессы захвата ионом одного электрона (сечение процесса σ_c) и процессы потери одного или двух электронов (сечения процессов соответственно σ_l и σ_{2l}), поскольку процессы потери двух электронов приводят к асимметрии равновесных зарядовых распределений, наличие которой отмечалось в экспериментальных исследованиях [12]. В работе [11] было 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. Последнее обстоятельство приводит к заметной деформации пространственных распределений ионов в пучке в плоскости дисперсии сепаратора и должно приниматься во внимание при определении начальных настроек сепаратора.

В соответствии с принятой моделью:

$$\sigma_i(q) = \sigma_c(q) + \sigma_l(q) + \sigma_{2l}(q). \quad (4)$$

Для сечений одноэлектронных переходов, как и в работах [4, 5], у нас используется экспоненциальная аппроксимация:

$$\begin{aligned} \sigma_c(q) &= A_c \exp(a_c(q - q_0)), \\ \sigma_l(q) &= A_l \exp(-a_l(q - q_0)), \end{aligned} \quad (5)$$

где q — текущий заряд иона, q_0 — величина, которую приближенно можно считать равной среднему равновесному заряду иона \bar{q} . Такую же аппроксимацию мы используем для сечения потери двух электронов

$$\sigma_{2l}(q) = A_{2l} \exp(-a_{2l}(q - q_0)). \quad (6)$$

Вероятности переходов определяются из соотношений

$$\begin{aligned} p_c(q) &= \sigma_c(q) / \sigma_i(q), \\ p_l(q) &= \sigma_l(q) / \sigma_i(q), \\ p_{2l}(q) &= \sigma_{2l}(q) / \sigma_i(q). \end{aligned} \quad (7)$$

Заметим, что в случае одноэлектронных переходов, когда $\sigma_{2l} = 0$, среднее значение равновесного заряда $\bar{q} = q_0$. При учете потери двух электронов средний равновесный заряд увеличивается:

$$\bar{q} > q_0.$$

Значения коэффициентов в формулах (5) и (6) на настоящий момент являются наименее точно известными из всех параметров ионно-молекулярного взаимодействия. Их значения определяются из экспериментальных данных или аппроксимируются, исходя из соответствия данных моделирования и результатов эксперимента (см. раздел 2 настоящей работы).

Скоростная зависимость среднего равновесного заряда зависит от диапазона энергий ионов и атомных номеров ионов и атомов газа. В частности, в случае движения тяжелых атомных ионов в водороде в области скоростей $0.8 < v/v_0 < 2.6$, где $v_0 = e^2/\hbar = 2.19 \times 10^8$ см/с — боровская скорость, эта зависимость может аппроксимироваться простым выражением, полученным при обработке большого массива экспериментальных данных [13]:

$$\bar{q} = 3.26(v/v_0) - 1.39. \quad (8)$$

Аппроксимация (8) не содержит зависимости от атомного номера иона Z . Отметим, что существует множество других аппроксимаций, как например предложенная в работе [14]:

$$\bar{q} = Z \{1 - C_1 \exp[-C_2 v / (v_0 Z^\gamma)]\}. \quad (9)$$

Параметры C_1 , C_2 и γ определяются эмпирически для каждого иона и газа. В случае $C_1 = C_2 = 1$, $\gamma = 2/3$ и $v/(v_0 Z^\gamma) \ll 1$ соотношение (9) переходит в известную формулу Бора

$$\bar{q} = \frac{v}{v_0} Z^{1/3}. \quad (10)$$

В случае взаимодействия ионов с атомными номерами $36 < Z < 102$ с гелием в области скоростей $1.5 < v/v_0 < 4.5$ аппроксимация экспериментальных данных [14] дает значения параметров $C_1 = 1.04$, $C_2 = 0.91$, $\gamma = 2/3$.

Для ионов небольших масс (например, ионов первичного пучка) зависимости (8) и (9) дают неадекватное значение среднего заряда, в некоторых случаях превышающее атомный номер иона. В этом случае реалистическая аппроксимация среднего заряда имеет вид [16]

$$\bar{q} \approx Z \{1 - \exp[-1.25X + 0.32X^2 - 0.11X^3]\}, \quad (11)$$

где $X = v[\text{мм/мкс}]/(3.6 \times 10^3 Z^{0.45})$.

На рис. 1 приведены графики скоростной зависимости среднего равновесного заряда в водороде (формула (8), кривая 1) и в гелии (формула (9) при $Z = 102$, кривая 2). На этом же рисунке приведены соответствующие скоростные зависимости

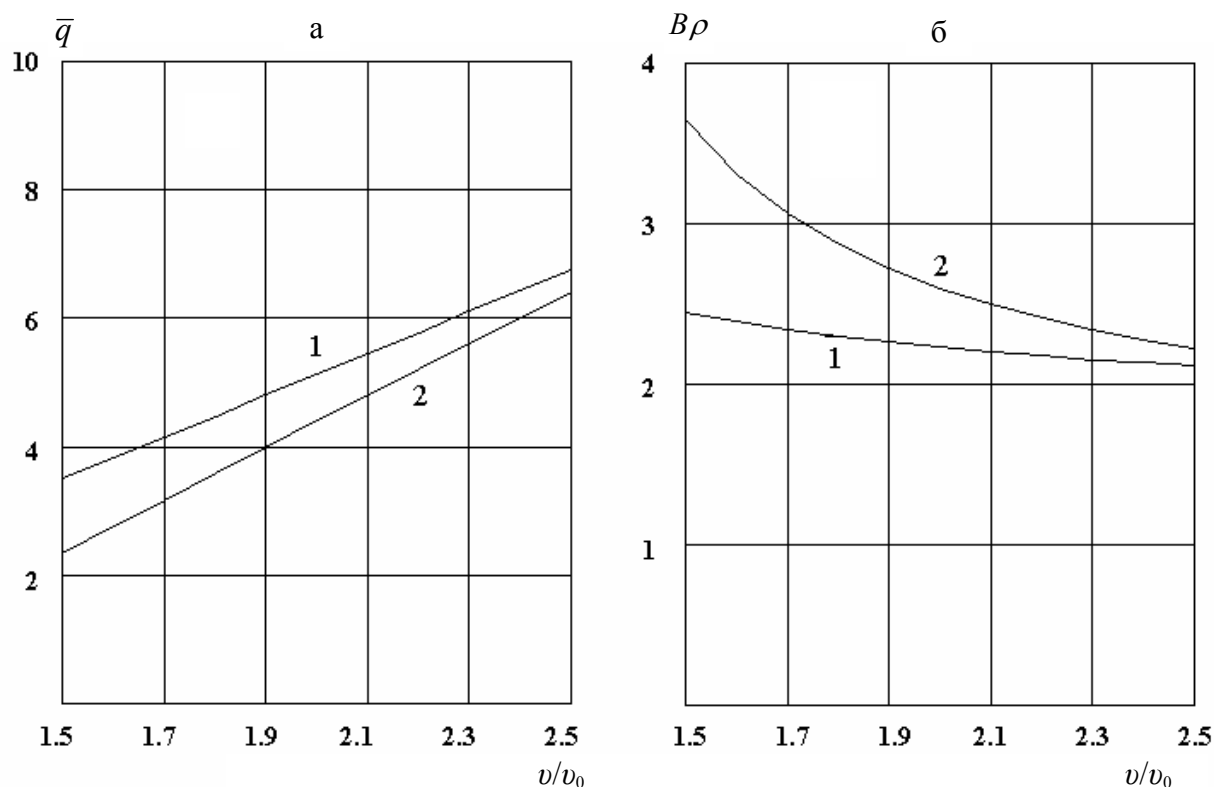


Рис. 1. Скоростная зависимость среднего равновесного заряда \bar{q} в единицах элементарного заряда (а) и магнитной жесткости $B\rho$ в единицах [Тл·м] (б) ^{252}No в водороде в аппроксимации [13] (формула (8), кривые 1) и в гелии в аппроксимации [14] (формула (9), кривые 2)

магнитной жесткости. Зависимости демонстрируют убывающий характер — дисперсия магнитной жесткости по скорости отрицательна. Заметим, что для боровской зависимости (10) эта дисперсия равна нулю, т. е. в приближении (10) наблюдается фокусировка ионов по скорости. Дисперсия магнитной жесткости по скорости (энергии) иона, присутствующая в более реалистичных моделях среднего заряда, вносит значительный вклад в ширину изображения ионного пучка в плоскости детектора газонаполненного сепаратора.

В каждом узле дискретизации траектории производится изменение заряда иона в соответствии с вероятностями (7). В аппроксимирующих выражениях для сечений (5) и (6) в качестве значения q_0 берется значение среднего равновесного заряда.

1.2. Моделирование углового рассеяния ионов

В принципе длина пробега ионов между двумя столкновениями с молекулами газа меньше расстояния между узлами дискретизации, рассчитываемыми в модели, поскольку не каждое столкновение приводит к изменению заряда иона. Однако

в рамках модели многократного углового рассеяния можно производить пересчет направления движения и энергии частицы лишь в каждом узле дискретизации.

В соответствии со стандартно принятой моделью угол отклонения траектории иона в узле дискретизации разыгрывается по нормальному закону

$$p(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_\theta} \exp\left(-\frac{\theta^2}{2\sigma_\theta^2}\right). \tag{12}$$

Дисперсия распределения σ_θ^2 пропорциональна длине l отрезка траектории, пройденной ионом между точками дискретизации, и концентрации молекул газа n . Ее численное значение определяется на основе формализма Мейера [17] и Зигмунда [18].

Удобная аппроксимация для полуширины распределения приведенного угла рассеяния предложена в работе [19]:

$$\tilde{\theta}_{1/2} = 0.92\tau^{0.56}, \tag{13}$$

где $\tilde{\theta}_{1/2} = \frac{Ea}{2Z_1Z_2e^2}\theta_{1/2}$; $\theta_{1/2}$ — полуширина распределения угла рассеяния; E — энергия иона; e — элементарный заряд; Z_1 и Z_2 — атомные номера иона и атома газа соответственно; $\tau = \pi a^2 nl$ — приведенная длина отрезка траектории l ; $a = 0.885a_0(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})^{-1/2}$; $a_0 = \hbar^2/m_e e^2 = 0.529 \times 10^{-8}$ см — боровский радиус. Стандартное отклонение распределения (13) может быть оценено по формуле

$$\sigma_\theta \approx \theta_{1/2} = \frac{2Z_1Z_2e^2}{Ea}\tilde{\theta}_{1/2}. \quad (14)$$

В грубом приближении для рассеяния тяжелых атомных ионов ($Z \approx 100$) в водороде при давлении 1 Торр и энергии иона 40 МэВ из формулы (14) можно получить оценку $\sigma_\theta \approx 10^{-4}$ мм^{-1/2}.

1.3. Моделирование потерь энергии

Энергия частицы на отрезке траектории длины l уменьшается на величину

$$\Delta E = sl, \quad (15)$$

где $s = -dE/dx$ — коэффициент торможения, значения для которого могут быть взяты из таблиц [20]. Скоростная зависимость коэффициента торможения определяется в соответствии с формулой Линдхарда—Шарфа [21], если скорость иона сравнима со скоростями атомных электронов, но не слишком велика ($v < Z_1^{2/3}v_0$, Z_1 — атомный номер иона, $v_0 = c/137 = 2.19 \times 10^8$ см/с — боровская скорость):

$$s = C_{LS}n\frac{v}{v_0}, \quad (16)$$

или в соответствии с формулой Бете—Блоха [22] для больших значений скорости

$$s = C_{BB}n\frac{v_0^2}{v^2}\ln(2mv^2/I), \quad (17)$$

где I — средний потенциал возбуждения атомов среды. Коэффициенты C_{LS} и C_{BB} определяются атомными номерами иона и атомов среды [11]. Для тяжелых атомных ионов в водороде при типичной энергии ионов 40 МэВ и давлении газа 1 Торр можно получить оценку $s \approx 1$ МэВ/м. Для движения ионов в гелии значение s примерно вдвое меньше.

1.4. Моделирование движения ионов на длине свободного пробега

На длине свободного пробега l ионы движутся по траекториям, определяемым магнитным полем элементов сепаратора. Выражения для этих траекторий могут быть взяты в параксиальном приближении, поскольку вклад ионно-оптических аберраций в размеры изображения пучка ионов на детекторе сепаратора значительно меньше вклада, обусловленного взаимодействием с молекулами газа.

2. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ИОНОВ В ГАЗОНАПОЛНЕННЫХ СЕПАРАТОРАХ НА ОСНОВЕ МЕТОДА МАТРИЦ ПЕРЕХОДА

Представленные в разделе 1 параметризации процессов ион-молекулярных столкновений были использованы при разработке программы расчета газонаполненных сепараторов, основанной на применении метода матриц перехода [23]. Ионно-оптическая схема сепаратора представляется в программе последовательностью блоков, каждый из которых относится к определенному типу: бесполовой промежутку, диафрагма, дипольный магнит, квадрупольный магнит, приемник. Каждому блоку ставится в соответствие свой набор параметров и своя процедура расчета траектории. Такой подход позволяет в рамках единого кода сконфигурировать любую схему, построенную с использованием дипольных и квадрупольных магнитов. Более подробное описание процедуры конфигурирования схемы сепаратора содержится в работе [10].

Расчет отдельной траектории начинается с вызова процедуры генерирования или считывания из файла данных начальных условий движения. Далее для каждой траектории производится последовательный проход по элементам схемы, представленных блоками. Данные, полученные в результате работы программы, хранятся в виде одномерных и двумерных гистограмм распределенной частиц по координатам, энергиям и зарядам.

Программа позволяет проводить моделирование траекторий без учета взаимодействия ионов со средой, а также с включением лишь отдельных факторов этого взаимодействия: малоуглового рассеяния, потери энергии, изменения заряда. Это позволяет исследовать вклад каждого из перечисленных факторов в отдельности.

На рис. 2–6 приведены некоторые результаты тестовых расчетов с целью настройки параметров программы и получения данных о влиянии различных факторов на разрешение сепаратора. Ионно-оптическая схема соответствует газонаполненному сепаратору DGFRS Лаборатории ядерных

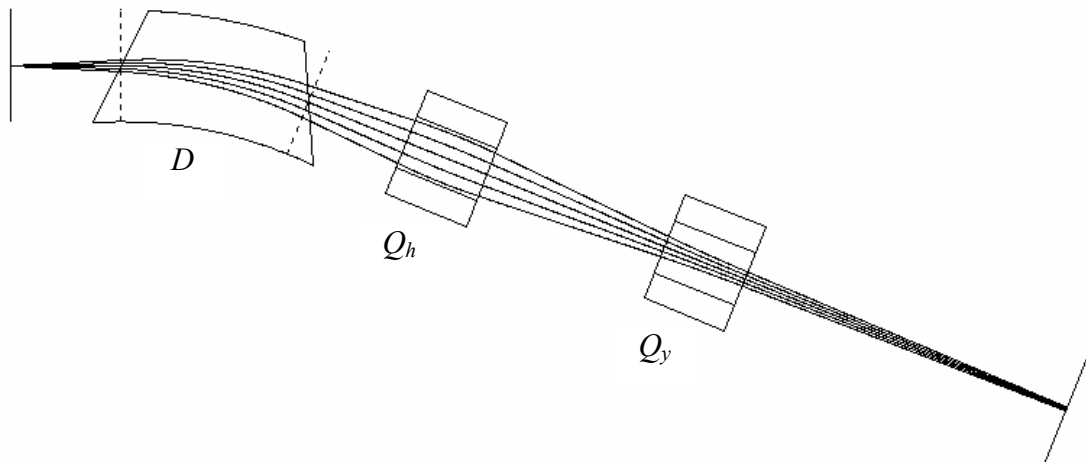


Рис. 2. Ионно-оптическая схема газонаполненного сепаратора DGFRS Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ [6] в плоскости дисперсии. Приведены параксиальные траектории ионов без учета взаимодействия со средой

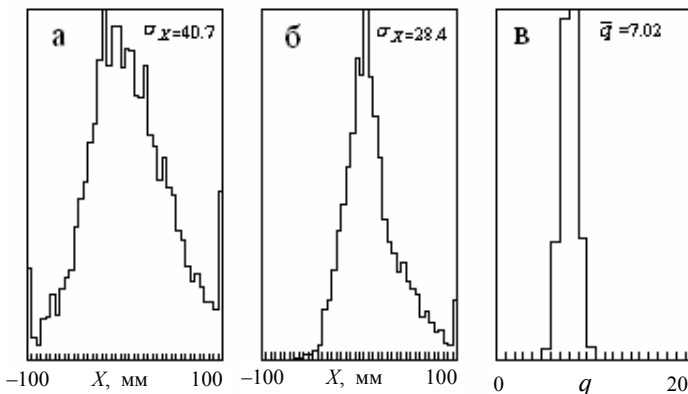
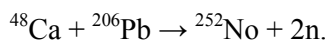


Рис. 3. Гистограммы распределений пучка ионов в плоскости детектора сепаратора по координате X в горизонтальной плоскости (в плоскости дисперсии). а — отключены все процессы взаимодействия со средой, присутствует только начальный энергоразброс — гауссово распределение со средним $E_0 = 40$ МэВ и стандартным отклонением $\sigma_E = 5$ МэВ, все ионы имеют одинаковый фиксированный заряд; б — включена флуктуация ионного заряда со значениями параметров $a_c = a_l = 2$, $A_c = A_l = 1$, $A_{2l} = 0$, приводящая к симметричному распределению по ионному заряду q — гистограмма (в)

реакций ОИЯИ [6]. Сепаратор имеет конфигурацию DQ_hQ_y : {дипольный магнит с однородным полем с косым входом и выходом, обеспечивающим фокусировку в вертикальной плоскости (ортогональной плоскости дисперсии)}—{квадрупольный магнит с фокусировкой в горизонтальной плоскости}—{квадрупольный магнит с фокусировкой в вертикальной плоскости}. Горизонтальный разрез его ионно-оптической схемы приведен на рис. 2. Здесь же показаны параксиальные траектории ионов без учета взаимодействия со средой. Физические параметры соответствуют иону ^{252}No , получающимся в реакции



Тестовые расчеты показывают следующее.

1. Пространственные распределения пучка ионов в плоскости детектора не зависят от начального зарядового распределения ионов, когда средняя длина свободного пробега по отношению к изменению заряда $\bar{\lambda} \leq 3$ мм. При этом ион до входа в магнитное поле дипольного магнита претерпевает не менее ста столкновений.

2. Наблюдается заметное уширение распределения пучка ионов в плоскости детектора по координате в горизонтальной плоскости X (в плоскости дисперсии) с увеличением ширины начального распределения ионов по энергиям (рис. 3, а). Включение процессов флуктуации ионного заряда со скоростной зависимостью среднего равновесного заряда (9) (кривая 2 на рис. 1) приводит к существенному сужению этого распределения (рис. 3, б), Это сужение более сильно выражено со стороны отрицательных значений X , соответ-

вующих меньшим значениям магнитной жесткости ионов, т. е. большим значениям скорости (см. рис. 1), где отрицательная дисперсия магнитной жесткости по скорости стремится к нулю. При нулевой дисперсии происходит фокусировка ионов по скоростям.

3. Угловое рассеяние ионов в результате многократных столкновений с атомами среды приводит к уширению пучка, примерно пропорциональному величине стандартного отклонения σ_θ в формуле (12) — рис. 4.

4. Пространственные X -распределения (в горизонтальном направлении) пучка ионов в плоскости детектора с ростом коэффициента торможения s ионов в газовой среде при неизменных настройках дипольного магнита сдвигаются в сторону отрицательных значений. Для устранения этого сдвига в программе предусмотрена автоматическая перенастройка магнитных элементов схемы с учетом изменения магнитной жесткости ионов при их торможении.

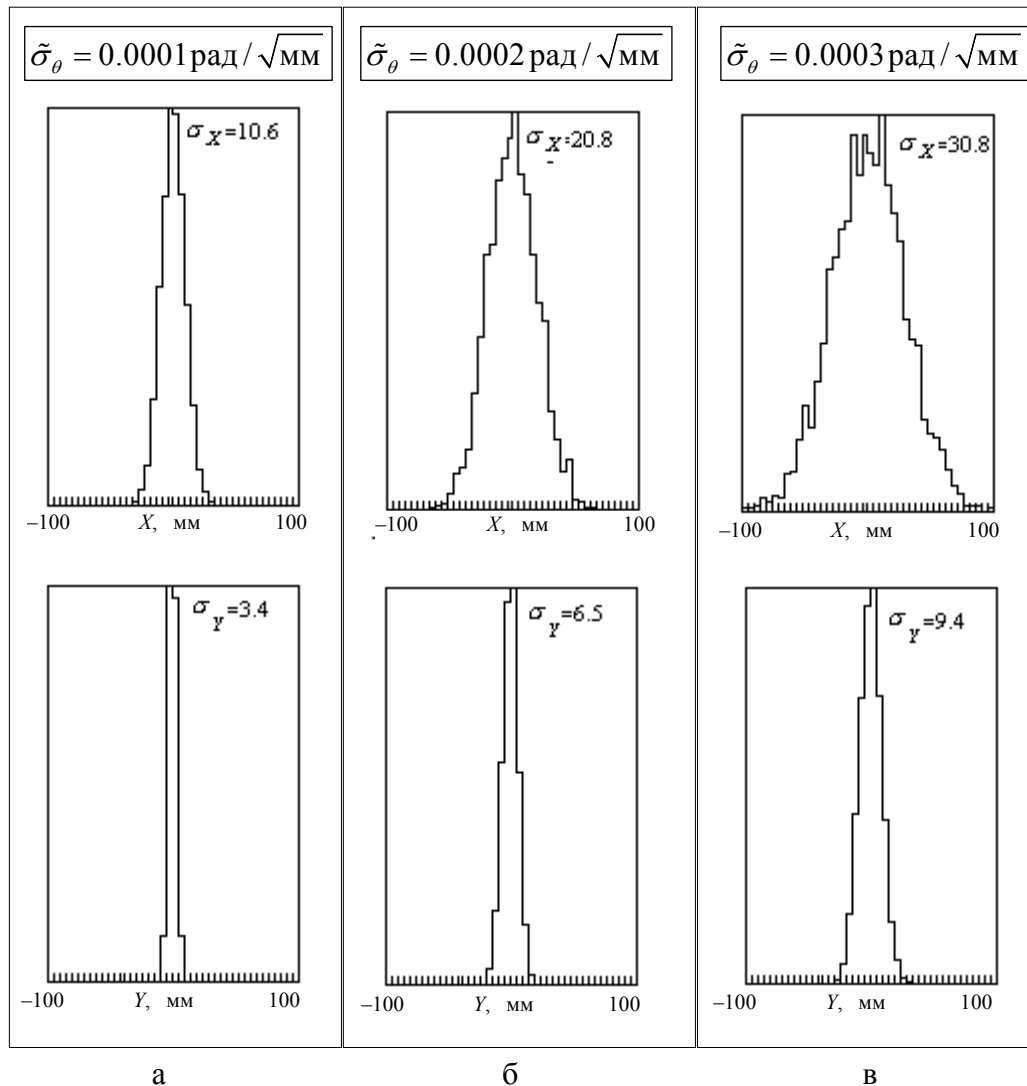


Рис. 4. Гистограммы распределений моноэнергетического ($\sigma_E = 0$) пучка ионов в плоскости детектора в зависимости от интенсивности рассеяния.

Варьируется (а, б, в) $\tilde{\sigma}_\theta$ — стандартное отклонение σ_θ в формуле (12), приведенное к промежутку $l = 1$ мм (величина указана на поле рисунка). Отключены процессы потери энергии ($s = 0$) и флуктуации заряда

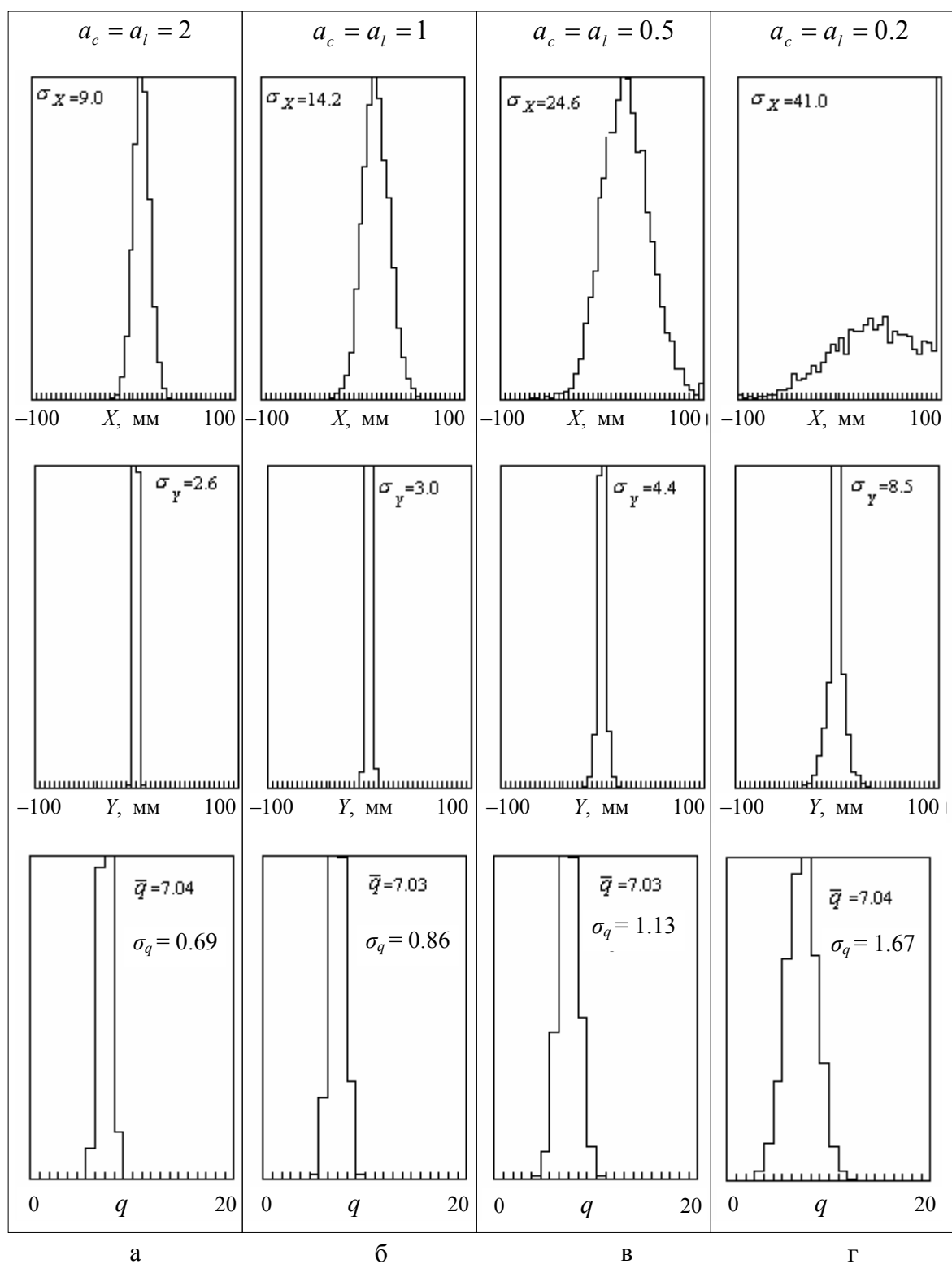


Рис. 5. Гистограммы распределений моноэнергетического ($\sigma_E = 0$) пучка ионов в плоскости детектора в зависимости от параметров флуктуации ионного заряда. Варьируются (а, б, в, г) a_c, a_l при фиксированных значениях $A_c = A_l = 1, A_{2l} = 0$. Отключены процессы потери двух электронов, торможения ($s = 0$) и рассеяния ионов

5. При увеличении ширины равновесного зарядового распределения происходит уширение пространственных распределений пучка ионов в плоскости детектора как в горизонтальном, так и в вертикальном (хотя и в меньшей степени) направлениях (рис. 5). Для симметричных зарядовых распределений, когда отключены процессы потери двух электронов, пространственные распределения в горизонтальной плоскости сдвигаются в сторону положительных значений. В этом смысле торможение ионов и флуктуации заряда при симметричных зарядовых распределениях — противоположно действующие факторы. В работе [11] было 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.

6. При включении всех физических процессов со значениями параметров $\lambda = 3$ мм, $\sigma_E = 3$ МэВ,

$s = 1000$ эВ/мм, $\tilde{\sigma}_\theta = 0.0001$ мм^{-1/2}, $a_c = a_l = a_{2l} = 1$, $A_c = A_l = 1$, $A_{2l} = 0.2$ приведенные на рис. 6 пространственные распределения удовлетворительно аппроксимируют экспериментальные данные, полученные на сепараторе в Дубне [6].

7. Зависимости от давления p ширины пространственных распределений пучка ионов в плоскости детектора в горизонтальном и вертикальном направлениях, представленные на рис. 7, демонстрируют наличие минимума. При низких давлениях пучок уширяется за счет флуктуаций ионного заряда и отклонения зарядового распределения от равновесного. При высоких давлениях усиливается угловое рассеяние пучка при многократных столкновениях с молекулами газа, усиливается торможение ионов и, как следствие, уменьшается средний равновесный заряд ионов, что приводит к усилению негативной роли флуктуаций ионного заряда.

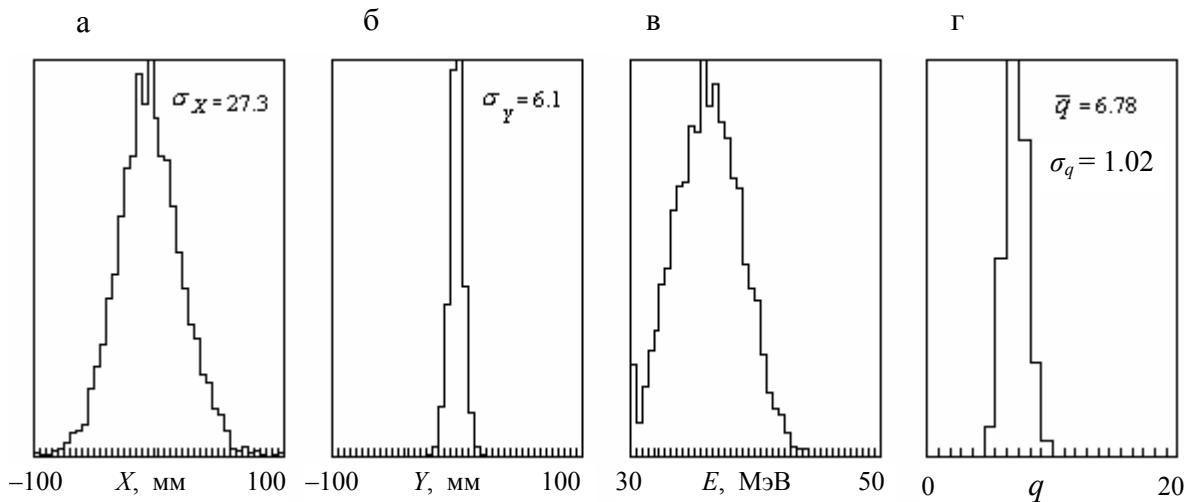


Рис. 6. Гистограммы распределений пучка ионов в плоскости детектора:

а — по координате в горизонтальной плоскости X (в плоскости дисперсии); б — по координате в вертикальной плоскости Y ; в — по энергии E ; г — по ионному заряду q . Включены все рассматриваемые процессы

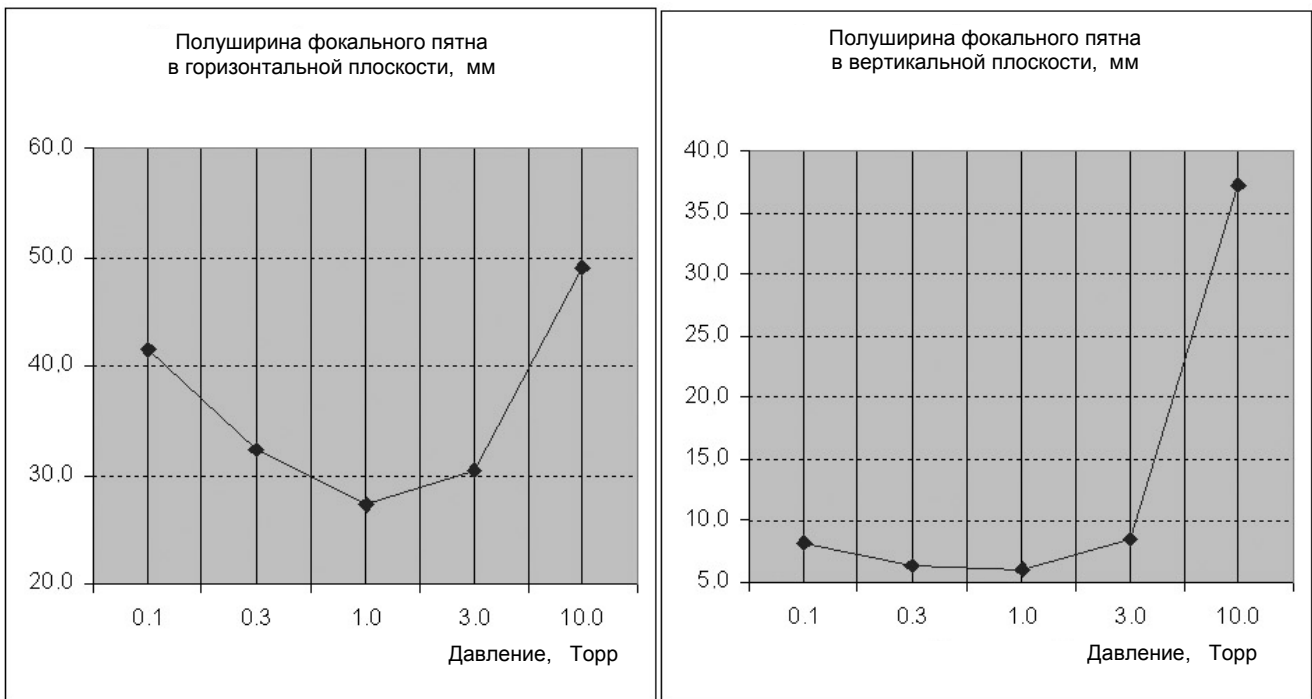


Рис. 7. Зависимость от давления p стандартных отклонений σ_x и σ_y пространственных распределений пучка ионов в плоскости детектора в горизонтальной и вертикальной плоскостях соответственно. Включены все рассматриваемые процессы. Зависимыми от давления являются параметры $\bar{\lambda} = 3p_0/p$ (мм), $\tilde{\sigma}_\theta = 0.0001\sqrt{p/p_0}$ (мм^{-1/2}), $s = 1000p/p_0$ (эВ/мм). При $p = p_0 = 1$ Торр значения параметров соответствуют значениям, аппроксимирующим экспериментальные данные, полученные на сепараторе в Дубне [6]

3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ИОНОВ В ГАЗОНАПОЛНЕННЫХ СЕПАРАТОРАХ НА ОСНОВЕ ПРОГРАММЫ SIMION

Альтернативной реализацией расчета представленных в разделе 1 параметризаций процессов в газонаполненных сепараторах является программа моделирования, выполненная на основе компьютерного пакета SIMION 7.0 [24]. С целью учета процессов ион-молекулярных взаимодействий для этого пакета была написана пользовательская программа, включающая разыгрывание случайных процессов столкновений ионов с молекулами газа, торможения ионов, углового рассеяния и перезарядки ионов. Поля магнитов в программе рассчитывались в приближении бесконечной магнитной проницаемости ферромагнитных элементов их конструкций.

Преимуществом моделирования на основе программы SIMION является отсутствие ограничений, связанных с параксиальным приближением расчета траекторий ионов между столкновениями. В частности, это позволяет более реалистично описывать поведение ионов с магнитной жесткостью,

сильно отличающейся от жесткости, на которую настроен прибор (ионов первичного пучка), а также фокусировку ионов с большими значениями относительного энергоразброса (см. пример ниже). Дополнительным преимуществом является удобство визуализации ионных траекторий, включая результаты процесса столкновений.

В целом результаты расчетов пропускания сепаратора и степени очистки ионов от нежелательных примесей, выполненных по указанной программе, и расчетов, выполненных с применением матричного метода (см. раздел 2), совпадают с хорошей точностью.

В качестве примера визуализации программой SIMION ионно-оптических систем газонаполненных сепараторов ионов на рис. 8 приведено трехмерное изображение геометрии масс-сепаратора DGFRS Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ [6] и двумерные проекции пучка ионов продукта реакции слияния $^{30}\text{Si} + ^{244}\text{Pu} \rightarrow ^{271}\text{Hs} + 3n$ при толщине плутониевой мишени 0.4 мг/см² на плоскость дисперсии сепаратора и перпендикулярную ей плоскость.

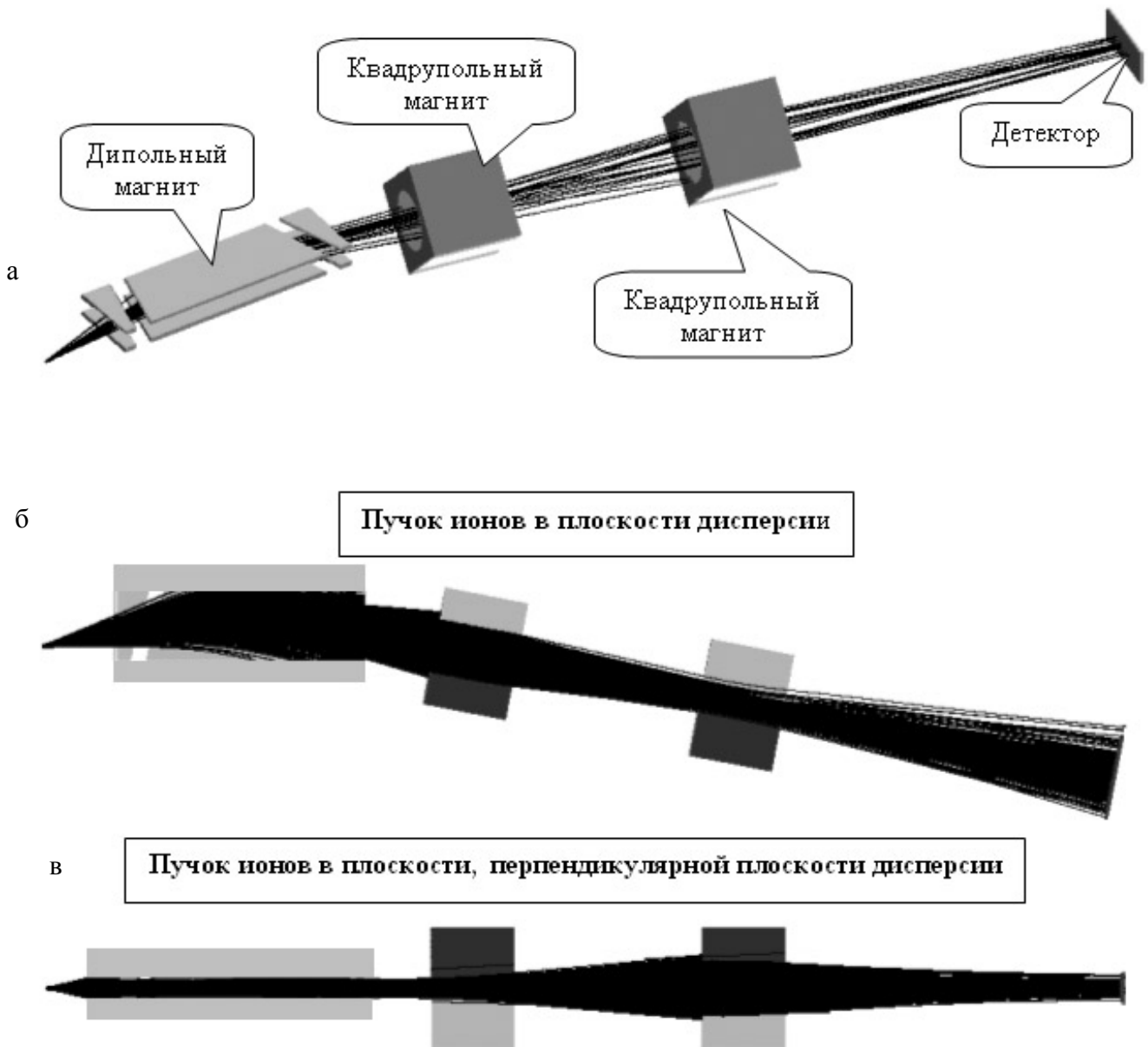


Рис. 8. Трехмерная визуализация (а) геометрии сепаратора DGFRS Лаборатории ядерных реакций ОИЯИ [6] программой SIMION и фокусировка пучка ионов в плоскости дисперсии (б) и перпендикулярной ей плоскости (в) при моделировании пропускания продукта реакции $^{30}\text{Si} + ^{244}\text{Pu} \rightarrow ^{271}\text{Hs} + 3\text{n}$. Толщина плутониевой мишени 0.4 мг/см^2

На рис. 9 изображено соответствующее расчетное распределение ионов в плоскости детектора. Рассматриваемая асимметричная реакция создает экстремальные начальные условия для сепаратора, поскольку характеризуется низкой средней энергией выхода ионов из мишени (около 13 МэВ) и очень большим 70 %-м энергоразбросом ионов, становящимся почти 100 %-м на выходе сепарато-

ра из-за торможения ионов в газе (H_2). Значительное расширение пучка ионов в бесполевого пространстве перед детектором обусловлено в основном этим энергоразбросом. Начальный угловой разброс ионов в конус с углом полураствора, большим 10° , приводит к отсечке существенной части пучка анализатором прежде всего за счет узкого межполюсного зазора дипольного магнита.

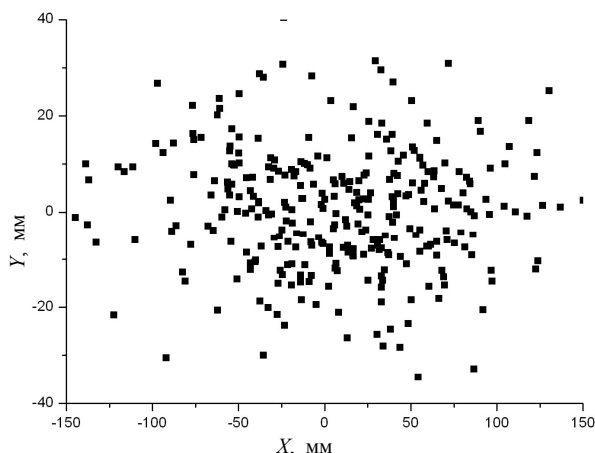


Рис. 9. Расчетное распределение попаданий ионов продукта реакции $^{30}\text{Si} + ^{244}\text{Pu} \rightarrow ^{271}\text{Hs} + 3n$ при толщине плутониевой мишени 0.4 мг/см^2 на плоскость детектора

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленные в работе алгоритмы и программы расчета свойств газонаполненных магнитных масс-сепараторов позволяют учесть все процессы взаимодействия ионов с молекулами газа в ионно-оптических трактах и адекватно моделировать пропускание и разрешающую способность таких сепараторов в широком диапазоне их геометрий и исследуемых продуктов реакций при условии использования внешних процедур моделирования начальных условий для пучков ионов, выходящих из мишени сепаратора. Это открывает возможность для сравнительного анализа ионно-оптических схем газонаполненных сепараторов и синтеза схем сепараторов нового поколения.

Авторы выражают благодарность Ю.Ц. Оганесяну и А.Г. Попеко за ценные обсуждения и предоставление начальных данных для тестовых расчетов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Leino M.* Gas-Filled Separators – An overview // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 2003. V. 204. P. 129–137.
2. *Оганесян Ю.Ц.* Новая область ядерной стабильности // Вестник РАН. 2001. Т. 71, № 7. С. 590–599.
3. *Miyatake H. et al.* INS Gas-Filled Recoil Isotope Separator // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 1987. V. 26. P. 309–313.
4. *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.
5. *Ninov V. et al.* Separation of Actinide-Made Transurania by a Gas-Filled Magnetic Separator // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A. 1995. V. 357, N 2-3. P. 486–494.
6. *Subotic K., Oganessian Yu.Ts., Utyonkov V.K., et al.* Evaporation Residue Collection Efficiencies and Position Spectra of the Dubna Gas-Filled Recoil Separator // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A. 2002. V. 481. P. 71–80.
7. *Gregorich K.E., Ginter J.N., Loveland W., Peterson D. et al.* Cross-Section Limits for the $^{208}\text{Pb}(^{86}\text{Kr},n)^{293}118$ Reaction // Eur. Phys. J. A. 2003. V. 18. P. 633–638.
8. *Leino M. et al.* Gas-Filled Recoil Separator for Studies of Heavy Elements // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 1995. V. 99. P. 653–656.
9. *Armbruster P., Eidens J., Gruter J.W., et al.* Are Gas-Filled Magnetic Separators a Useful Tool to Investigate Heavy Fast Recoils from Nuclear Reactions? // Nucl. Instr. Meth. 1971. V. 91. P. 499–507.
10. *Мележик А.В., Щербаков А.П.* Компьютерное моделирование газонаполненных сепараторов. I. Конфигурирование ионно-оптической схемы // Научное приборостроение. 2004. Т. 14, № 1. С. 58–66.
11. *Оленникова С.С., Щербаков А.П.* Компьютерное моделирование газонаполненных сепараторов. II. Флуктуации ионного заряда // Научное приборостроение. 2005. Т. 15, № 1. С. 80–86.
12. *Betz H.D.* Heavy Ion Charge States // Applied Atomic Collision Physics. 1983. V. 4. P. 1–42.
13. *Oganessian Yu.Ts., et al.* Average Charge States of Heavy Atoms in Dilute Hydrogen // Phys. Rev. C. 2001. V. 64, N 6. 064309. 6 p.
14. *Ghiorso A., Yashita S., Leino M.E., et al.* SASSY, a Gas-Filled Magnetic Separator for the Study of Fusion Reaction Products // Nucl. Instr. and Meth. Phys. Res. A. 1988. V. 269. P. 192–201.
15. *Leino M.* In-Flight Separation with Gas-Filled Systems // Nucl. Instr. Meth. B. 1997. V. 126. P. 320–328.
16. *Shima K., Ishihara T., Mikumo T.* Empirical Formula for the Average Equilibrium Charge-State of Heavy Ions behind Various Foils // Nucl. Instrum. Meth. 1982. V. 200. P. 605–608.
17. *Meyer L.* Plural and Multiple Scattering of Low-Energy Heavy Particles in Solids // Phys. Stat. Sol. B. 1971. V. 44. P. 253–268.
18. *Sigmund P. and Winterbon K.B.* Small-Angle Multiple Scattering of Ions in the Screened Coulomb Region. I. Angular Distributions // Nucl. Instr. Meth. 1974. V. 119, N 3. P. 541–557.
19. *Anne R., Herault J., Bimbot R., et al.* Multiple Angular Scattering of Heavy Ions ($^{16,17}\text{O}$, ^{40}Ar ,

- ^{86}Kr and ^{100}Mo) at Intermediate Energies (20–90 MeV/u) // Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B. 1988. V. 34. P. 295–308.
20. *Northcliffe L.C., Schilling R.F.* Range and Stopping-Power Tables for Heavy Ions // Nucl. Data Tables A. 1970. V. 7, N 3-4. P. 233–463.
21. *Lindhard J., Scharff M.* Energy Dissipation by Ions in the keV Region // Phys. Rev. 1961. V. 124. P. 128–130.
22. *Готт Ю.В.* Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях. М.: Атомиздат, 1978. 272 с.
23. *Вольник Г.* Оптика заряженных частиц. СПб.: Энергоатомиздат, 1992. 280 с.
24. *Dahl D.A.* SIMION 3D, v. 7.0: User's Manual. Idaho National Eng. Envir. Lab. 2000.

*Институт аналитического приборостроения РАН,
Санкт-Петербург*

Материал поступил в редакцию 27.06.2008.

NUMERICAL SIMULATION OF ION MOTION IN GAS-FILLED MAGNETIC MASS-SEPARATORS

A. P. Shcherbakov, M. I. Yavor

Institute for Analytical Instrumentation RAS, Saint-Petersburg

In the paper parameterizations of the main processes of ion-molecular interactions in gas-filled magnetic mass separators are presented. Using these parameterizations, two programs for computer modeling of ion motion in gas-filled separators are developed: one utilizing the transfer matrix method in paraxial approximation and the other one based on the program SIMION 7.0. Examples of test calculations of focusing of products of nuclear fusion reactions in the separator DGFRS of the Laboratory of nuclear reactions in JINR, Dubna, are given.