

**РАСЧЕТ СИЛЬНОТОЧНЫХ РЕЛЯТИВИСТСКИХ ПУЧКОВ  
С УЧЕТОМ СТОЛКНОВИТЕЛЬНЫХ ЭФФЕКТОВ**

*В. М. Свешников*

*(Новосибирск)*

В работе рассматриваются вопросы численного расчета релятивистских пучков заряженных частиц, движущихся в осесимметричных системах, в которых возможно наличие остаточного нейтрального газа. При этом необходимо учитывать явления, происходящие при столкновении заряженных частиц с нейтралами (например, ионизацию и перезарядку). Построены алгоритмы численного моделирования ионизационных процессов, которые реализованы в рамках прикладных программ ЭРА [1]. Приводятся примеры решения методических и практических задач.

Аналогичные задачи изучались в [2, 3], где учет процессов ионизации проводился по более сложной схеме, требующей большего объема вычислений, но справедливой для более низких давлений.

Рассмотрим следующую математическую постановку задачи. В замкнутой осесимметричной области  $\bar{G} = G + \Gamma$  с границей  $\Gamma$  требуется рассчитать движение пучка заряженных частиц с зарядом  $e$  (в дальнейшем будем предполагать, что «первичный» пучок заряженных частиц — электроны), массой покоя  $m$ . В области  $G$  возможно наличие нейтрального газа, находящегося под давлением  $p$ , являющимся функцией от  $(r, z)$  — координат точки наблюдения.

Уравнение движения частицы электронного пучка имеет вид

$$(1) \quad \frac{d}{dt} \left( \gamma m \frac{d\mathbf{R}}{dt} \right) = e\mathbf{E} + \frac{e}{c} [\mathbf{V} \times \mathbf{H}],$$

где  $\gamma$  — релятивистский фактор;  $c$  — скорость света;  $t$  — время;  $\mathbf{V} = d\mathbf{R}/dt$ ;  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{H}$  — электрическое и магнитное поля;  $\mathbf{R}$  — радиус-вектор электрона.

В начальный момент времени задаются координаты и скорости частиц:

$$(2) \quad \mathbf{R}|_{t=0} = \mathbf{R}_0, \mathbf{V}|_{t=0} = \mathbf{V}_0.$$

Электрическое поле  $\mathbf{E} = -\text{grad } \varphi$  находится из решения уравнения Пуассона для потенциала

$$(3) \quad \Delta\varphi = -4\pi\rho$$

с граничными условиями

$$(4) \quad \varphi|_{\Gamma} = g, \partial\varphi/\partial n|_{\Gamma} = 0,$$

где  $g$  — заданная функция координат;  $\rho$  — суммарная плотность объемно-го заряда электронов и ионов.

Магнитное поле предполагаем представимым в виде суммы внешнего магнитного поля и собственного магнитного поля пучка. Плотность тока  $\mathbf{j}_e$  электронного пучка на границе входа частиц в область предполагается либо заданной функцией координат, либо определяется по закону «3/2» [4]. Плотность тока ионов  $\mathbf{j}_i$  зависит от параметров реакции взаимодействия электронного пучка с нейтральным газом. Образовавшиеся в резуль-

тате столкновений ионы считаем нерелятивистскими. Их движение подчиняется уравнению

$$(5) \quad M d^2 \mathbf{R}_i / dt^2 = q \mathbf{E} + (e/c) [\mathbf{V}_i \times \mathbf{H}_B],$$

где  $M$  — масса;  $q$  — заряд иона;  $\mathbf{H}_B$  — внешнее магнитное поле.

Расчет электрического поля, т. е. решение уравнения Пуассона (3) с граничными условиями (4), производится разностными методами на прямоугольной сетке с кусочно-постоянным шагом [1].

Внешнее магнитное поле или однородное, или вычисляется в области по значениям, заданным на оси симметрии, при помощи ряда [4]. Для интегрирования уравнений движения (1) с начальными условиями (2) предлагается схема второго порядка точности по времени. В соответствии с теоремой Буша [5] и с применением формул аналитического продолжения магнитного поля по его значениям на оси симметрии угловая скорость электрона в точке  $(r, z)$  может быть определена как [4]

$$(6) \quad \dot{\psi} = -\frac{e}{2m\gamma} \left[ H(0, z) - \frac{r_0^2}{r^2} \left( H(0, z_0) - \frac{1}{8} r_0^2 H_z''(0, z_0) \right) - \frac{1}{8} r^2 H_z''(0, z) \right],$$

где  $(r_0, z_0)$  — координаты точки влета. Введем величины

$$p_r = \gamma v_r, \quad p_z = \gamma v_z, \quad p_\psi = \gamma \dot{\psi}$$

( $v_r, v_z$  — составляющие скорости  $\mathbf{V}$ ).

Из уравнения (1) получим соотношения

$$\begin{aligned} \frac{dp_r}{dt} &= r \dot{\psi}^2 \gamma + \frac{e}{m} E_r + \frac{e}{mc} \left( H_z r \dot{\psi} - H_\psi \frac{p_z}{\gamma} \right), \\ \frac{dp_z}{dt} &= \frac{e}{m} E_z + \frac{e}{mc} \left( H_\psi \frac{p_r}{\gamma} - H_r r \dot{\psi} \right), \end{aligned}$$

которые интегрируем численно с шагом  $\Delta t_n$  по схеме

$$(7) \quad \begin{aligned} p_r^{n+1} &= p_r^n + \Delta t_n \left[ r^{n+1/2} (p_\psi^{n+1/2})^2 / \gamma^{n+1/2} + \frac{e}{m} E_r^{n+1/2} + \right. \\ &+ \left. \frac{e}{mc} (H_z^{n+1/2} r^{n+1/2} p_\psi^{n+1/2} / \gamma^{n+1/2} - H_\psi^{n+1/2} (p_z^n + p_z^{n+1}) / (2\gamma^{n+1/2})) \right], \\ p_z^{n+1} &= p_z^n + \Delta t_n \left[ \frac{e}{m} E_z^{n+1/2} + \frac{e}{mc} (H_\psi^{n+1/2} (p_r^n + p_r^{n+1}) / (2\gamma^{n+1/2}) - \right. \\ &- \left. H_r^{n+1/2} r^{n+1/2} p_\psi^{n+1/2} / \gamma^{n+1/2} \right], \end{aligned}$$

имеющей погрешность  $O(\Delta t_n^2)$ .

Значения электрических и магнитных величин здесь вычисляются в средней точке

$$(8) \quad r^{n+1/2} = r^n + v_r^n \frac{\Delta t_n}{2}, \quad z^{n+1/2} = z^n + v_z^n \frac{\Delta t_n}{2}.$$

Вблизи оси симметрии может оказаться  $r^{n+1/2} < 0$ . В этом случае в схеме (7) меняется знак величин  $r^n, r^{n+1/2}, v_r^n$ . В точке с координатами (8) найдем значение  $p_\psi^{n+1/2}$  по формуле (6).

Окончательное вычисление координат и скоростей осуществляем по формулам

$$\begin{aligned} r^{n+1} &= r^n + \frac{p_r^n + p_r^{n+1}}{2\gamma^{n+1/2}} \Delta t_n, \quad z^{n+1} = z^n + \frac{p_z^n + p_z^{n+1}}{2\gamma^{n+1/2}} \Delta t_n, \\ v_r^{n+1} &= \frac{p_r^{n+1}}{\gamma^{n+1}}, \quad v_z^{n+1} = \frac{p_z^{n+1}}{\gamma^{n+1}}, \end{aligned}$$

где  $\gamma$  в средней точке определяем как

$$\gamma^{n+1/2} = 1 + \frac{|e\varphi(r^{n+1/2}, z^{n+1/2})|}{mc^2},$$

а в  $(n+1)$ -й точке — по формулам

$$(9) \quad \gamma^{n+1} = 1 + \frac{(r^{n+1})^2}{c^2}, \quad p^{n+1} = ((p_r^{n+1})^2 + (p_z^{n+1})^2 + (r^{n+1}p_\psi^{n+1})^2)^{1/2}.$$

Такой подход, т. е. расчет  $\gamma$  в средней точке через потенциал, а в  $(n+1)$ -й — через значения  $p_r^{n+1}$ ,  $p_z^{n+1}$ ,  $p_\psi^{n+1}$ , обусловлен следующими соображениями. Определение потенциала в какой-либо точке требует значительного объема вычислений, связанного с нахождением ближайших узлов разностной сетки и проведением интерполяции. В точке  $(n+1/2)$  эти операции так или иначе делаются при нахождении составляющих напряженности электрического поля, а в точке  $(n+1)$  их необходимо проводить специально только для нахождения  $\gamma$ . Поэтому в последнем случае представляется более экономичным расчет по формулам (9).

При расчете собственного магнитного поля учитываем лишь азимутальную компоненту

$$H_\psi = 2I/cR,$$

где  $I$  — ток через сечение радиуса  $R$ .

В основе численного алгоритма для вычисления  $\vec{H}_\psi$  лежит метод, описанный в [6]. При прохождении траекторий в узлах разностной сетки, охватывающей ту подобласть, в которой идет пучок, запоминается пространственная картина распределения токов  $I_{ij}$  в рассматриваемой области. В данной работе исходя из предположения, что плотность тока постоянна в пределах  $(i, j)$ -й элементарной ячейки, построены формулы для расчета собственного магнитного поля:

$$H_\psi(r_T, z_T) = \begin{cases} \frac{2I_{ij}}{c(0,5h_1^r)^2} r_T & \text{при } r_T \leq 0,5h_1^r, \\ \frac{2}{cr_T} [I_{i-1j} + (I_{ij} - I_{i-1j})] \frac{r_i^2 - r_{i-1/2}^2}{r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2} & \text{при } r_T \geq 0,5h_1^r, \end{cases}$$

где  $r_{i+1/2} = 0,5(r_i + r_{i+1})$ ;  $h_1^r$  — шаг сетки вблизи оси симметрии;  $\bar{I}_{ij}$  — суммарный ток, т. е. сумма токов всех траекторий, проходящих через  $j$ -е сечение с площадью  $\Delta S_{ij} = \pi(r_{i+1/2}^2 - r_{i-1/2}^2)$  (вблизи оси симметрии  $\Delta S_{ij} = 0,25\pi(h_1^r)^2$ ).

Численное моделирование процессов, происходящих при прохождении пучка электронов в среде с остаточным газом, проводится следующим образом. Отметим, что электроны, рождающиеся в процессах ионизации, предполагаются «быстрыми», и их вклад в объемный заряд не учитывается.

При расчете электронной траектории из средней точки  $(r_\xi^-, z_\xi^-)$  каждого ее интервала длиной  $\Delta l_\xi^-$  «запускается» ионная траектория с начальными условиями (7), несущая ток

$$\Delta I_{v\xi}^+ = I_v^- N_0 \sigma_i \Delta l_\xi^-,$$

где  $I_v^-$  — ток электронной траектории;  $N_0$  — плотность нейтрального газа ( $N_0 = p/kT$ );  $\sigma_i$  — сечение ионизации, зависящее от энергии электронов [7]:

$$(10) \quad \sigma_i = c_1 \frac{\frac{\varphi(r_\xi^-, z_\xi^-) - 1}{\varphi_i}}{\left(\frac{\varphi(r_\xi^-, z_\xi^-)}{\varphi_I}\right)^2} \ln \left( 1,25 \frac{\varphi(r_\xi^-, z_\xi^-)}{\varphi_I} \right)$$

( $\varphi_I$  — потенциал ионизации,  $c_1$  — коэффициент, зависящий от характеристик остаточного газа). Интегрирование уравнений движения ионов (5) проводим численно по схеме второго порядка точности. При расчете ионной траектории учитываются процессы перезарядки, состоящие в образовании нейтрала и иона. Для этого из средней точки ( $r_{\xi}^+$ ,  $z_{\xi}^+$ ) каждого интервала  $\Delta l_{\xi}^+$  «первичной» ионной траектории «запускается» вторичная ионная траектория, несущая ток

$$\Delta I_{v_{\xi}^+}^{+p} = \Delta I_{v_{\xi}^+}^+ N_0 \sigma_{ip} \Delta l_{\xi}^+,$$

где  $\sigma_{ip}$  — сечение перезарядки. Данная траектория просчитывается до выхода из области без учета ионизационных процессов, вызванных ее ионами. При дальнейшем расчете «первичной» ионной траектории ее ток уменьшается на величину тока перезарядки  $\Delta I_{v_{\xi}^+}^{+p}$ . Сечение  $\sigma_{ip}$  определяется из экспериментальной зависимости от энергии первичного потока.

Рассмотренные алгоритмы реализованы в виде модулей пакета прикладных программ ЭРА [1], разработанных на языке ФОРТРАН. В пакете предусмотрен вывод электронных и ионных траекторий на АЦПУ и графопостроитель. При этом, так как объем информации, выводимой в задачах с учетом ионизационных эффектов, велик, предусмотрена возможность разбиения расчетной области на несколько подобластей и вывода ионных траекторий в каждой такой подобласти с определенным разрежением. Такой подход позволяет получить детальную картину поведения траекторий в интересующей подобласти, не загромождая вывод излишней информацией.

Рассматривалась задача о расчете одномерного плоского диода  $0 \leq z \leq z_R = 10$  см с граничными условиями для потенциала  $\varphi(0) = 0$ ,  $\varphi(z_R) = 500\,000$  В, в котором из плоскости  $z = 0$  «запускается» пучок электронов с нулевыми начальными скоростями и плотностью тока, вычисляемой по закону «3/2». Электронный пучок движется в воздушной среде, находящейся под давлением  $p = 0,667$  Па. Учитываются процессы ионизации электронами остаточного газа, который будем предполагать состоящим из молекул азота.

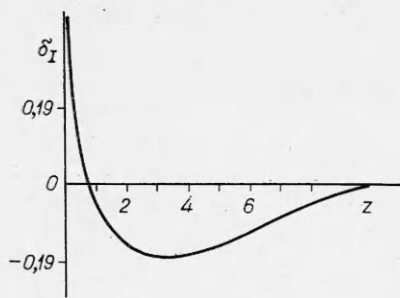
Расчеты проводились на равномерной сетке с числом узлов по оси  $z$ , равным 80. Ионные траектории «запускались» через интервалы  $\Delta l_{\xi}^-$ , длины которых определялись следующим образом (размеры даны в см):

$$\Delta l_{\xi}^- = \begin{cases} 0,1 & \text{при } 0 \leq z \leq 0,5, \\ 0,25 & \text{при } 0,5 \leq z \leq 1,5, \\ 0,6 & \text{при } 1,5 \leq z \leq 10. \end{cases}$$

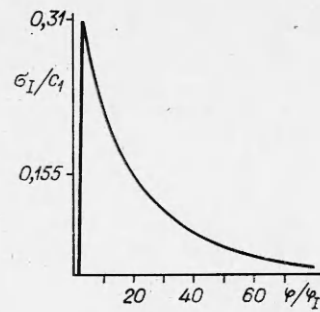
На рис. 1 приведен график функции  $\delta_I = (\varphi_p - \varphi_s)/\varphi_p$ , являющейся относительным отклонением распределения потенциала  $\varphi_p$  с учетом процессов ионизации от распределения потенциала  $\varphi_s$  в самосогласованной задаче. Эта функция максимальна в прикатодной области, что приводит к значительному увеличению плотности тока, отбираемой с катода по сравнению с решением самосогласованной задачи без учета ионизационных процессов (плотность тока с учетом процессов ионизации  $j_p = 18,1$  А/см<sup>2</sup>, а плотность тока без их учета  $j_s = 8,2$  А/см<sup>2</sup>). Значительная величина плотности тока приводит к тому, что при выходе из прикатодной области функция убывает и меняет знак.

На рис. 2 показано сечение ионизации  $\sigma_i$  ( $c_1 = 2 \cdot 10^{-15}$  см<sup>2</sup> в выражении (10)) в зависимости от потенциала; видно, что максимум этой функции достигается также вблизи катода (потенциал ионизации для молекул азота равен 15,6 эВ).

С целью уточнения расчетов в прикатодной области организован следующий итерационный процесс. В промежутке  $\Omega_1 = [0, 0, 02]$  проводился расчет с повышенной точностью на неравномерной сетке с границами зон постоянного шага  $z_0 = 0$ ,  $z_1 = 0,0005$ ,  $z_2 = 0,001$ ,  $z_3 = 0,002$ ,  $z_4 =$

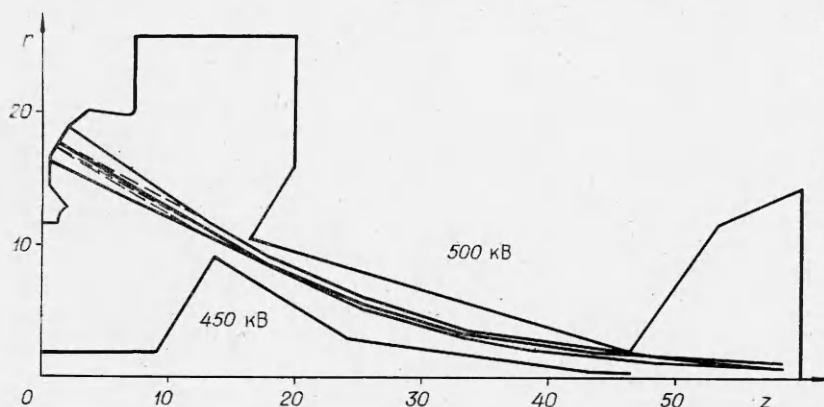


Р и с. 1



Р и с. 2

$= 0,004$ ,  $z_5 = 0,009$ ,  $z_6 = 0,02$  и числом узлов в них соответственно  $l_1 = 10$ ,  $l_2 = 5$ ,  $l_3 = 5$ ,  $l_4 = 4$ ,  $l_5 = 4$ ,  $l_6 = 5$ ; интервалы  $\Delta l_{\xi}^-$  при этом выбирались таким образом, чтобы электронная траектория проходила расстояние между точками, в которых потенциал равен  $k_i \varphi_I$ . Числа  $k_i$  задавались в виде  $k_1 = 1$ ,  $k_2 = 1,5$ ,  $k_3 = 2$ ,  $k_4 = 2,5$ ,  $k_5 = 3$ ,  $k_6 = 5$ ,  $k_7 = 6$ ,  $k_8 = 8$ ,  $k_9 = 10$ ,  $k_{10} = 20$ ,  $k_{11} = 30$ ,  $k_{12} = 50$ ,  $k_{13} = 100$ ,  $k_{14} = 500$ ,  $k_{15} = 2000$ . На границе подобласти в точке  $z = 0,02$  задавался потенциал из решения данной задачи на «грубой» сетке. Со значением плотности тока, полученным из решения в данной подобласти, проводились расчеты в промежутке  $\Omega_2 = [0,0156; 10]$  на равномерной сетке с числом узлов, равным 100, и параметром  $\Delta l_{\xi}^- = 0,5$ . Потенциал в точке  $z = 0,0156$  при этом брался из решения в  $\Omega_1$ . При получении решения в  $\Omega_2$ , потенциал в точке  $z = 0,02$  пересчитывался путем линейной интерполяции, вновь проводился расчет в  $\Omega_2$ , и так далее, пока значения плотности тока в двух соседних итерациях не будут отличаться на малую величину. В результате



Р и с. 3

расчетов это значение равно  $28 \text{ A/cm}^2$ , т. е. более чем на 50% больше плотности тока, полученной из расчетов на фиксированной сетке, что говорит о необходимости проведения более точных расчетов в прикатодной области для таких задач.

Рассматривалась практическая задача, поставленная П. И. Акимовым, по расчету электронного пучка в электронно-оптической системе, геометрия которой представлена на рис. 3. Давление остаточного газа, который предполагаем состоящим из молекул азота,  $p = 0,667 \text{ Па}$ , сечение ионизации постоянно для всех энергий ( $\sigma_i = 3 \cdot 10^{-18} \text{ см}^2$ ). На рис. 3 сплошной линией показано поведение электронных траекторий, а штриховой — пример поведения ионных траекторий.

В постановке задачи учета влияния ионизационных процессов принимали участие П. И. Акимов и А. Л. Комов, которым автор выражает искреннюю благодарность.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Горбенко Н. И., Ильин В. П., Попова Г. С., Свешников В. М. Пакет программ ЭРА для автоматизации электронно-оптических расчетов. — В кн.: Численные методы решения задач электронной оптики. Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1979.
2. Дзагуров Л. Ю., Коваленко Ю. А. Учет влияния понов в задачах численного моделирования релятивистских электронных пучков. Деп. ВИНТИ № 1957 — 80, 1980.
3. Дзагуров Л. Ю. Методы расчета электронно-оптических свойств ускоряющих систем с газовым наполнителем. Автореф. канд. дис. М.: МФТИ, 1980.
4. Ильин В. П. Численные методы решения задач электрооптики. Новосибирск: Наука, 1974.
5. Алямовский И. В. Электронные пучки и электронные пушки. М.: Сов. радио, 1966.
6. Астрелин В. Т., Свешников В. М. Расчет движения релятивистских пучков заряженных частиц в электромагнитных полях. — ПМТФ, 1979, № 3.
7. Митчнер М., Кругер Ч. Частично ионизованные газы. М.: Мир, 1976.

Поступила 26/X 1984 г.

УДК 533.6.011.8+551.510.535

## КОЛЕБАТЕЛЬНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ МОЛЕКУЛ $\text{CO}_2$ ПРИ ИНЖЕКЦИИ В ИОНОСФЕРУ

*Н. М. Булгакова, А. К. Ребров*

*(Новосибирск)*

В связи с активным освоением космического пространства ставится задача о влиянии полетов космических летательных аппаратов (КЛА) на состояние атмосферы. Двигатели КЛА выбрасывают в атмосферу большое количество молекул  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}_2$ . Инжектируемый газ, расширяясь, занимает в атмосфере объемы с линейным размером в десятки и даже сотни километров. При этом концентрация выбрасываемых молекул остается сравнимой с концентрацией атмосферных компонентов. С этой точки зрения инжекция выхлопных газов может дать ощутимый вклад в локальный тепловой баланс атмосферы. В [1] в связи с вышеуказанной проблемой рассмотрена задача о колебательной релаксации молекул воды за ударной волной. В данной работе решается задача о колебательной релаксации  $\text{CO}_2$  при смешении с атмосферным газом.

В диапазоне температур 2000—3000 К колебательная релаксация  $\text{CO}_2$  по сравнению с  $\text{H}_2\text{O}$  происходит медленно в столкновении с молекулами, скорости возбуждения колебательных степеней свободы  $\text{CO}_2$  электронами существенно выше (примерно в  $10^3$ ). В  $F$ -области ионосферы степень ионизации атмосферного газа достигает  $10^{-3}$ , и, следовательно, электроны могут сыграть определяющую роль в возбуждении колебательных уровней  $\text{CO}_2$ , что в свою очередь скажется на тепловом излучении.

Поскольку возбуждение молекулярных газов электронами — естественное явление, наблюдающееся в верхних слоях атмосферы, то этой проблеме посвящено множество работ. В [2] проведен обзор работ по скоростям охлаждения электронов в ионосфере, [3] посвящена инфракрасному излучению невозмущенной верхней атмосферы с учетом возбуждения колебательных уровней  $\text{CO}_2$  электронами и влияния на интенсивность инфракрасного излучения электрических полей, существующих в ионосфере. В данной работе ставится задача о влиянии электронов и электрических полей на колебательный энергообмен при смешении атмосферного и инжектируемого газов. Поскольку при инжекции молекул  $\text{H}_2\text{O}$  и  $\text{H}_2$  в ионосферу наблюдается существенное снижение концентрации электронов [4], учитывается и этот эффект.

Постановка модельной задачи следующая. Считается, что атмосферный и инжектируемый газы мгновенно смешиваются с равными расходами и нагреваются при торможении за счет разницы скоростей. При этом реализуется разрыв газодинамических параметров, который аналогичен прохождению по смеси ударной волны. Рассматривается случай, когда смесь нагревается при таком смешении до температур  $\sim 2000$  К и сжимается в 2—3 раза. В расчетах, результаты которых приведены ниже, инжектируемый газ состоит из равного количества  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2$  и  $\text{H}_2\text{O}$  с добавлением 4%  $\text{CO}_2$ . Состав и газодинамические параметры атмосферного газа взяты из CIRA-72.

Численно решается система уравнений газовой динамики, описывающая ударную волну (здесь и далее под ударной волной подразумевается разрыв, о котором сказано выше), уравнений для заселенностей колеба-