

电子束沉积能的时间/空间分布的计算

汪 汝 清

(中国科学院大连化学物理研究所)

提 要

我们将时间引入蒙特卡罗电子输运计算,在与实际激光器相近的条件下,计算了电子束在氩激光介质中的沉积能,得到时间/空间分辨的沉积能分布。

一、引 言

计算电子输运问题的蒙特卡罗方法,是求解电子束沉积能分布的一种有效手段,但以往的计算并不包含时间,只能得到空间分布。在瞬态沉积情况下,将时间引入计算非常有意义,脉冲电子束激励的激光器(以下简称电子束激光器)就是一例。文献[1]计算了电子输运的基本问题,本工作将其模型进一步完善,并提出一种包含时间的蒙特卡罗电子输运计算方法。用这种方法,我们计算了激光介质中的电子束沉积能,得到指定时间间隔内沉积能的空间分布(即时间/空间分布),这些结果对电子束激光器的激励功率,给出了时空分辨的定量描述。

二、物理模型与计算方法

本工作在位置坐标与运动方向均为三维的情况下,用 Bethe 的连续慢化近似计算电子的非弹性碰撞能量损失,按 Goudsmit-Saunderson 多次散射理论计算电子的弹性碰撞角偏转,并计及电子的韧致辐射能量损失。此外,还加入了电子的碰撞能量损失歧离(Landau 分布),以及次级电子的产生与输运两种效应,使计算的蒙特卡罗方法从文献[1]的完全归组,转化为混合方法(详见文献[2])。与文献[1]的另一个差别是,电子的初始能量、时间都允许具有指定的分布。

计算中包含时间,是本工作的又一个改进。若在一个压缩过程^[1]中,电子第 n 步随机游动通过的程长为 $\Delta S_n = S_n - S_{n-1}$,则该步中电子经过的时间为:

$$\Delta t_n = \int_{S_{n-1}}^{S_n} \frac{dS}{v(S)} = \int_{E_n}^{E_{n-1}} \left[v(E) \left| \frac{dE}{dS} \right| \right]^{-1} dE, \quad n=1, 2, \dots, \quad (1)$$

其中, v 为电子的运动速度, S_n 、 E_n 为电子在第 n 步游动结束时的程长与能量, dE/dS 为电子的单程能量损失(包括碰撞与辐射两种损失)。故电子在第 n 步游动结束时的时间 t_n 为:

$$t_n = t_0 + \sum_{j=1}^n \Delta t_j, \quad n=1, 2, \dots, \quad (2)$$

这里, t_0 为电子的初始时间。(1)式中 dE/dS 的辐射损失部分的计算, 采用了文献 [3] 中的 4BN 和 4BN(a) 型韧致辐射总截面。在兆电子伏量级以下的能量范围内, 电子的碰撞能量损失较辐射能量损失要大得多, 它决定了 Δt_n 的计算精度。作为第一级近似, 可按 Bethe 的连续慢化近似计算 (1) 式中 dE/dS 的碰撞损失部分, 从而得到一步游动经过的平均时间 $\overline{\Delta t_n}$ 。为提高精度, 我们通过碰撞能量损失歧离 δE_n 来修正 $\overline{\Delta t_n}$, 因为指定程长间隔内 δE_n 的大小, 直接反映了碰撞次数的多少, 也决定了输运时间的长短。由此得 $\Delta t_n = \overline{\Delta t_n} + \delta t_n$, δt_n 为 δE_n 给出的时间修正。一步游动中从 Landau 分布抽样得 δE_n 后, 用插值法便可算出 δt_n 。上述 (1)、(2) 式及对 $\overline{\Delta t_n}$ 的修正, 即为我们计算输运时间的基本方法。

引入时间后, 描述电子运动状态的参数组 Q_n 成为:

$$Q_n = \{S_n, E_n, t_n, \mathbf{u}_n, \mathbf{r}_n\}, \quad n=0, 1, 2, \dots,$$

其中, $\mathbf{u}_n, \mathbf{r}_n$ 分别为电子在第 n 步游动结束时的运动方向与位置矢量。计算第 m 个过程时, 先抽样 Q_0 , 接着进行随机游动, 求得每步游动的 Q_n , 并将该步的沉积能(亦即经歧离修正后的碰撞能量损失) $(\Delta e_{lk})_m$ 于该步所在的第 l 个时间间隔与第 k 个空间区内记分, 至过程结束为止。重复上述计算步骤, 得到足够数量的过程, 即可对问题进行统计求解。于是, 在第 l 个时间间隔和第 k 个空间区内, 时空分辨的沉积能计算值 e_{lk} 及其相对统计误差 s_{lk} 为:

$$e_{lk} = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M (\Delta e_{lk})_m, \quad l, k=1, 2, \dots, \quad (3)$$

$$s_{lk} = \frac{1}{e_{lk}} \left(\frac{\chi_\alpha \sigma_{lk}}{\sqrt{M}} \right), \quad l, k=1, 2, \dots, \quad (4)$$

式中, M 为抽样的历史总数, χ_α 为正态高斯分布积分的积分上限, σ_{lk} 为用蒙特卡罗方法计算 e_{lk} 的标准偏离, $\sigma_{lk}^2 = \frac{1}{M-1} \sum_{m=1}^M ((\Delta e_{lk})_m - e_{lk})^2$ (参见文献 [4])。本工作的计算是在美国王安公司的 VS-80 机上完成的。

三、计算结果与讨论

用上述包含时间的模型与方法, 我们计算了电子束在激光介质中的沉积能时间/空间分布。激光器为一矩形腔, 在 X, Y 和 Z 三个方向上的尺寸为 $20 \times 8 \times 10$ cm, 内充一大气压的氩气, 它经由 $40 \mu\text{m}$ 厚的铝箔窗口与电子枪真空室隔离, 激光室器壁为铁(剖面图见图 1)。自真空室入射到铝箔窗口上的电子束初始参数为: 电子的初始位置 \mathbf{r}_0 为在 $Z=0$ 的箔面上均匀分布, 初始运动方向 \mathbf{u}_0 为垂直于箔面的 $+Z$ 方向(应指出, 计入任何形式的 $\mathbf{r}_0, \mathbf{u}_0$ 分布都能办到, 因当前还缺乏这些分布律的实验数据, 我们暂作如上假定), 初始能量 E_0 和时间 t_0 的分布, 是从图 2(b)、(c) 的电子枪箔前电流 I 、相对于阴极的箔电压 V 的时间曲线算得的, 最大电子能量为 0.3 MeV 。为便于对计算结果进行分析, 我们沿 Z 轴将激光介质等分为 5 个尺寸为 $20 \times 8 \times 2$ cm 的长方体记分区, 记分的时间间隔为: 箔后电流为 $0.05 \mu\text{s/div}$ 。激光介质沉积能为 $0.1 \mu\text{s/div}$ 。应说明,

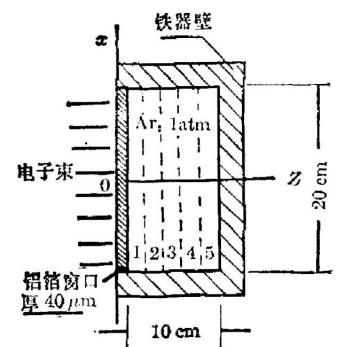


图 1 电子束激光器剖面图
Fig. 1 Cross-section of electron beam laser

空间、时间记分区的大小和数目可按需要选定,对空间区作二维或三维的划分也可以,仅受

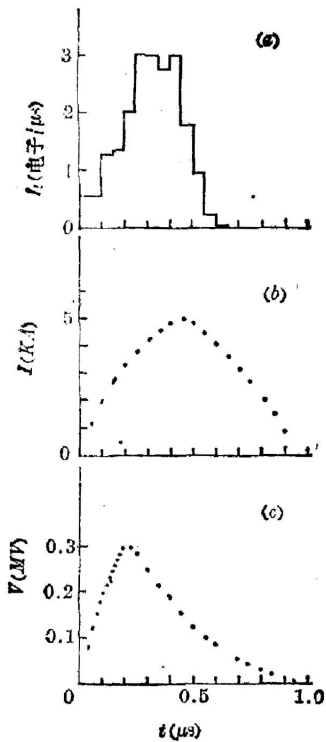


图2 (a)透射电流 I_t ; (b)入射电流 I_i ; (c)箔电压 V
Fig. 2 (a) transmitted current I_t ; (b) incident current I_i ; (c) voltage on window foil V

计算的统计误差的限制。计算能量、程长使用的能量缩减参数,对铝、氩和铁分别为 32、32 和 16。大碰撞能量限取为 $\epsilon_0=0.2$,抽样的过程总数为 $M=3000$ 。

图 2(a)给出透过铝箔窗口的电子束电流 I_t 与时间 t 的关系。 I_t 已用总透射电子数归一化,它在 $t=0.65 \mu s$ 处即截止,从图 2(c)知, $0.65 \mu s$ 时入射电子的能量为 $E_0=0.07 \text{ MeV}$,因它们在铝中的射程为 $40.7 \mu m$,所以,这种截止完全是铝的滞止效应所至。从图 2(a)~(c) 还可看出,与入射电流相较,透射电流不仅脉宽变窄,而且峰值向左移动,更加靠近入射电子能量的峰值,这是由于能量较大的电子,透过率也较高。

沉积能时间分布与空间分布的均匀性,对激光器的效率、输出光束质量有直接影响,为深入探讨计算结果,我们试图引入沉积不均匀度的概念。将沉积能空间(或时间)分布的沉积不均匀度,定义作这种分布对其沉积能平均值的相对均方根偏离,于是,在指定时间间隔 l 内,整个激光介质区的沉积能空间不均匀度 ν_l 为: $\nu_l = \frac{s_l^*}{g_l}$, 这里, s_l^* 为沉积能均方根偏离, $s_l^{*2} = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K (e_{lk} - g_l)^2$, K 为空间区总数; $g_l = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K e_{lk}$ 为第 l 个时间间隔内,沉积能空间分布的平均值。仿此不难写出指定空间区内,整个沉积时间中的沉积能时间不均匀度 τ_k 的公式。

表 1 给出氩激光介质中,沉积能时间/空间分布 e_{lk} 的计算结果及其相对统计误差 s_{lk0} 。 $t > 0.7 \mu s$ 以后,介质中的沉积能为零。表 1 最后一列为各时间间隔内,整个激光介质区的沉积能空间不均匀度 ν_l 。在 $0.1 \sim 0.4 \mu s$ 的三个时间间隔内, ν_l 约为 $10 \sim 20\%$,而另外四个时间间隔的 ν_l 则要大得多。 $0.1 \sim 0.4 \mu s$ 之间的入射电子能量 $E_0 > 0.18 \text{ MeV}$ 。其余时间的 E_0 均较此为小(如图 2(c)所示),所以,低能电子使沉积的空间均匀性下降。

图 3(a)~(e)的直方图分别为激光介质五个空间区内,电子束沉积能随时间的分布。应特别注意,对指定的区, e_{lk} 的计算值是指定时间间隔内沉积能的累加值(见(3)式),所以,图 3 的纵坐标显然是能量沉积速率 $P_k = \frac{e_{lk}}{\Delta T_l}$, (ΔT_l 为第 l 个时间间隔的长度,本计算中均为 $0.1 \mu s/\text{div}$),亦即激光器的激励功率,它对激射过程的阈值条件、增益和效率都有很大影响。以往,只能从入射电子束的电流、电压波形定性推测激励功率,我们得到的数值结果,首次对激励功率进行了时空分辨的定量描述。从该图可知,每一空间区的沉积能时间分布,在形状和数值上都不同,我们用指定空间区内沉积能的时间不均匀度 τ_k 来描述这种差异,其计算值见表 2。可以看出,在整个空间范围内, τ_k 随电子穿透深度的增加而增大,这是入射电流的时间不均匀性造成的。

表 1 时间/空间沉积能 e_{ik} 及其相对统计误差 ε_{ik} , 各时间间隔内沉积能的空间不均匀度 μ_i
 Table 1 Time/space distribution of energy deposition, e_{ik} , its relative statistical error, ε_{ik} ,
 and spatial nonuniformity of energy deposition in every time interval, μ_i

时间间隔		空间区		沉积能 e_{ik} MeV/电子	e_{ik} 的相对统计误差 %	沉积能空间不均匀度 %
l	μs	k	cm			
1	0~0.1	1	0~2	3.92309×10^{-4}	9.088	102.690
		2	2~4	1.57458×10^{-4}	16.573	
		3	4~6	5.87310×10^{-5}	23.624	
		4	6~8	3.11953×10^{-5}	50.152	
		5	8~10	2.94612×10^{-5}	94.258	
2	0.1~0.2	1	0~2	8.71152×10^{-4}	7.911	15.833
		2	2~4	7.48223×10^{-4}	8.786	
		3	4~6	5.99576×10^{-4}	10.408	
		4	6~8	5.71458×10^{-4}	9.265	
		5	8~10	6.56360×10^{-4}	9.053	
3	0.2~0.3	1	0~2	1.22463×10^{-3}	7.206	10.292
		2	2~4	1.21695×10^{-3}	6.800	
		3	4~6	1.11187×10^{-3}	7.580	
		4	6~8	9.17020×10^{-4}	7.864	
		5	8~10	1.05536×10^{-3}	7.034	
4	0.3~0.4	1	0~2	1.60882×10^{-3}	4.943	18.839
		2	2~4	1.37111×10^{-3}	4.382	
		3	4~6	1.33715×10^{-3}	3.920	
		4	6~8	9.90543×10^{-4}	6.072	
		5	8~10	9.96384×10^{-4}	6.616	
5	0.4~0.5	1	0~2	2.49115×10^{-3}	0.983	66.223
		2	2~4	1.34785×10^{-3}	3.812	
		3	4~6	9.82008×10^{-4}	4.822	
		4	6~8	5.25895×10^{-4}	6.212	
		5	8~10	3.68693×10^{-4}	7.758	
6	0.5~0.6	1	0~2	1.13626×10^{-3}	1.746	90.032
		2	2~4	5.22220×10^{-4}	3.971	
		3	4~6	2.53632×10^{-4}	6.563	
		4	6~8	1.48683×10^{-4}	8.243	
		5	8~10	7.44794×10^{-5}	11.707	
7	0.6~0.7	1	0~2	1.49131×10^{-4}	0.746	128.603
		2	2~4	2.90743×10^{-5}	14.800	
		3	4~6	2.50935×10^{-5}	17.783	
		4	6~8	5.10633×10^{-6}	34.851	
		5	8~10	3.12650×10^{-6}	48.193	

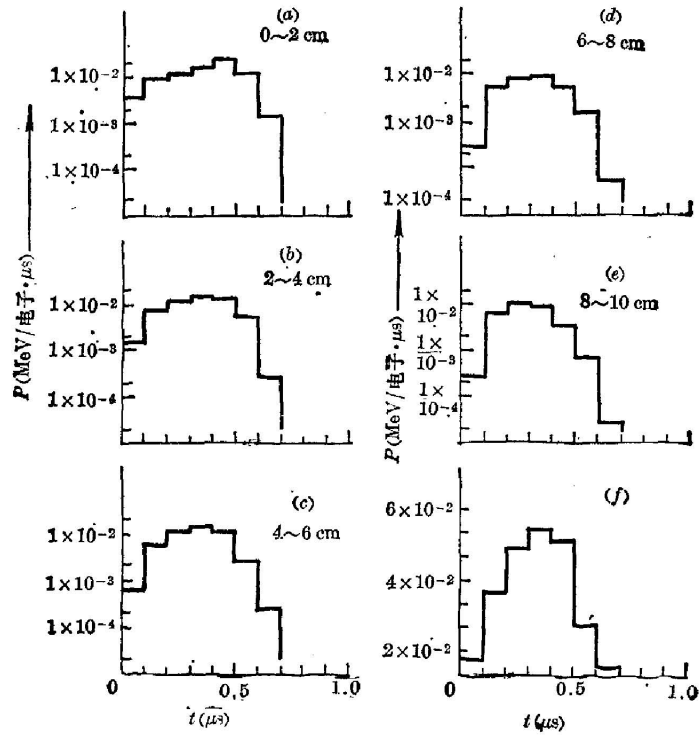


图 3 能量沉积速率与时间的关系

(a)~(e)—五个空间分区; (f)—整个空间区

Fig. 3 Time dependence of energy deposition rate

(a)~(e)—for five subregion; (f)—for total region of laser cavity

表 2 各空间区中沉积能的时间不均匀度 μ_k

Table 2 Time nonuniformity of energy deposition in every subregion of laser cavity

空 间 区		沉积能时间不均匀度 %
k	cm	
1	0~2	64.323
2	2~4	67.287
3	4~6	78.759
4	6~8	82.721
5	8~10	92.221

在每一时间间隔内将 e_{ik} 对五个空间区进行累加, 又可得到各时间间隔内激光介质中的总沉积能 $e_i = \sum_{k=1}^5 e_{ik}$, 其时间分布的直方图见图 3(f) (纵座标为总激励功率 P_i)。 e_i 的分布形状与图 2(a) 的电子束透射电流波形 I_i 相似, 但半峰宽较 I_i 展宽约 $0.1 \mu s$ 。

计算(4)式的相对统计误差 ε_{ik} 时, 取 $\chi_\alpha = 2$, 置信水平^[4]为 0.95。 ε_{ik} 除 $0 \sim 0.1 \mu s$ 和 $0.6 \sim 0.7 \mu s$ 两个时间间隔内高于 10% 以外, 其余五个时间间隔内均为百分之几。上述两个时间间隔内的 ε_{ik} 较大, 是由于透射电子数目较少而引起的, 若采用方差缩减技术, 可望使之显著下降。

四、结 束 语

我们将时间引入电子输运计算,得到氩激光介质中电子束沉积能的时间/空间分布。方法的主要特点是,对电子束激光器的激励功率,可给出时空分辨的定量描述。当前,激光动力学与含增益介质光腔的数值计算日趋成熟,将我们的计算方法与之结合起来,可望能从电子枪箔窗口前的一组电子束电流、电压波形数据,直接算得激光器输出光束的时间/空间特性。最后应指出,我们的计算方法也适用于非矩形腔的激光器几何形状和激光器材料为混合物或化合物的情况。

本工作是在张存浩同志和沙国河同志的指导下完成的。

参 考 文 献

- [1] 汪汝清;《电子学报》,1983, 11, No. 6 (Nov-Dec), 63.
- [2] M. J. Berger; 《Method in Computational Physics》, (Ed. B. Alder et al.; Academic Press, New York, 1963), p. 135.
- [3] H. W. Koch and J. W. Motz; *Rev. Mod. Phys.*, 1959, 31, No. 4 (Oct), 920.
- [4] 裴鹿成, 张孝泽;《蒙特卡罗方法及其在粒子输运问题中的应用》, (科学出版社, 北京, 1980), p. 9.

Monte Carlo calculation of time/space distribution of energy deposition in electron-beam-pumped laser

WANG RUQING

(Dalian Institute of Chemical Physics, Academia Sinica)

(Received 21 May 1984; revised 25 September 1984)

Abstract

Time-dependent Monte Carlo method of the electron transport is presented and has been applied to the calculation of the electron-beam energy deposition in Argon in the laser. Spatial distribution of the energy deposition, which is dependent on the time, has been obtained.