

**SIMULACIÓN DE LA FORMACIÓN DE UN HAZ IÓNICO
MEDIANTE EXTRACCIÓN A PARTIR DE UN PLASMA
MAGNÉTICAMENTE CONFINADO**

JOSÉ AMILCAR RIZZO SIERRA

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
MAESTRIA EN FISICA
2008**

**SIMULACIÓN DE LA FORMACIÓN DE UN HAZ IÓNICO
MEDIANTE EXTRACCIÓN A PARTIR DE UN PLASMA
MAGNÉTICAMENTE CONFINADO**

JOSÉ AMILCAR RIZZO SIERRA

**Trabajo de Grado presentado como requisito para optar al título de:
Magíster en Física**

Director

VALERIY DUGAR - ZHABON, Ph. D.

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
MAESTRIA EN FISICA
2008**

CONTENIDO

	pág.
INTRODUCCIÓN	11
1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	13
2. OBJETIVOS	15
2.1 OBJETIVO GENERAL	15
2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	15
3. METODOLOGÍA	16
4. ANOTACIONES ACERCA DE LA DINÁMICA DE UN HAZ IÓNICO	17
4.1 DINÁMICA DE UNA PARTÍCULA CARGADA BAJO LA ACCIÓN DE CAMPOS ELÉCTRICOS Y MAGNÉTICOS UNIFORMES Y ESTÁTICOS	19
4.1.1 Campo eléctrico nulo, campo magnético no-nulo, uniforme y estático	21
4.1.2 Campo eléctrico perpendicular al campo magnético, ambos uniformes y estáticos	23
4.2 DINÁMICA DE UNA PARTÍCULA CARGADA BAJO LA ACCIÓN DE UN CAMPO MAGNÉTICO NO UNIFORME	25
4.2.1 Campo magnético con gradiente transversal ($\nabla B \perp \vec{B}$)	26
4.2.2 Campo magnético con gradiente en la magnitud del campo magnético (transversal) y gradiente en la curvatura del campo magnético	28
4.2.3 Campo magnético con gradiente longitudinal	31
5. ESQUEMA GENERAL DE LA SIMULACIÓN DE UN SISTEMA DE EXTRACCIÓN DE IONES A PARTIR DE UN PLASMA MAGNÉTICAMENTE CONFINADO	34
5.1 DISCRETIZACIÓN DE LAS ECUACIONES DE NEWTON-LORENTZ MEDIANTE EL MÉTODO DE LEAP-FROG	38

5.2 RESOLUCIÓN (INTEGRACIÓN) DE LAS ECUACIONES DE NEWTON-LORENTZ MEDIANTE EL USO DE LA TÉCNICA DE INTEGRACIÓN DE BORIS	40
5.3 PONDERADO DEL CAMPO ELÉCTRICO Y MAGNÉTICO AUTOCONJUGADOS PARA CADA CICLO COMPUTACIONAL	43
6. CAMPO ELÉCTRICO EXTERNO	48
6.1 DEFINICIÓN DE LA MALLA Y CONDICIONES DE FRONTERA	50
6.1.1 Descripción de la malla a emplear	50
6.1.2 Condiciones de frontera	52
6.2 MODIFICACIÓN DE LA ECUACIÓN DE LAPLACE PARA EVITAR LA SINGULARIDAD EN $\rho = 0$	52
6.3 ALGORITMO PARA RESOLVER LA ECUACIÓN DE LAPLACE	54
7. CAMPO ELÉCTRICO AUTOCONJUGADO	56
7.1 MÉTODO PARTÍCULA EN MALLA (PM) Y PARTÍCULA EN CELDA (PIC) PARA MODELAR UN SISTEMA DE MUCHAS PARTÍCULAS Y ENCONTRAR UN ESTIMATIVO DE LA DENSIDAD VOLUMÉTRICA DE CARGA	57
7.1.1 Método “partícula en malla” - PM	58
7.1.2 Método “partícula en celda”- PIC	58
7.2 CÁLCULO DEL CAMPO ELÉCTRICO AUTOCONJUGADO. UTILIZACIÓN DE UN ALGORITMO/CÓDIGO DESARROLLADO PREVIAMENTE EN FORTRAN	62
7.2.1 Condiciones de frontera	63
7.2.2 Cálculo del campo eléctrico autoconjugado a partir del gradiente del potencial autoconjugado	63
8. CAMPO MAGNÉTICO AUTOCONJUGADO	64
9. RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN	66
9.1 CONFIGURACIÓN I	70
9.2 CONFIGURACIÓN II	74

9.3 CONFIGURACIÓN III	79
9.4 CONFIGURACIÓN IV	83
10. OBSERVACIONES Y CONCLUSIONES	88
10.1 OBSERVACIONES	89
10.2 CONCLUSIONES	90
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	92

LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Esquema de campos.	20
Figura 2. Movimiento de una partícula cargada bajo la acción de un campo magnético constante	22
Figura 3. Movimiento de iones bajo el efecto de campos eléctricos y magnéticos uniformes y estáticos y perpendiculares entre sí	24
Figura 4. Esquema de campo magnético con gradiente transversal	26
Figura 5. Movimiento de partículas cargadas bajo la influencia de un campo magnético con gradiente transversal	28
Figura 6. Líneas de campo magnético curvas	29
Figura 7. Representación de un gradiente de campo magnético longitudinal	31
Figura 8. Esquema del ciclo computacional elemental planteado	37
Figura 9. Esquema de discretización temporal "Leap-Frog"	40
Figura 10. Celda elemental malla de macropartículas. División del volumen en octantes para ponderado del campo eléctrico total y el campo magnético autoconjugado	45
Figura 11. Esquema general del sistema de extracción	48
Figura 12. Malla elemental típica para coordenadas cilíndricas Aproximación de segundo orden	49
Figura 13. Malla para un sistema axialmente simétrico	53
Figura 14. Celda elemental malla de macropartículas. División del volumen en octantes para ponderado de la carga	59

RESUMEN

TÍTULO:

SIMULACIÓN DE LA FORMACIÓN DE UN HAZ IÓNICO MEDIANTE EXTRACCIÓN A PARTIR DE UN PLASMA MAGNÉTICAMENTE CONFINADO**.

AUTOR:

RIZZO SIERRA, JOSÉ AMILCAR**

PALABRAS CLAVES:

Plasma, sistema de extracción, haz de iones, ecuación de Laplace, ecuación de Poisson, método partícula en malla (PM), método partícula en celda (PC), transformada rápida de Fourier (TRF), esquema de aproximación de orden superior con identidad de expansión (EAOSIE), esquema de integración de Boris, trayectorias iónicas.

DESCRIPCIÓN

Se simula la formación de un haz iónico extraído a partir de un plasma de resonancia ciclotrónica-electrónica (RCE) en confinación magnética. La primera etapa del trabajo consiste en calcular el campo electrostático formado por un sistema de extracción compuesto por tres electrodos con simetría cilíndrica hueca y su respectiva cavidad apantalladora. Para ello se desarrolla un algoritmo en diferencias finitas que resuelve la ecuación de Laplace en el volumen de propagación de los iones extraídos y permite estudiar la dependencia de la geometría del campo electrostático en relación con la configuración del sistema de extracción. La segunda etapa consiste en calcular los campos eléctrico y magnético producidos por los propios iones extraídos mediante la solución de la ecuación de Poisson utilizando la técnica de la transformada rápida de Fourier (TRF), teniendo como base un esquema de aproximación de orden superior con identidad de expansión (EAOSIE). Finalmente, se desarrolla un algoritmo basado en el esquema de Boris para calcular las trayectorias de las partículas cargadas con el objeto de simular el movimiento de un haz de iones en el campo formado por los electrodos y por el propio haz. Basándose en los resultados obtenidos, se inicia la búsqueda de un sistema optimizado de extracción de iones a partir de una fuente de iones RCE de 14 GHz. Configuraciones preliminares del sistema de extracción son obtenidas y mostradas.

* Tesis de grado.

** Facultad de Ciencias, Escuela de Física. Director: Valeriy Dugar - Zhabon, Ph. D

SUMMARY

TITLE:

SIMULATION OF THE FORMATION OF AN ION BEAM EXTRACTED FROM A MAGNETICALLY CONFINED PLASMA*.

AUTHOR:

RIZZO SIERRA, José Amilcar**.

KEY WORDS:

Plasma, extraction system, ion beam, Laplace equation, Poisson equation, particle in mesh method (PIM), particle in cell method (PIC), fast Fourier transform (FFT), high order difference approximation with identity expansion scheme (HODIE), Boris integration scheme, ion trajectories.

ABSTRACT:

A computational simulation of the formation of an ion beam extracted from a magnetically confined ECR plasma is made. First simulation stage consists in calculating of the electrostatic field which is produced by an extraction system. The extraction system is composed of three cylindrically hollow symmetrical electrodes and its respective shielding box. For the purpose of calculating the extraction and focalization electrostatic field, a finite differences algorithm that solves Laplace equation within the ion propagation volume and allows studying the dependency of the electrostatic field on the geometrical configuration of the extraction system is developed. Second stage consists in calculating the electric and magnetic fields due to extracted ions themselves by solving Poisson equation using the fast Fourier transform (FFT) technique based on a high order difference approximation with identity expansion (HODIE) scheme. Finally, an algorithm based on Boris integration scheme to calculate ion trajectories with the objective of simulating the movement on an ion beam due to the field generated by electrodes and beam itself is developed. Based upon results obtained, the search for an optimized ion extraction system from a 14 GHz ECR ion source is begun. Preliminary configurations are obtained and shown.

* Graduate (M. Sc.) thesis project

** Facultad de Ciencias, Escuela de Física. Director: Valeriy Dugar - Zhabon, Ph. D.

INTRODUCCIÓN

El estudio de la formación de haces iónicos a partir de fuentes de iones se encuentra plenamente justificado por múltiples motivos tanto teóricos como experimentales. Los primeros incluyen la comprensión de fenómenos de interacción entre haces iónicos y medios ambientes gaseosos (neutros) y/o de otras clases, el análisis de la “óptica” de sistemas de extracción de haces de iones, el estudio de sistemas de transporte estables para haces iónicos multicargados, etc. En tanto a los segundos, los campos de aplicación de las fuentes iónicas son también muy heterogéneos. Entre ellos se cuentan la física y astrofísica nuclear [1], la física de partículas [2], la separación isotópica [3], la propulsión espacial electrostática [4], la ciencia de nuevos materiales [5], etc.

Análogamente a otras ramas de la física, el estudio puramente analítico de un problema como el de la formación de un haz iónico multicargado extraído a partir de una fuente de iones representa grandes dificultades desde el punto de vista estrictamente teórico. En consecuencia, un enfoque computacional del problema puede resultar útil en la obtención de resultados que permitan cuando menos, en relación con este trabajo de grado en particular, desarrollar en un futuro una guía básica para el diseño de fuentes de iones por extracción a partir de plasmas confinados magnéticamente. Por otra parte, es bien sabido que los enfoques computacionales son ampliamente aceptados y validados en el seno de la investigación contemporánea tanto en física del plasma [6] como en otras ramas de la física.

En efecto, una de las líneas de investigación adscritas al Laboratorio de Física del Plasma (Escuela de Física, UIS) la constituye precisamente el estudio computacional de fuentes de iones modernas. Generalmente éstas fuentes se basan en la implementación del fenómeno de resonancia ciclotrónica electrónica (RCE) en trampas de confinamiento magnético, entre las que se encuentran las de

tipo mínimo- B [7], [8]. En estrecha relación con la presente propuesta de trabajo de investigación, y ambas bajo la dirección del Dr. Valeriy Dugar - Zhabon (director del Laboratorio de Física del Plasma UIS), se encuentra en adelanto otra propuesta de trabajo de investigación relacionada con el estudio de un nuevo tipo de trampa de confinamiento magnetostático, la denominada trampa magnética cero- B [9]. Dado que una fuente de iones por extracción a partir de un plasma se compone de un mecanismo de confinamiento y de un sistema de extracción, aparece entonces la necesidad de ocuparse del estudio de ambos elementos. El otro trabajo mencionado se dedica al estudio del mecanismo de confinamiento, mientras que el presente se dedica al mecanismo de extracción necesario para la formación del haz iónico multicargado.

Puede anotarse entonces que el presente trabajo forma parte de una articulada propuesta global perteneciente a una de las líneas de investigación adscrita al Laboratorio de Física del Plasma (UIS), consistente en iniciar el estudio computacional de un nuevo tipo de fuente de iones por extracción a partir de un plasma confinado magnéticamente (trampa cero- B). El trabajo global pretenderá entonces, entre otras cosas, obtener resultados que permitan establecer comparaciones con estudios experimentales y tener guías de diseño en relación con el desarrollo de dichos tipos de fuentes.

1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

En paralelo con la creciente aplicabilidad de los haces iónicos en diferentes ramas de la física, ha emergido la necesidad de una mejor comprensión de los factores que determinan sus calidades “ópticas” considerando su formación por extracción a partir de un plasma confinado. Siendo éste un problema tan complejo, los enfoques computacionales han desempeñado y seguirán desempeñando un importante papel en su abordaje [10], [11]. Se propone en este trabajo de grado efectuar un estudio por simulación de la formación de un haz iónico multicargado por extracción a partir de un plasma (RCE) magnéticamente confinado.

Este estudio consistió en tres etapas principales de trabajo:

- La primera etapa del trabajo consistió en simular el campo eléctrico generado por un sistema de extracción de partículas cargadas que consta de tres electrodos con simetría cilíndrica hueca. Para lograrlo, básicamente se requirió implementar un algoritmo que resolviera la ecuación de Laplace en el área de propagación de los iones extraídos mientras en simultáneo se estudió la dependencia de la geometría del campo electrostático en relación con la configuración del sistema de extracción. El algoritmo computacional desarrollado está adaptado a la configuración geométrica estudiada y modela la ecuación de Laplace en la región de interés. A este respecto se implementó de un esquema de diferencias finitas en código FORTRAN, estrategia de utilidad previamente comprobada a causa de la afinidad computacional y robustez del método matemático subyacente a los esquemas basados en diferencias finitas [12].
- La segunda etapa del trabajo consistió en simular el campo eléctrico y magnético producido por las propias partículas cargadas extraídas. Para

lograrlo esencialmente se requirió implementar un algoritmo que resolviera la ecuación de Poisson en el área de propagación de los iones extraídos. En relación con ello se planteó emplear el método de la partícula en malla (PM)/partícula en celda (PIC) complementado con la técnica de transformada rápida de Fourier (TRF), estrategia popular también en varias ramas de la física computacional en donde emerge la necesidad de resolver la ecuación de Poisson en diferentes contextos, i. e., física de partículas [13], astrofísica [14], etc.

- La tercera y final etapa consistió en implementar un algoritmo para el modelamiento del movimiento de un haz de iones en los campos eléctrico y magnético originados por los electrodos así como por el propio haz (autoconjugados) basado en la solución de la ecuación de Newton-Lorentz empleando el método leap-frog para considerar la evolución en el tiempo de la solución y el esquema de Boris para la integración. Basándose en los resultados obtenidos, se propone entonces encontrar un sistema optimizado de extracción de iones a partir de una fuente de iones RCE de 14 GHz.

2. OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GENERAL

Simular computacionalmente la formación de un haz de iones extraído a partir de un plasma de resonancia ciclotrónica-electrónica (RCE) en confinación magnética.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Estudiar las propiedades “ópticas” del sistema mediante la obtención de la trayectoria de una “partícula de borde” o de frontera.
- Encontrar la configuración geométrica de electrodos (electrónica) óptima del sistema de extracción con el fin de garantizar:
 - o La extracción de iones multicargados a partir del plasma confinado.
 - o La formación efectiva de un haz iónico multicargado.

3. METODOLOGÍA

- Definir y normalizar las variables de trabajo.
- Implementar un esquema computacional de diferencias finitas en relación con la ecuación de Laplace en el área de propagación de los iones extraídos.
- Implementar un esquema computacional de transformada rápida de Fourier en relación con la ecuación de Poisson en el área de propagación de los iones extraídos.
- Implementar un esquema computacional de diferencias finitas mediante el método de leap-frog que proporcione un modelo del movimiento de un haz de iones (la ecuación de Newton-Lorentz) en el campo generado por los electrodos y el propio haz (campo autogenerado).
- Desarrollar los algoritmos y traducirlos en código para FORTRAN 90 preferiblemente.
- Generar resultados.
- Optimizar la geometría del sistema de extracción.
- Precisar observaciones y conclusiones.

4. ANOTACIONES ACERCA DE LA DINÁMICA DE UN HAZ IÓNICO

Una de las razones por las que resulta difícil estudiar un sistema físico como un haz de iones consiste en que se trata de un sistema de muchas partículas. A este respecto, para un sistema de alta densidad ($n \gg 10^{12} \frac{\text{iones}}{\text{cm}^3}$) la descripción física no encuentra mucha practicidad en considerar el movimiento de partículas individuales, y debido a ello, en tales circunstancias las descripciones en términos de fluidos son favorecidas. Sin embargo, éste claramente no es el caso del sistema que se trata aquí. Para este trabajo, el valor de densidad referido es una cota muy superior, de modo que es posible considerar que la frecuencia de colisiones es lo suficientemente baja para que una descripción en términos de trayectorias de partículas (iones) individuales tenga representatividad. Por otra parte, se trata de una cota superior porque la región ocupada por el sistema de extracción no tiene carga alguna al comienzo de la simulación, esto es, el haz va ocupando el volumen del sistema de extracción a medida que transcurre el tiempo. En consecuencia, el estudio del haz en términos de la teoría de órbitas se ve plenamente justificado. Ejemplos de contextos en los que esta perspectiva es útil se encuentran en [15], referente al calentamiento de plasmas y [16], referente a temas relevantes en el desarrollo de TOKAMAKS.

Las presentes anotaciones acerca de la dinámica de una partícula cargada en un haz iónico competen entonces a un haz de baja densidad y campos eléctricos y magnéticos fijos (en nuestro caso, fijo sólo existe el primero). Por otra parte, no se considera interacción de tipo colisional entre las partículas (aproximación haz acolisional). Otra cuestión de importante anotación es que la dinámica de un ión es equivalente a la dinámica de la macropartícula que lo representa. Para verlo claramente, debe considerarse que la descripción del comportamiento de los iones presentes en el haz implica la resolución de la ecuación de Newton-Lorentz

debidamente expresada bajo la perspectiva relativista debido a las grandes velocidades que adquieren los mismos. Para el tipo de iones con los que estamos trabajando (protones), se tienen ecuaciones de Newton-Lorentz de la forma:

$$\sum_{\text{Ión.}} \vec{F} = \frac{d \vec{p}}{dt} = \frac{d}{dt} \left(m \vec{v} \right) \Rightarrow \sum_{\text{Ión.}} \vec{F} = \frac{d}{dt} \left(m \gamma \vec{v} \right) \Rightarrow \frac{d}{dt} \left(\gamma \vec{v} \right) = \frac{q}{m} \left\{ \left(\vec{E}_{\text{Ext.}} + \vec{E}_{\text{Aut.}} \right) + \frac{\vec{v} \times \vec{B}}{c} \right\} \Rightarrow$$

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\vec{u}}{m} \right) = \frac{q}{m} \left\{ \left(\vec{E}_{\text{Ext.}} + \vec{E}_{\text{Aut.}} \right) + \frac{\vec{u} \times \vec{B}}{c \gamma} \right\} \quad (4.1)$$

Donde $\sum_{\text{Ión.}} \vec{F}$ es la sumatoria de fuerzas que actúa sobre el ión, \vec{p} es la cantidad de movimiento del ión, \vec{v} es la velocidad del ión, q es la carga del ión, m es la masa del ión (en reposo), $\vec{E}_{\text{Ext.}}$ es el campo eléctrico externo con el que interactúa el ión, $\vec{E}_{\text{Aut.}}$ es el campo eléctrico autoconjugado con el que también interactúa el ión, \vec{u} es la cantidad de movimiento relativista del ión dividida entre la masa en reposo del ión (i. e., $\vec{u} = \gamma \vec{v}$), c es la velocidad de la luz, γ es el factor relativista, $\vec{B}_{\text{Aut.}}$ es el campo magnético autoconjugado con el que también interactúa el ión.

En términos de macropartículas -Mp.- la ecuación (4.1) resulta transformada en:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\vec{u}}{M_p} \right) = \frac{N q}{N m} \left\{ \left(\vec{E}_{\text{Ext.}} + \vec{E}_{\text{Aut.}} \right) + \frac{\vec{u} \times \vec{B}}{c \gamma} \right\} \quad (4.2)$$

Siendo N es el número de partículas (iones) representado por cada macropartícula, es claro que las ecuaciones (4.1) y (4.2) son equivalentes. Esto es, el movimiento de una macropartícula es el mismo movimiento de las partículas que representa.

Teniendo la ecuación dinámica que deben obedecer las macropartículas de la simulación planteada en este trabajo, se estudiarán brevemente algunas de sus posibilidades a título informativo. Debe aclararse que en el problema que nos ocupa, a excepción del campo eléctrico externo (que es sin embargo el más importante desde el punto de vista de un sistema de extracción) los campos que interaccionan con los iones no son uniformes ni en el tiempo ni en el espacio. Sin embargo, la discusión de algunos casos elementales puede sernos útil para desarrollar comprensión en relación con el que nos ocupa.

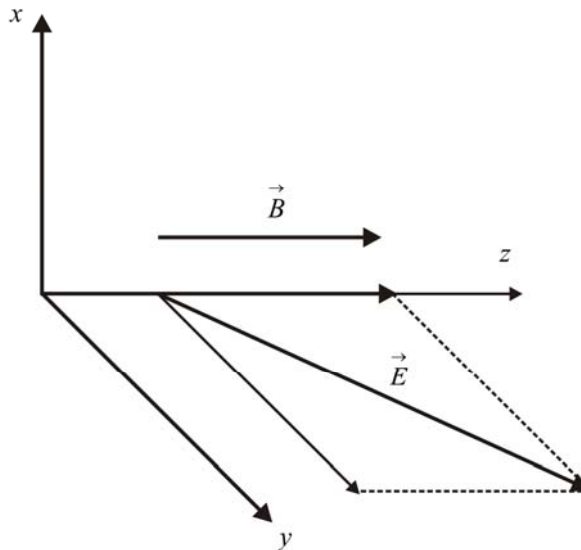
4.1 DINÁMICA DE UNA PARTÍCULA CARGADA BAJO LA ACCIÓN DE CAMPOS ELÉCTRICOS Y MAGNÉTICOS UNIFORMES Y ESTÁTICOS

Una partícula cargada interactuando con campos eléctricos uniformes y estáticos tiene la siguiente ecuación de movimiento (ecuación de Newton-Lorentz):

$$\frac{d}{dt} \left(m \vec{v} \right) = q \left(\vec{E} + \frac{\vec{v} \times \vec{B}}{c} \right) \quad (4.3)$$

Donde \vec{v} es la velocidad de la partícula, m y q su masa y carga respectivamente, c la velocidad de la luz, \vec{E} y \vec{B} los campos eléctrico y magnético respectivamente. Ahora bien, supóngase que la orientación de las cantidades vectoriales es la que se muestra en la Figura 1.

Figura 1. Esquema de campos.



Fuente. El autor

En consecuencia, las componentes de la ecuación (4.3) son las siguientes [17]:

$$\begin{aligned} \frac{dv_x}{dt} &= \frac{qB}{mc} v_y \\ \frac{dv_y}{dt} &= \frac{q}{m} E_y - \frac{qB}{mc} v_x \\ \frac{dv_z}{dt} &= \frac{q}{m} E_z \end{aligned} \quad (4.4)$$

La solución del sistema es:

$$\begin{aligned} v_x &= v_{0x} \sin(\omega_c t) + \left[v_{0x} - \frac{qE_y}{m\omega_c} \right] \cos(\omega_c t) + \frac{qE_y}{m\omega_c} \\ v_y &= v_{0y} \cos(\omega_c t) - \left[v_{0x} - \frac{qE_y}{m\omega_c} \right] \sin(\omega_c t) \\ v_z &= v_{0z} + \frac{qE_z}{m} t \end{aligned} \quad (4.5)$$

Donde (v_{0x}, v_{0y}, v_{0z}) , son las componentes de la velocidad inicial de la partícula cargada, y ω_c representa la frecuencia ciclotrónica de rotación de la partícula

cargada en relación con las líneas del campo magnético; recordando que $\omega_c = \frac{qB}{mc}$ [18]. Al integrar dos veces las ecuaciones (4.5), pueden obtenerse las componentes de la trayectoria de la partícula:

$$\begin{aligned}
 x &= x_0 - \frac{1}{\omega_c} \left\{ v_{0y} [\cos(\omega_c t) - 1] - \left[v_{0x} - \frac{qE_y}{m\omega_c} \right] \sin(\omega_c t) - \frac{qE_y}{m} t \right\} \\
 y &= y_0 - \frac{1}{\omega_c} \left\{ \left[v_{0x} - \frac{qE_y}{m\omega_c} \right] [1 - \cos(\omega_c t)] - v_{0y} \sin(\omega_c t) \right\} \quad (4.6) \\
 z &= z_0 + v_{0z} t + \frac{qE_z}{2m} t^2
 \end{aligned}$$

4.1.1 Campo eléctrico nulo, campo magnético no-nulo, uniforme y estático.

Considérese en primer lugar el caso de un campo magnético constante a lo largo del eje z y un campo eléctrico nulo, con las siguientes condiciones iniciales para la partícula cargada:

$$\vec{v}_0 = (0, v_{0y}, v_{0z}), \quad \vec{r}_0 = \left(\frac{v_{0y}}{\omega_c}, 0, 0 \right) \quad (4.7a)$$

Al reemplazar en las ecuaciones (4.6), se obtiene:

$$\begin{aligned}
 x &= -\frac{v_{0y}}{\omega_c} \cos(\omega_c t) \\
 y &= \frac{v_{0y}}{\omega_c} \sin(\omega_c t) \quad (4.7b) \\
 z &= v_{0z} t \\
 r &= \left| \frac{v_{0y}}{\omega_c} \right| = \left| \frac{mc v_{0y}}{qB} \right|
 \end{aligned}$$

Las ecuaciones (4.7) describen la trayectoria que describe una partícula cargada que se mueve bajo la acción de un campo magnético uniforme. La trayectoria es una órbita circular en el plano $x-y$ con radio de giro dado por la última de ellas.

Ahora bien, al derivar las ecuaciones (4.7b), reemplazando $\omega_c = \frac{eB}{m_p c}$ (para un protón) pueden obtenerse las componentes de la velocidad de la partícula cargada:

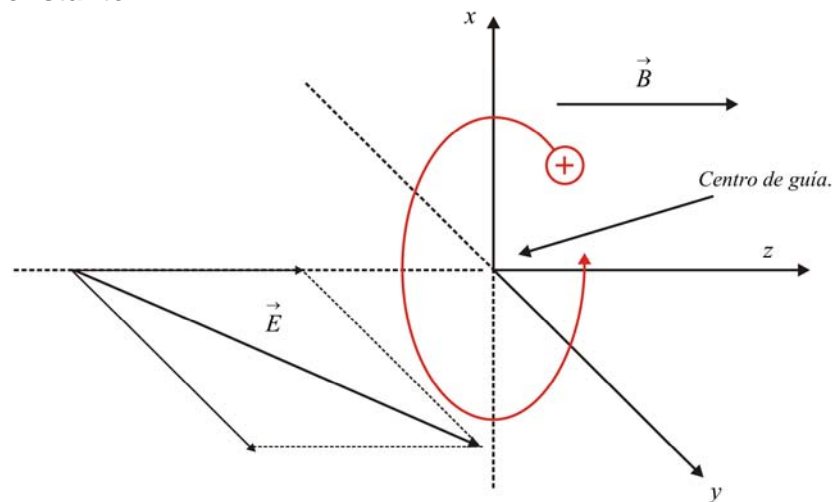
$$v_x = v_{0y} \sin\left(\frac{eB}{m_p c} t\right)$$

$$v_y = v_{0y} \cos\left(\frac{eB}{m_p c} t\right) \quad (4.8)$$

$$v_z = v_{0z}$$

Las ecuaciones (4.8) dan la información adicional de que la partícula cargada (protón) orbita en sentido horario en el plano $x - y$. Además, el “centro de guía” de la partícula se mueve a lo largo de la línea del campo magnético, eje z positivo con velocidad $v_z = v_{0z}$. Debe notarse que el sentido de la rotación de la partícula cargada es siempre tal que el campo magnético generado por ella es opuesto al externo. Véase la Figura 2. La partícula cargada describe entonces, en 3-D, una trayectoria helicoidal.

Figura 2. Movimiento de una partícula cargada bajo la acción de un campo magnético constante



Fuente. El autor

Es claro que la partícula cargada moviéndose en una trayectoria helicoidal debe presentar un balance entre la fuerza centrífuga y la fuerza de Newton-Lorentz. Este requerimiento puede escribirse de la siguiente manera:

$$\vec{F}_{Cent.} = \frac{q}{c} \vec{v} \times \vec{B} \Rightarrow \frac{mv_{\perp}^2}{r_L} = \frac{q}{c} v_{\perp} B = mr_L \omega_c^2 \quad (4.9)$$

La ecuación anterior muestra que el ión describe un movimiento circular uniforme con velocidad transversal a la dirección del campo magnético (v_{\perp}) a la frecuencia ciclotrónica (ω_c) con un radio denominado ([17]) radio de Larmor (r_L). Así:

$$v_{\perp} = r_L \omega_c \Rightarrow r_L \equiv \frac{|v_{\perp}|}{\omega_c} = \frac{mc|v_{\perp}|}{|q|B} \quad (4.10)$$

Puede apreciarse entonces que el radio de Larmor es directamente proporcional a la masa de la partícula cargada y a su velocidad transversal, mientras que es inversamente proporcional a su carga y a la magnitud del campo magnético. En general, para un plasma compuesto de iones con carga $+e$ y electrones con carga $-e$ se cumple que:

$$r_{L-ion} > r_{L-elect.} \text{ y } \omega_{c-ion} < \omega_{c-elect.} \quad (4.11)$$

4.1.2 Campo eléctrico perpendicular al campo magnético, ambos uniformes y estáticos. Considérese el siguiente conjunto de condiciones iniciales para campos eléctrico y magnético uniformes y estáticos perpendiculares entre sí.

$$\begin{aligned} \vec{E} &= (0, E_y, 0) \\ \vec{B} &= (0, 0, B_z) \\ \vec{v}_0 &= (0, 0, 0) \\ \vec{r}_0 &= \left(0, -\frac{qE_y}{m\omega_c^2}, 0 \right) \end{aligned} \quad (4.12)$$

Para este caso, las ecuaciones (4.6) se reducen a:

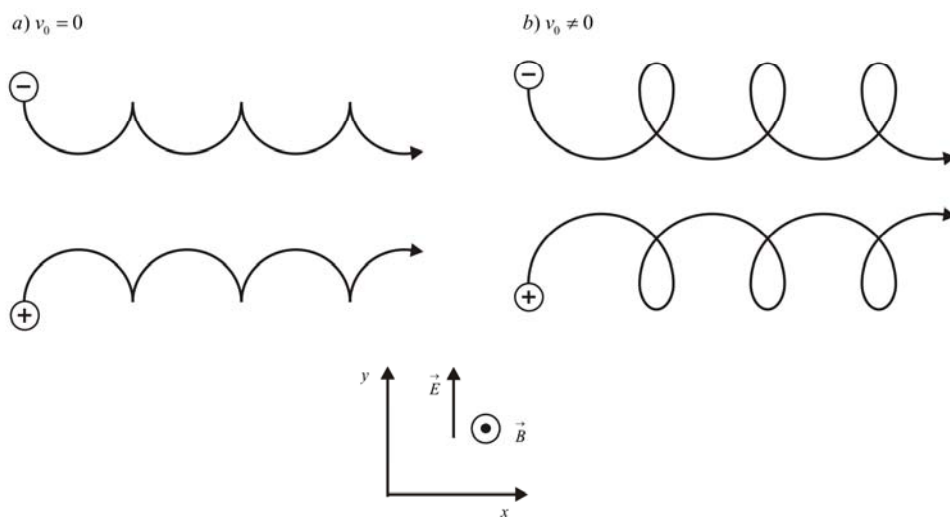
$$\begin{aligned}
 x &= -\frac{qE_y}{m\omega_c^2} \sin(\omega_c t) + \frac{qE_y}{m\omega_c} t \\
 y &= -\frac{qE_y}{m\omega_c^2} \cos(\omega_c t) \\
 z &= 0
 \end{aligned}
 \tag{4.13}$$

Las ecuaciones (4.13) describen un movimiento circular a la frecuencia ciclotrónica enteramente en el plano $x-y$. Éste movimiento circular está acompañado por una velocidad de deriva en la dirección perpendicular tanto al campo eléctrico como al campo magnético (la dirección a lo largo del eje x). Derivando, se obtiene la velocidad de deriva:

$$v_{Der.x} = \frac{qE_y}{m\omega_c} = \frac{cE_y}{B_z}
 \tag{4.14}$$

Es posible apreciar que la velocidad de deriva es entonces independiente de la carga del ión, de su masa y de su velocidad transversal; tan solo depende de los campos involucrados. El movimiento de los iones en este caso son cicloides, tal como se muestra en la Figura 3 a continuación.

Figura 3. Movimiento de iones bajo el efecto de campos eléctricos y magnéticos uniformes y estáticos y perpendiculares entre sí.



Fuente. El autor

Debe anotarse que es posible hallar una fórmula más general para la velocidad de deriva. Para ello debe resolverse vectorialmente la ecuación (4.3) y notar que las ecuaciones (4.13) sugieren que la velocidad de la partícula cargada en el plano $x-y$ puede escribirse de la siguiente manera:

$$\vec{v} = \vec{v}_{\perp} + \vec{v}_{Der.} \quad (4.15)$$

Donde \vec{v}_{\perp} es la velocidad cuya magnitud fue definida en la ecuación (4.10) y $\vec{v}_{Der.}$ es la velocidad de deriva, que es por supuesto una constante. Al sustituir (4.15) en (4.3) y promediar a lo largo de un período, se obtiene:

$$\vec{E} = -\frac{1}{c} \vec{v}_{Der.} \times \vec{B} \quad (4.16)$$

Multiplicando vectorialmente por el campo magnético ambos miembros de la ecuación anterior (y transformando un poco):

$$c \vec{E} \times \vec{B} = \vec{B} \times \vec{v}_{Der.} \times \vec{B} = v_{Der.} B^2 - B \left(\vec{v}_{Der.} \cdot \vec{B} \right) \quad (4.17)$$

La velocidad de deriva de un centro de guía ubicado en el plano $x-y$ resulta, teniendo en cuenta que el segundo término de (4.17) se anula:

$$\vec{v}_{Der.} = \frac{c}{B^2} \vec{E} \times \vec{B} \quad (4.18)$$

Para una fuerza cualquiera puede expresarse:

$$\vec{v}_{Der.} = \frac{c}{qB^2} \vec{F}_{\perp} \times \vec{B} \quad (4.19)$$

4.2 DINÁMICA DE UNA PARTÍCULA CARGADA BAJO LA ACCIÓN DE UN CAMPO MAGNÉTICO NO UNIFORME

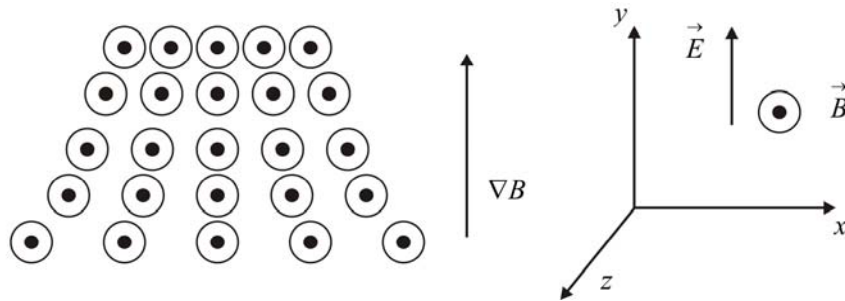
En la sección anterior se pudo apreciar cómo cuando una partícula cargada se mueve bajo la acción de campos eléctricos y magnéticos estáticos, es posible obtener una expresión exacta para la velocidad de deriva. Cuando se consideran campos no uniformes, el problema es más complejo y se dificulta dar una solución

exacta. Sin embargo, puede obtenerse una aproximación al considerar un campo magnético que varíe lentamente en el espacio. Esto equivale a decir cuando $r_L/R_C \ll 1$, donde R_C es el radio de curvatura de la línea de campo magnético. Cuando esta condición es satisfecha, la ecuación (4.18) es válida.

Se describirá brevemente el movimiento del centro de guía de una partícula cargada bajo la acción de un campo magnético que varía lentamente en la dirección tanto transversal como longitudinal a la dirección a su propia dirección.

4.2.1 Campo magnético con gradiente transversal ($\nabla B \perp \vec{B}$). En este caso las líneas del campo magnético son paralelas a la dirección del eje $+z$, y su densidad aumenta en la dirección del eje $+y$ (i. e., $B = B(y)$). Véase la Figura 4

Figura 4. Esquema de campo magnético con gradiente transversal.



Fuente. El autor

Teniendo en cuenta la ecuación (4.3), las componentes de la fuerza de Newton-Lorentz perpendiculares al campo magnético pueden escribirse:

$$F_x = \frac{q}{c} v_y B_z(y) = \frac{q}{c} v_{\perp} \cos(\omega_c t + \phi) \left[B_0 + \frac{v_{\perp}}{\omega_c} \sin(\omega_c t + \phi) \frac{\partial B_z}{\partial y} \right] \quad (4.20)$$

$$F_y = -\frac{q}{c} v_x B_z(y) = -\frac{q}{c} v_{\perp} \sin(\omega_c t + \phi) \left[B_0 + \frac{v_{\perp}}{\omega_c} \sin(\omega_c t + \phi) \frac{\partial B_z}{\partial y} \right]$$

Ahora bien, puede emplearse expansión en series de Taylor para la magnitud del campo magnético tomando un centro de guía ubicado en el origen ($x_0 = 0, y_0 = 0$) y las ecuaciones (4.7), que proporcionan la órbita no perturbada de una partícula cargada bajo la acción de un campo magnético uniforme e invocar la condición $r_L/R_C \ll 1$. Esto da como resultado:

$$\vec{B} = \vec{B}_0 + \left(\vec{r} \cdot \nabla \right) B + \dots ; B = B_0 + y(t) \left[\frac{\partial B_z}{\partial y} \right] + \dots \quad (4.21)$$

Reemplazando en (4.19) y promediando a lo largo de un periodo, resulta:

$$\bar{F}_x = 0 ; \bar{F}_y = -\frac{qv_{\perp}^2}{2c\omega_c} \frac{\partial B_z}{\partial y} = -\frac{K_{\perp}}{B} \frac{\partial B_z}{\partial y} \quad (4.22)$$

Donde $K_{\perp} = \frac{1}{2}mv_{\perp}^2$ es la energía cinética de la partícula cargada relacionada con su movimiento transversal.

Ahora bien, utilizando la ecuación (4.19) puede hallarse la velocidad del centro de guía:

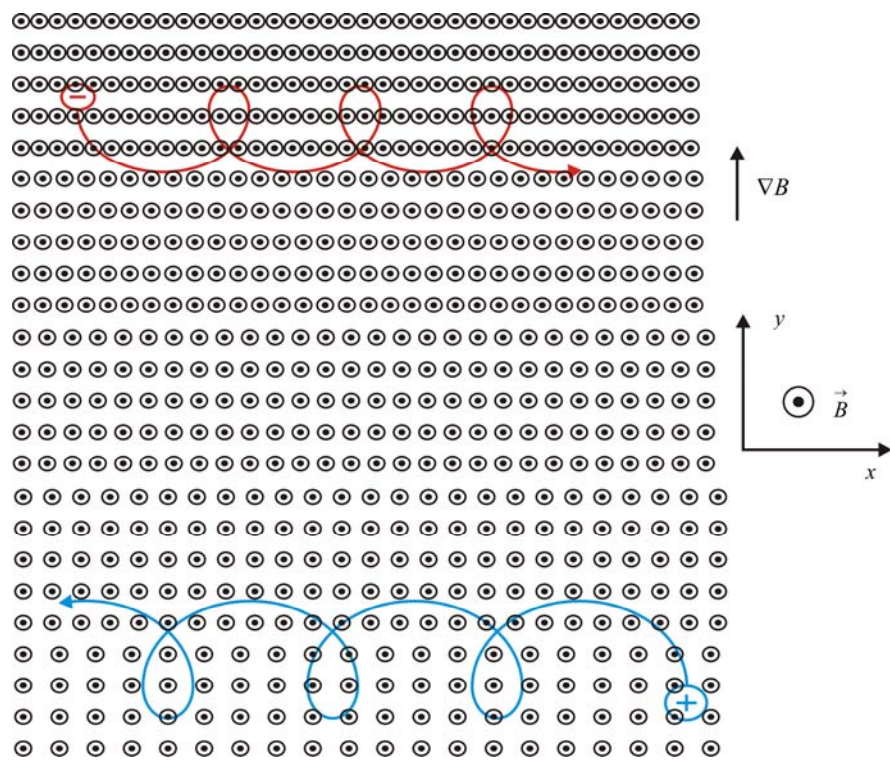
$$\vec{v}_{Der. \nabla B} = \frac{c}{qB^2} \vec{F}_{\perp} \times \vec{B} = \frac{c\bar{F}_y}{qB} \hat{x} = -\frac{cK_{\perp}}{qB^2} \frac{\partial B_z}{\partial y} \hat{x} \quad (4.23)$$

Puesto que la dirección en la que varía la magnitud del campo magnético (eje y) es arbitraria, la ecuación para encontrar la velocidad de deriva debido a un gradiente en la magnitud del campo magnético puede generalizarse pensando en una fuerza transversal originada aquel; $\vec{F}_{\perp} = -\frac{K_{\perp}}{qB} \nabla_{\perp} B$. Se hablaría entonces de velocidad de deriva debida a un gradiente arbitrario en el campo magnético.

Puede notarse que la velocidad de deriva del centro de guía de la partícula cargada es perpendicular al gradiente del campo magnético, y su sentido por supuesto depende del signo de la carga.

Físicamente, puede formarse una idea un poco más gráfica de la velocidad de deriva de gradiente de campo magnético con la Figura 5 a continuación. Al analizar la ecuación (4.10), se observa que a medida que la magnitud del campo magnético aumenta, el radio de Larmor de la partícula cargada decrece, de modo que es posible decir que, en general, el radio de curvatura decrece en las regiones donde el campo eléctrico tiene mayor magnitud, esto es, donde están más apretadas sus líneas. Por otra parte, el sentido del cicloide es dependiente de si la carga es positiva o negativa, tal y como se muestra en la Figura 5.

Figura 5. Movimiento de partículas cargadas bajo la influencia de un campo magnético con gradiente transversal.

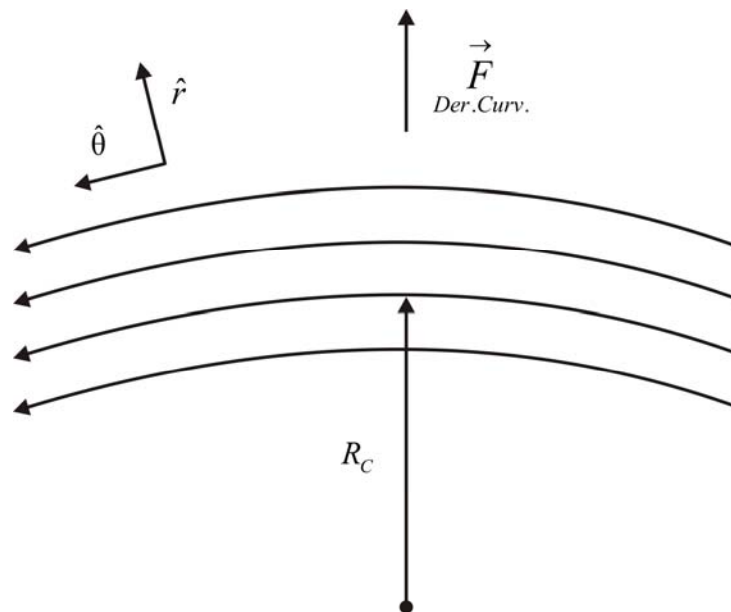


Fuente. El autor

4.2.2 Campo magnético con gradiente en la magnitud del campo magnético (transversal) y gradiente en la curvatura del campo magnético. En este caso se asume que la magnitud del campo magnético tiene gradiente tanto en su

magnitud como en su curvatura. Específicamente en cuanto al gradiente de curvatura del campo magnético, se asume que sus líneas tienen un radio de curvatura R_C . Es claro que la velocidad de deriva asociada a un gradiente en la magnitud del campo eléctrico debe ser superpuesta a la velocidad de deriva asociada con un gradiente en su curvatura.

Figura 6. Líneas de campo magnético curvas.



Fuente. El autor

Para hallar esta última, puesto que de la primera ya se habló en la sección inmediatamente anterior (sección 4.2.1), debe considerarse que la fuerza centrípeta media que experimentan las partículas cargadas, toda vez que se asuma para ellas una velocidad promedio en la dirección a lo largo del campo magnético -representada por v_{\parallel}^2 - debe ser:

$$\left| \frac{\vec{F}}{Der. Curv.} \right| = \frac{mv_{\parallel}^2}{R_C} \hat{r} = mv_{\parallel}^2 \frac{\vec{R}_C}{R_C^2} \quad (4.24)$$

Consecuentemente con la ecuación (4.19), ésta fuerza origina una velocidad de deriva dada por:

$$\vec{v}_{Der. Curv.} = \frac{c}{qB^2} \vec{F}_{Der. Curv.} \times \vec{B} = \frac{cmv_{\parallel}^2}{qB^2} \frac{\vec{R}_C \times \vec{B}}{R_C^2} = \frac{2cK_{\parallel}}{qB^2} \frac{\vec{R}_C \times \vec{B}}{R_C^2} \quad (4.25)$$

Debe notarse que K_{\parallel} es la energía cinética de la partícula cargada relacionada con su movimiento a lo largo de la dirección del campo magnético (es decir, longitudinal), i. e., $K_{\parallel} = \frac{1}{2}mv_{\parallel}^2$.

La velocidad de deriva de curvatura ($\vec{v}_{Der. Curv.}$) debe superponerse a la velocidad de deriva originada por el gradiente en la magnitud del campo magnético. Para hacerlo, primero debe tenerse en cuenta que la magnitud del campo magnético decrece con el radio. Ahora bien, en el vacío, $\nabla \times \vec{B} = 0$. Estudiando el caso en coordenadas cilíndricas, puede apreciarse que $\nabla \times \vec{B}$ tiene sólo componente a lo largo del eje z puesto que \vec{B} y ∇B tienen las direcciones $\hat{\theta}$ y \hat{r} , de manera respectiva. Matemáticamente, podemos expresarlo de la siguiente forma:

$$B_{\theta} \propto \frac{1}{r} ; \left(\nabla \times \vec{B} \right)_z = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rB_{\theta}) = 0 \quad (4.26)$$

De modo que:

$$B \propto \frac{1}{R_C} ; \frac{\nabla B}{B} = -\frac{\vec{R}_C}{R_C^2} \quad (4.27)$$

Ahora bien, empleando la ecuación (4.23), se tiene que:

$$\vec{v}_{Der. \nabla B.} = -\frac{cK_{\perp}}{qB^3} \vec{B} \times \frac{\nabla B}{B} = \frac{cK_{\perp}}{qB^2 R_C^2} \vec{R}_C \times \vec{B} \quad (4.28)$$

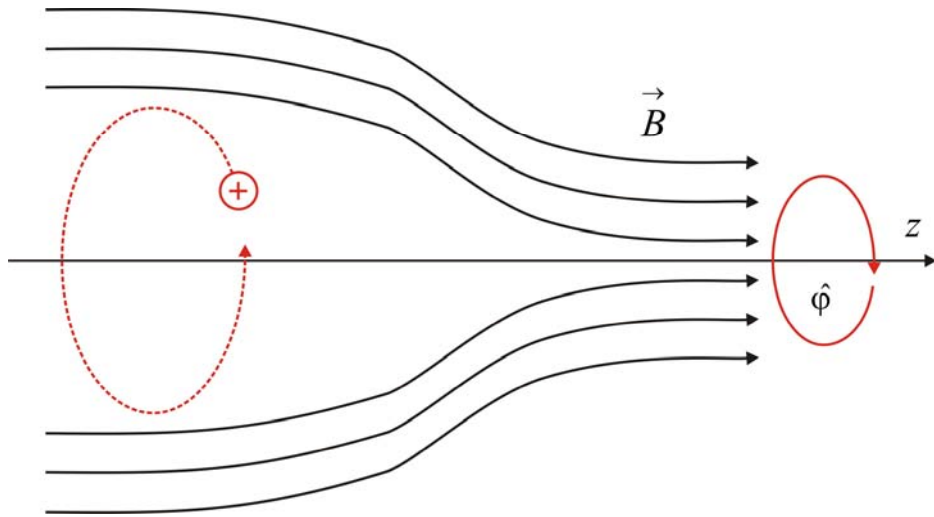
Finalmente, se halla la velocidad de deriva total de la partícula cargada superponiendo la velocidad de deriva por gradiente en la magnitud del campo magnético con la velocidad de deriva por gradiente de curvatura del campo magnético. Se obtiene:

$$\vec{v}_{Der.Total.} = \vec{v}_{Der.\nabla B.} + \vec{v}_{Der.Curv.} = \frac{c}{q} (K_{\perp} + 2K_{\parallel}) \frac{1}{B^2 R_c^2} \vec{R}_c \times \vec{B} \quad (4.29)$$

Puede apreciarse entonces que la velocidad de deriva total de la partícula cargada bajo la acción de un campo magnético no-uniforme con gradientes tanto en su magnitud como en su curvatura es perpendicular tanto a \vec{R}_c como a \vec{B} .

4.2.3 Campo magnético con gradiente longitudinal ($\nabla B \parallel \vec{B}$). En este caso se considera el movimiento de una partícula cargada bajo la influencia de un campo eléctrico con dirección a lo largo del eje z que varía su magnitud también a lo largo de la dirección radial \hat{r} en torno a dicho eje. Véase la Figura 7.

Figura 7. Representación de un gradiente de campo magnético longitudinal.



Fuente. El autor

Se asume que el campo es axialmente simétrico (tomando z como la dirección axial), es decir, $B_{\phi} = 0$, $\partial B / \partial \phi = 0$. Debido a la simetría de la situación, la componente preponderante de \vec{B} debe ser B_r . Ésta puede obtenerse a partir de

$\nabla \cdot \vec{B} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (rB_r) + \frac{\partial B_z}{\partial z} = 0$, puesto que, siendo $[\partial B_z / \partial z]_{r=0}$ conocido, y asumiendo que el campo magnético varía lentamente con respecto a r , puede calcularse que (aproximadamente):

$$rB_r = -\int_0^r r \frac{\partial B_z}{\partial z} dr \simeq -\frac{1}{2} r^2 \left[\frac{\partial B_z}{\partial z} \right]_{r=0} \quad (4.30)$$

De modo que:

$$B_r = -\frac{1}{2} r \left[\frac{\partial B_z}{\partial z} \right]_{r=0} \quad (4.31)$$

Es claro en este contexto que la variación de la magnitud del campo magnético en la dirección radial origina un gradiente en la dirección longitudinal (a lo largo del eje z) en la velocidad de deriva causada. Además, debe notarse que puesto que $\partial B / \partial \varphi = 0$, no existe un gradiente en la dirección radial (la dirección \hat{r}) para la velocidad de deriva del centro de guía de la partícula cargada. Las componentes de la fuerza de Newton-Lorentz resultan:

$$\begin{aligned} F_r &= \frac{q}{c} v_\varphi B_z \\ F_\varphi &= \frac{q}{c} (-v_r B_z + v_z B_r) \\ F_z &= -\frac{q}{c} v_\varphi B_r \end{aligned} \quad (4.32)$$

La primera de las ecuaciones (4.32) representa una órbita de Larmor. La segunda se anula en el eje. Cuando no es así, esta componente azimutal de la fuerza da lugar a una velocidad de deriva en la dirección radial que es la responsable de que el centro de guía se mantenga moviendo a lo largo de la línea de campo magnético. Reemplazando (4.31) en la tercera de las ecuaciones (4.32):

$$F_z = -\frac{q}{2c} v_\varphi r \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad (4.33)$$

Calculando el promedio de esta componente de la fuerza a lo largo de un ciclo, asumiendo por simplicidad que el centro de guía de la partícula cargada está ubicado sobre el eje se tiene:

$$\bar{F}_z = \pm \frac{q}{2c} v_{\perp} r_L \frac{\partial B_z}{\partial z} = \pm \frac{qv_{\perp}}{2c|\omega_c|} \frac{\partial B_z}{\partial z} = -\frac{mv_{\perp}^2}{2B} \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad (4.34)$$

Donde el signo depende de la polaridad de la carga y además, se ha considerado que $v_{\phi} = \pm v_{\perp}$ y $r = r_{\perp}$. Ahora bien, si se define el momento magnético de la partícula cargada como $\mu \equiv \frac{1}{2} \frac{mv_{\perp}^2}{B}$, resulta que:

$$\bar{F}_z = -\mu \frac{\partial B_z}{\partial z} \quad (4.35)$$

Esta fuerza se denomina diamagnética, y una expresión general para ella es la siguiente:

$$\vec{F}_{\parallel} = -\mu \nabla_{\parallel} B \quad (4.36)$$

De esta manera, cuando la partícula se mueve en regiones con diferente valor en la magnitud del campo magnético su radio de Larmor varía, pero no así su momento magnético.

5. ESQUEMA GENERAL DE LA SIMULACIÓN DE UN SISTEMA DE EXTRACCIÓN DE IONES A PARTIR DE UN PLASMA MAGNÉTICAMENTE CONFINADO

El objetivo central de la simulación consiste en encontrar las trayectorias de las partículas cargadas provenientes del plasma haciendo uso de la técnica partícula en malla (PM) y partícula en celda (PIC). En el capítulo anterior se comentaba cómo se emplea el concepto de macropartículas para reducir un poco el problema del enorme número de ecuaciones de Newton-Lorentz a resolver, i. e., las ecuaciones (4.1). Una vez se reduce sustancialmente el número de las ecuaciones a resolver y se tienen las ecuaciones (4.2), el problema general que ocupa este trabajo se encuentra claramente delimitado. Para encontrar las trayectorias de las macropartículas, y por ende de sus partículas asociadas, se requiere la siguiente secuencia de procedimientos (lo que conforma un algoritmo):

- i) Determinar las condiciones iniciales. Se emplea una rutina que distribuye uniformemente los iones en el volumen asumido como inicial para el haz. Las direcciones de las velocidades para los iones se asignan aleatorias y sus magnitudes iguales entre sí, todas consistentes con un valor para la energía de los iones de $10 eV$, que se toma como variable de programación modificable en el código final.
- ii) Encontrar la configuración espacial del campo eléctrico externo, generado por los electrodos mantenidos a diferentes potenciales del sistema de extracción. Este tema es tratado en el capítulo 6.
- iii) Encontrar un estimativo de la densidad discreta de carga en los nodos de la malla empleada en el método partícula en celda. El estimativo se encuentra

ponderando la densidad discreta de carga en los nodos de la malla de macropartículas. Este tema es tratado en el capítulo 7.

- iv) Encontrar la configuración espacio-temporal del campo eléctrico autoconjugado, esto es, originado por el propio haz de partículas cargadas (iones). Para ello se debe resolver la ecuación de Poisson en diferencias finitas usando la técnica de transformada rápida de Fourier y a continuación calcular el gradiente del potencial encontrado. Este tema es tratado en el capítulo 7.
- v) Encontrar la configuración espacio-temporal del campo magnético autoconjugado, esto es, originado por el propio haz de partículas cargadas (iones). Para ello se emplea el campo eléctrico autoconjugado encontrado en el ítem anterior, es decir, el campo magnético autoconjugado se halla a partir de aquel. Este tema es tratado en el capítulo 8.
- vi) Seleccionar una muestra de 4 macropartículas con el fin de resolver para ellas su ecuación de movimiento (ecuación de Newton-Lorentz).
- vii) Encontrar, haciendo uso de los valores para posiciones y velocidades hallados en el paso inmediatamente anterior, un estimativo del valor de los campos eléctrico y magnético autoconjugados, es decir, generados por el propio haz. Para ello los campos deben ser ponderados en los nodos de la malla de macropartículas. Debe notarse que la malla empleada para hallar el campo eléctrico externo es más fina que la empleada para hallar los campos eléctrico y magnético autoconjugados, de modo que un ponderado adicional es necesario para asignar valores para el campo eléctrico externo a los nodos pertenecientes a la malla más gruesa. Este tema es tratado en el presente capítulo.

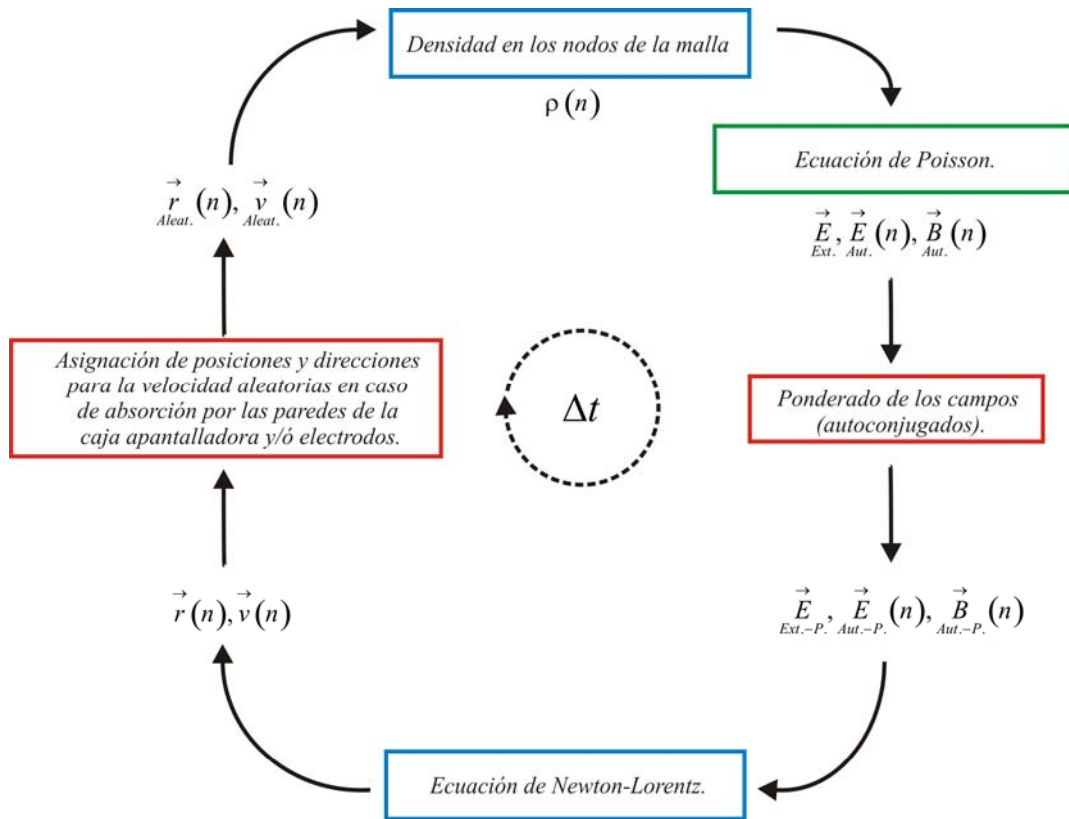
- viii) Resolver la ecuación de Newton-Lorentz, usando el método de Leap-Frog y la técnica de Boris para el set de muestra escogido de macropartículas. Este tema es tratado en el presente capítulo.
- ix) Considerar que, en el caso de que la nueva posición calculada en el paso inmediatamente anterior corresponda a que la partícula cargada alcance los electrodos o las paredes de la caja apantalladora del sistema de extracción, la partícula cargada se vea absorbida y computacionalmente se recolocue en una posición aleatoria y con velocidad en dirección aleatoria, pero cuya magnitud sea consistente nuevamente con una energía de $10 eV$.
- x) Iterar los ítems de i) a viii) -a excepción del i), ii) y vi), que sólo se requieren una vez- hasta resolver para la totalidad de macropartículas, incluido set de muestreo (10^6).

Desde el punto de vista computacional, es claro que la secuencia anterior de pasos comprime los elementos requeridos para establecer un ciclo algorítmico computacional completo, consistente con un paso en el tiempo de la simulación pretendida. Ello puede notarse al darse cuenta que el ciclo computacional finaliza con el valor de las posiciones y velocidades del set de macropartículas de muestra escogido para el siguiente paso en el tiempo.

Por otra parte, la manera de implementar el ciclo computacional consiste en discretizar las ecuaciones de Newton-Lorentz (4.2) mediante el método de Leap-Frog, mientras en simultáneo se emplea el esquema de integración de Boris para resolverlas apropiadamente.

Véase la Figura 8.

Figura 8. Esquema del ciclo computacional elemental planteado.



Fuente. El autor

En el programa final, el número de pasos en el tiempo que transcurren antes de grabar los datos es una variable de entrada, de modo que el ritmo de la simulación es completamente controlable. Esto se hace por dos razones. Primera, en previsión de que mientras se ejecuta la simulación pueda haber alguna clase de interrupción en el funcionamiento del computador que origine pérdida de datos y se tenga que recomenzar de cero. Segunda, para detectar rápidamente tendencias en la simulación y no perder tiempo utilizando conjuntos de datos de entrada que no producirán resultados satisfactorios. Ahora bien, es interesante comentar cómo se realiza el estimativo para determinar el paso en el tiempo en el programa. Primero debe obtenerse un estimativo de las magnitudes para las velocidades iniciales de las partículas cargadas, consistentes con una energía

cinética de 10 eV . Empleando la ecuación relativista para la energía cinética del ión ($K_{\text{ión}}$), se tiene:

$$K_{\text{ión}} = mc^2 - m_0c^2 \quad (5.1)$$

Donde m es la masa de la partícula cargada (ión) y m_0 es su masa en reposo, y c la velocidad de la luz. Ahora bien:

$$m = m_0\gamma, \quad (5.2)$$

Donde γ es por supuesto el factor relativista usual. Reemplazando (5.2) en (5.1) se obtiene:

$$\gamma = \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} = \frac{K_{\text{ión}}}{m_0c^2} + 1 \quad (5.3)$$

Reemplazando los valores numéricos, con $K_{\text{ión}} = 10 \text{ eV}$, y resolviendo para $v = v_0$ se obtiene que $v_0 \approx 4.31 \times 10^6 \frac{\text{cm}}{\text{seg}}$. Finalmente, con este estimativo para las magnitudes de las velocidades iniciales de las partículas cargadas (iones) se obtiene un valor para el paso en el tiempo razonable de la siguiente manera:

$$\Delta t = \frac{(r_{\text{Máx.}} - r_{\text{Min.}})}{n v_0} \quad (5.4)$$

En la ecuación anterior, $r_{\text{Máx.}}$ y $r_{\text{Min.}}$ son las dimensiones radiales de la caja apantalladora, que delimitan el sistema de extracción (cúbica en la simulación, pero no es obligatorio asumirla así) y n es un número que se utiliza para controlar la magnitud del paso en el tiempo, una variable de entrada en el código final. Con $n = 1$, $\Delta t \approx 2.74 \times 10^{-6} \text{ seg}$.

5.1 DISCRETIZACIÓN DE LAS ECUACIONES DE NEWTON-LORENTZ MEDIANTE EL MÉTODO DE LEAP-FROG

El método de Leap-Frog recibe su nombre debido a que esencialmente consiste en discretizar las ecuaciones de movimiento de manera que, en el tiempo, el

movimiento que representan parezca evolucionar en pequeños “saltitos de rana”. Esto es, consiste en expresar dos diferentes instancias del movimiento en el tiempo mediante un pequeño intervalo de tiempo.

Para entender la mecánica del método de Leap-Frog, debe notarse que, de una manera muy general, cuando en física se requiere hallar la trayectoria de un cuerpo, el tipo de ecuaciones que deben resolverse siempre puede ser llevado a la forma que tiene la ecuación de movimiento de Newton:

$$m \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \sum \vec{F} ; \frac{\partial \vec{r}}{\partial t} = \vec{v} \quad (5.5)$$

Esto es, para tener una descripción completa del movimiento, las ecuaciones (5.5), que son ecuaciones diferenciales de primer orden, deben ser integradas. Estas ecuaciones son continuas y requieren discretizarse para ser reemplazadas por ecuaciones algebraicas, óptimas para ser tratadas de manera algorítmica/computacional. Se plantea el siguiente esquema de discretización:

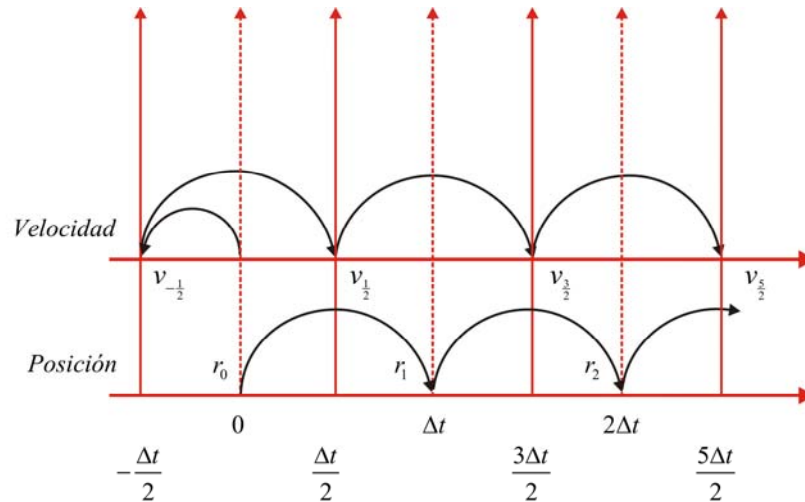
$$m \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \sum \vec{F} \rightarrow m \frac{\vec{v}^{\rightarrow(n+\frac{1}{2})} - \vec{v}^{\rightarrow(n-\frac{1}{2})}}{\Delta t} = \sum \vec{F}^{\rightarrow(n)} \quad (5.6)$$

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial t} = \vec{v} \rightarrow m \frac{\vec{r}^{\rightarrow(n+1)} - \vec{r}^{\rightarrow(n)}}{\Delta t} = \vec{v}^{\rightarrow(n+\frac{1}{2})} \quad (5.7)$$

Como puede apreciarse, en este esquema las posiciones y fuerzas (que implican campos) están definidos para valores que son múltiplos enteros del paso de tiempo (intervalo de tiempo elemental) $-(t=0, t=\Delta t, t=2\Delta t, t=3\Delta t, \dots)-$; y las velocidades son definidas para valores que son múltiplos semi-enteros del mismo $-(t=\frac{1}{2}\Delta t, t=\frac{3}{2}\Delta t, t=\frac{5}{2}\Delta t, \dots)-$. Es muy importante notar que la secuencia de la definición en el tiempo debe ser consistente con la secuencia algorítmica que forma el núcleo de la simulación. (Ver sección anterior). La Figura 9 a continuación

nos permite tener una idea gráfica a propósito del esquema expresado matemáticamente con las ecuaciones (5.7):

Figura 9. Esquema de discretización temporal “Leap-Frog”.



Fuente. El autor

5.2 RESOLUCIÓN (INTEGRACIÓN) DE LAS ECUACIONES DE NEWTON-LORENTZ MEDIANTE EL USO DE LA TÉCNICA DE INTEGRACIÓN DE BORIS

Las ecuaciones a discretizar y posteriormente a integrar son por supuesto las ecuaciones (4.2), debidamente corregidas desde el punto de vista relativista, como se comentaba en ese capítulo:

$$\frac{d}{dt} \left(\begin{matrix} \vec{u} \\ M_p. \end{matrix} \right) = \frac{q}{m_{\text{Ión.}}} \left\{ \begin{matrix} \vec{E} + \vec{E} \\ Ext. \quad Aut. \end{matrix} \right\} + \frac{\vec{u} \times \vec{B}}{c\gamma} \quad (5.8)$$

Es claro que todos los elementos que integran la ecuación (5.8) varían con el tiempo, a excepción de las constantes $\frac{q}{m_{\text{Ión.}}}$, $\frac{m}{m_{\text{Ión.}}}$, c , y el campo eléctrico externo a causa de la configuración de electrodos ($\vec{E}_{Ext.}$). Incluso el factor relativista γ

cambia con el tiempo, puesto que se relaciona con la velocidad de las partículas cargadas (iones) con respecto al sistema de referencia en reposo. Haciendo

$\vec{E}_{Ext.} + \vec{E}_{Aut.} = \vec{E}_{Total.}$, la ecuación (5.8) discretizada con el esquema de Leap-Frog ([19])

y adecuadamente indexada para el tiempo resulta:

$$\frac{\vec{u}_{Mp.}^{\rightarrow(n+\frac{1}{2})} - \vec{u}_{Mp.}^{\rightarrow(n-\frac{1}{2})}}{\Delta t} = \frac{q}{m_{lón.}} \left\{ \vec{E}_{Total.}^{\rightarrow(n)} + \frac{\vec{u}_{Mp.}^{\rightarrow(n+\frac{1}{2})} + \vec{u}_{Mp.}^{\rightarrow(n-\frac{1}{2})}}{2c\gamma_B^{(n)}} \times \vec{B}_{Aut.}^{\rightarrow(n)} \right\} \quad (5.9)$$

Con su ecuación complementaria:

$$m_{lón.} \frac{\vec{r}_{Mp.}^{\rightarrow(n+1)} - \vec{r}_{Mp.}^{\rightarrow(n)}}{\Delta t} = \frac{m_{Mp.}^{\rightarrow(n+\frac{1}{2})}}{\gamma_B^{(n)}} \quad (5.10)$$

Donde $\gamma_B^{(n)} = \sqrt{1 + \left| \frac{\vec{u}_{Mp.}^{\rightarrow(n)}}{c} \right|^2}$, entrando en juego la técnica de Boris ([6]), que consiste

básicamente en proponer el siguiente cambio de variables en relación con las ecuaciones (5.9) y (5.10):

$$\vec{u}_{Mp.}^{\rightarrow'(n-\frac{1}{2})} = \vec{u}_{Mp.}^{\rightarrow-} - \left[\frac{\vec{E}_{Total.}^{\rightarrow'(n)}}{c} \right] \frac{\Delta t'}{2} \quad (5.11)$$

$$\vec{u}_{Mp.}^{\rightarrow'(n+\frac{1}{2})} = \vec{u}_{Mp.}^{\rightarrow+} + \left[\frac{\vec{E}_{Total.}^{\rightarrow'(n)}}{c} \right] \frac{\Delta t'}{2}$$

Donde las cantidades primadas hacen referencia a que las posiciones, velocidades, campos, y paso en el tiempo en (5.9) y (5.10) han sido adecuadamente normalizadas. En términos de estas cantidades de movimiento

por unidad de masa a “izquierda” ($\frac{\vec{u}_{Mp.}^{\rightarrow-}}{c}$) y a “derecha” ($\frac{\vec{u}_{Mp.}^{\rightarrow+}}{c}$) las ecuaciones

resultan, introduciendo una variable temporal, que llamaremos “velocidad accesoria”:

$$\vec{v}_{Acces.} = \vec{u}_{Mp.} + \left[\begin{array}{c} \vec{v}_{Acces.} \\ \vec{u}_{Mp.} \end{array} \right] \times \vec{t} \quad (5.12)$$

$$\vec{u}_{Mp.} = \vec{u}_{Mp.} + \left[\begin{array}{c} \vec{v}_{Acces.} \\ \vec{u}_{Mp.} \end{array} \right] \times s \quad (5.13)$$

$$\text{Con } \vec{t} = \frac{\vec{B}_{Aut.} \Delta t'}{2\gamma_B^{(n)}} ; \gamma_B^{(n)} = \sqrt{1 + \left| \frac{\vec{u}_{Mp.}}{c} \right|^2} ; s = \frac{2 \vec{t}}{\left(1 + \left| \frac{\vec{u}_{Mp.}}{c} \right|^2 \right)} \quad (5.14)$$

De esta forma, la nueva posición de la partícula cargada (ión) para el paso de tiempo siguiente ($n+1$) resulta:

$$\vec{r}_{Mp.}^{\prime(n+1)} = \vec{r}_{Mp.}^{\prime(n)} + \vec{u}_{Mp.}^{\prime(n+2)} \left[\frac{\Delta t'}{\gamma_B^{(n+\frac{1}{2})}} \right] \quad (5.15)$$

$$\text{Donde } \gamma_B^{(n+\frac{1}{2})} = \sqrt{1 + \left| \frac{\vec{u}_{Mp.}^{\prime(n+\frac{1}{2})}}{c} \right|^2} . \quad (5.16)$$

Lo que resta para poder implementar la técnica de Boris en la solución de las ecuaciones de movimiento es asegurarnos de que para el instante inicial los valores de las posiciones, velocidades y los campos a los que están sometidas las partículas cargadas (iones) sean conocidos. Para las posiciones, el programa plantea e implementa distribuir las partículas cargadas de manera uniforme en el volumen delimitado por las dimensiones que se asuman iniciales para el haz. Con respecto a los campos, a excepción del campo eléctrico externo, que permanece constante con el tiempo, el programa contempla que el campo eléctrico autoconjugado y el campo magnético autoconjugado han ser inicializados para estimar sus valores al comienzo de la simulación y además ponderados (el campo eléctrico total y el campo magnético autoconjugado) para cada ciclo computacional, puesto que sus valores van cambiando con el tiempo y con ellos, la manera en que influyen en las partículas cargadas (iones).

5.3 PONDERADO DEL CAMPO ELÉCTRICO Y MAGNÉTICO AUTOCONJUGADOS PARA CADA CICLO COMPUTACIONAL

Los campos eléctrico y magnético autoconjugados son inicializados como nulos en el tiempo, pero evidentemente después del primer ciclo adquieren otros valores. Éstos valores, reflejados en el valor del campo eléctrico total (campo eléctrico externo más campo eléctrico autoconjugado) y el del campo magnético autoconjugado son variables con cada ciclo en el tiempo, de manera que han de ser asignados a los puntos donde se encuentran las macropartículas en cierto momento realizando un procedimiento de ponderado de manera análoga a como se hace para la distribución volumétrica de carga tal como es explicado en el Capítulo 7.

Por otra parte, en lo que respecta al campo eléctrico externo, resulta necesario realizar un sencillo ponderado de orden cero con el fin de en asignarle a un punto cualquiera en donde se encuentre la macropartícula en un momento dado el valor del campo eléctrico externo perteneciente al nodo más cercano de la malla más “fina” (la que se utiliza para calcularlo). De cualquier manera, esta sección se concentrará a comentar con un poco de mayor detalle cómo se realizan esos ponderados, a excepción del ponderado empleado para asignar valores de campo eléctrico externo que se acaba de describir someramente.

El campo eléctrico externo se resuelve en coordenadas cilíndricas (Ver Capítulo 6) y los campos eléctrico y magnético autoconjugados se resuelven en coordenadas cartesianas (Ver Capítulos 7 y 8), de modo que una transformación de coordenadas cilíndricas a cartesianas es requerida para la asignación de valores de campo eléctrico externo a las posiciones de las macropartículas, como se comenta en el párrafo anterior. En efecto, al emplear coordenadas cartesianas, se considera que las macropartículas se encuentran ubicadas en el interior de alguna de las celdas que componen la malla 3-D “gruesa”, cuya definición en el programa

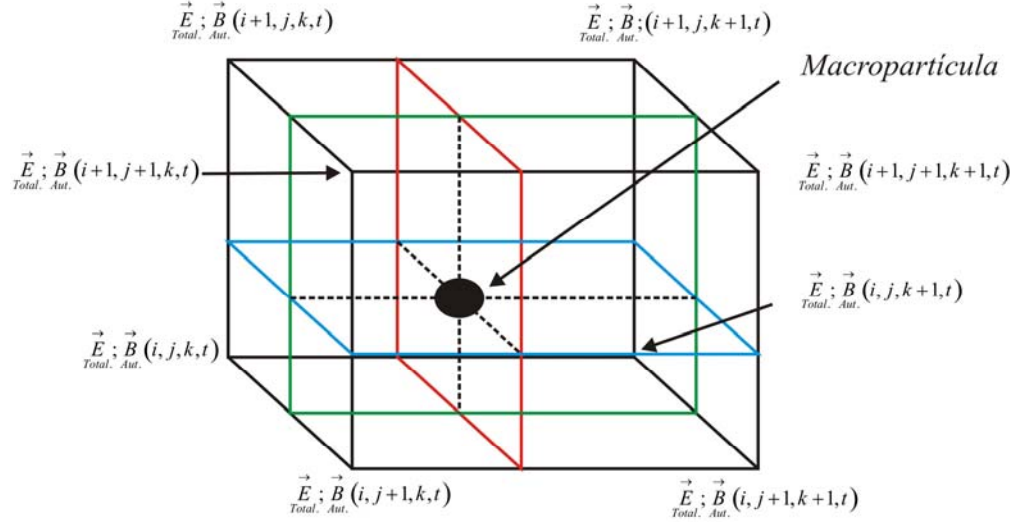
en FORTRAN implementado es una variable de programación modificable. Se toma una malla con definición de $79 \times 79 \times 53$ nodos en las direcciones x, y, z respectivamente. Debe tenerse presente que el número de macropartículas a emplear es de 10^6 , aunque éste número es una variable de programación modificable en el código final. Con este valor, un cálculo sencillo da como resultado alrededor de tres macropartículas por cada celda elemental de la malla, en el caso de que estuviesen distribuidas uniformemente por sobre todo el volumen disponible. Esto último se corresponde con los requerimientos computacionales del método “partícula en celda” que requiere al menos tres macropartículas por cada una de ellas.

Siendo claro que cada macropartícula puede localizarse en cualquier lugar de la malla “gruesa”, a continuación la celda se divide en divide en octantes (Véase la Figura 10) y se efectúa un procedimiento de ponderación de primer orden para encontrar un estimativo de los valores de los campos eléctrico y magnético autoconjugados en ese punto cualquiera. Tal procedimiento consiste en asumir que en un momento dado la macropartícula se encuentra en un lugar arbitrario de la celda, y asignarle a ese lugar arbitrario valores de campos eléctrico y magnético autoconjugados tales que los valores de éstos en cada uno de los nodos contribuyan -en el punto cualquiera- de manera proporcional al volumen de su octante opuesto, de forma análoga a como se pondera la densidad volumétrica de carga (Ver Capítulo 7).

Para realizar este ponderado es necesario entonces emplear coordenadas de malla tales que cada nodo pueda expresarse como una tripleta de enteros -desde el punto de vista espacial- y además considerar unitario el volumen de cada celda.

Véase la Figura 10.

Figura 10. Celda elemental malla de macropartículas. División del volumen en octantes para ponderado del campo eléctrico total y el campo magnético autoconjugado.



Fuente. El autor

Los pasos para la malla de las macropartículas se definen entonces:

$$\Delta x = \frac{(x_{M\acute{a}x.} - x_{M\acute{i}n.})}{(\# \text{ nodos en } x) - 1} ; \Delta y = \frac{(y_{M\acute{a}x.} - y_{M\acute{i}n.})}{(\# \text{ nodos en } y) - 1} ; \Delta z = \frac{(z_{M\acute{a}x.} - z_{M\acute{i}n.})}{(\# \text{ nodos en } z) - 1} \quad (5.17)$$

Donde $x_{M\acute{i}n.}$, $x_{M\acute{a}x.}$, $y_{M\acute{i}n.}$, $y_{M\acute{a}x.}$, $z_{M\acute{i}n.}$, $z_{M\acute{a}x.}$ son en este contexto las dimensiones de la caja apantalladora. Los diferentes numeros de nodos y las dimensiones de la caja apantalladora se eligen de manera tal que Δx , Δy , y Δz son iguales. Ası, se

tendra que $\vec{E}_{Total} = \vec{E}_{Total}(x, y, z, t) = \vec{E}_{Total}(i, j, k, t)$, y $\vec{B}_{Aut.} = \vec{B}_{Aut.}(x, y, z, t) = \vec{B}_{Aut.}(i, j, k, t)$. Ahora

bien, la ponderacion de primer orden para los campos en el punto (x, y, z, t) cualquiera se realiza de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} E_{Aut.-Punto.x} &= E_{Aut.-Nodo.x}(i, j, k, t)V_8 + E_{Aut.-Nodo.x}(i+1, j, k, t)V_7 + E_{Aut.-Nodo.x}(i, j+1, k, t)V_6 + \\ &E_{Aut.-Nodo.x}(i+1, j+1, k, t)V_5 + E_{Aut.-Nodo.x}(i, j, k+1, t)V_4 + E_{Aut.-Nodo.x}(i, j+1, k+1, t)V_2 + \\ &E_{Aut.-Nodo.x}(i+1, j, k+1, t)V_3 + E_{Aut.-Nodo.x}(i+1, j+1, k+1, t)V_1 \end{aligned} \quad (5.18)$$

$$\begin{aligned}
\underset{Aut.-Punto.y}{E} &= \underset{Aut.-Nodo.y}{E}(i, j, k, t)V_8 + \underset{Aut.-Nodo.y}{E}(i+1, j, k, t)V_7 + \underset{Aut.-Nodo.y}{E}(i, j+1, k, t)V_6 + \\
\underset{Aut.-Nodo.y}{E}(i+1, j+1, k, t)V_5 + \underset{Aut.-Nodo.y}{E}(i, j, k+1, t)V_4 + \underset{Aut.-Nodo.y}{E}(i, j+1, k+1, t)V_2 + & (5.19) \\
\underset{Aut.-Nodo.y}{E}(i+1, j, k+1, t)V_3 + \underset{Aut.-Nodo.y}{E}(i+1, j+1, k+1, t)V_1
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\underset{Aut.-Punto.z}{E} &= \underset{Aut.-Nodo.z}{E}(i, j, k, t)V_8 + \underset{Aut.-Nodo.z}{E}(i+1, j, k, t)V_7 + \underset{Aut.-Nodo.z}{E}(i, j+1, k, t)V_6 + \\
\underset{Aut.-Nodo.z}{E}(i+1, j+1, k, t)V_5 + \underset{Aut.-Nodo.z}{E}(i, j, k+1, t)V_4 + \underset{Aut.-Nodo.z}{E}(i, j+1, k+1, t)V_2 + & (5.20) \\
\underset{Aut.-Nodo.z}{E}(i+1, j, k+1, t)V_3 + \underset{Aut.-Nodo.z}{E}(i+1, j+1, k+1, t)V_1
\end{aligned}$$

Con ecuaciones exactamente análogas para el campo magnético autoconjugado, por lo que sería inoficioso reproducirlas aquí. Por otra parte, los términos V_m representan los volúmenes de los octantes asociados a los nodos respectivos. Estos volúmenes se calculan de la siguiente manera. Sea, (Véase la Figura 10): $dx(t) = x_n(t) - i$: Longitud del segmento entre el eje x , con origen en el nodo ubicado en (i, j, k, t) de la malla para las macropartículas y la n -ésima macropartícula en el instante t , $dy(t) = y_n(t) - j$: Longitud del segmento entre el eje y , con origen en el nodo ubicado en (i, j, k, t) de la malla para las macropartículas y la n -ésima macropartícula en el instante t , $dz(t) = z_n(t) - k$: Longitud del segmento entre el eje z , con origen en el nodo ubicado en (i, j, k, t) de la malla para las macropartículas y la n -ésima macropartícula en el instante t , $dy'(t) = 1 - dx(t)$: Longitud del segmento entre el eje y' , con origen en el nodo ubicado en $(i+1, j+1, k+1, t)$ de la malla para las macropartículas y la n -ésima macropartícula en el instante t , $dx'(t) = 1 - dy(t)$: Longitud del segmento entre el eje x' , con origen en el nodo ubicado en $(i+1, j+1, k+1, t)$ de la malla para las macropartículas y la n -ésima macropartícula en el instante t , $dz'(t) = 1 - dz(t)$: Longitud del segmento entre el eje z' , con origen en el nodo ubicado en

$(i+1, j+1, k+1, t)$ de la malla para las macropartículas y la n -ésima macropartícula en el instante t .

Teniendo presente lo anterior, se definen los volúmenes de los octantes de la siguiente manera:

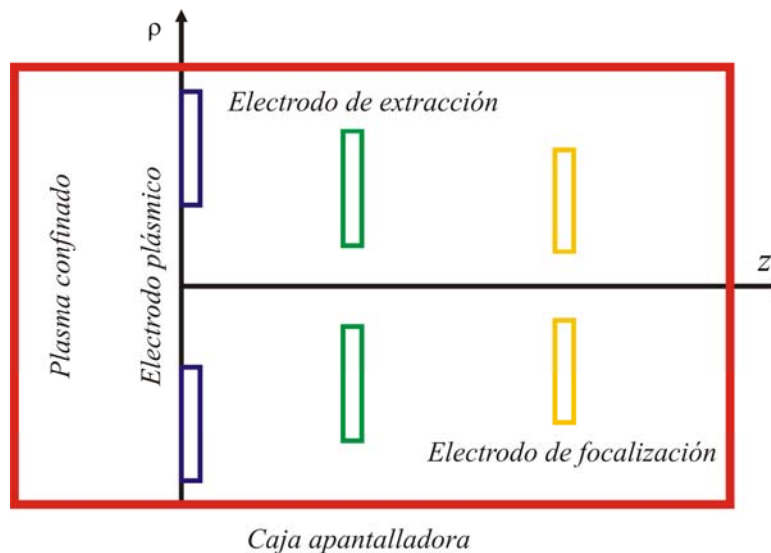
$$\begin{aligned}
 V_1 &= [dx(t) \times dy(t) \times dz(t)] \frac{1}{V} \\
 V_2 &= [dy'(t) \times dy(t) \times dz(t)] \frac{1}{V} \\
 V_3 &= [dx(t) \times dy'(t) \times dz(t)] \frac{1}{V} \\
 V_4 &= [dx'(t) \times dy'(t) \times dz(t)] \frac{1}{V} \\
 V_5 &= [dx(t) \times dy(t) \times dz'(t)] \frac{1}{V} \\
 V_6 &= [dy(t) \times dy'(t) \times dz'(t)] \frac{1}{V} \\
 V_7 &= [dx'(t) \times dy(t) \times dz'(t)] \frac{1}{V} \\
 V_8 &= [dx'(t) \times dy'(t) \times dz'(t)] \frac{1}{V}
 \end{aligned} \tag{5.21}$$

Donde V es el volumen de la celda elemental de la malla de macropartículas. Este tipo de ponderado de primer orden para los campos eléctrico y magnético autoconjugados es el que permite entonces asignar campos en los puntos en donde se encuentran las macropartículas en cierto instante.

6. CAMPO ELÉCTRICO EXTERNO

El primer elemento que hay que tener en cuenta en relación con el movimiento de los iones provenientes del plasma confinado es que deben interactuar con la configuración espacial del campo eléctrico atribuible a los potenciales de los tres electrodos que componen el sistema de extracción. Ésta es la que denominamos campo eléctrico externo. Dichos potenciales se mantienen fijos en cualquier circunstancia, de modo que la configuración espacial del campo eléctrico asociada a ellos es también fija. Por otra parte, esta configuración espacial del campo eléctrico es el elemento más importante del sistema de extracción puesto que es el más controlable desde el punto de vista de las variables físicas que entran en juego en la simulación, como podrá ser apreciado en este capítulo. De esta forma, esta configuración espacial, al ser configurable es lo que permite hablar de sistema de extracción. Gráficamente podemos formarnos una idea de la situación de trabajo en esta primera etapa así:

Figura 11. Esquema general del sistema de extracción.



Fuente. El autor

El sistema de extracción consiste entonces en una caja apantalladora más tres electrodos cilíndricos mostrados en la gráfica según vista de sección transversal, pero no a escala. La gráfica es tan sólo ilustrativa. El problema en esta etapa consiste en resolver la ecuación de Laplace con condiciones de contorno de Dirichlet para el potencial eléctrico en una situación con simetría cilíndrica hueca ($U = U(\rho, \phi, z)$) y además azimutal ($\frac{\partial U}{\partial \phi} = 0$). La ecuación de Laplace:

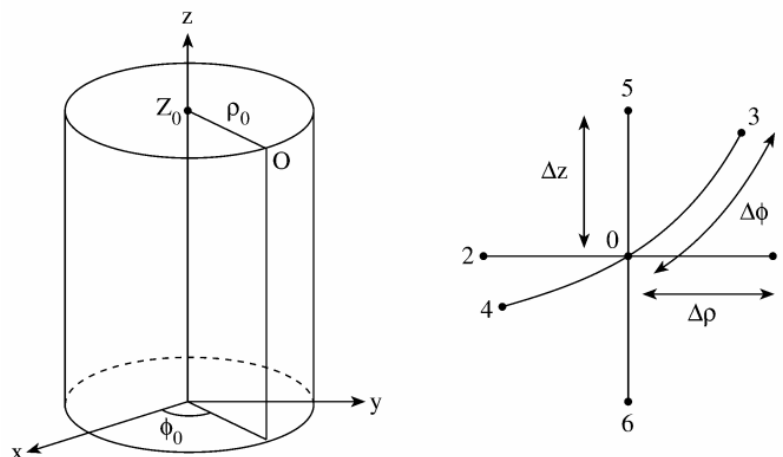
$$\nabla^2 U = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial U}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 U}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} = 0 \quad (6.1)$$

Resulta en estas circunstancias:

$$\nabla^2 U = \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial U}{\partial \rho} \right) + \frac{\partial^2 U}{\partial \rho^2} + \left(\frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 U}{\partial \phi^2} \right) + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} = 0 \quad (6.2)$$

Con el tercer término nulo, lo que reduce su complejidad apreciablemente. Por otra parte, con el fin encontrar el potencial en un punto $U_0 = U(\rho_0, \phi_0, z_0)$ a partir de los potenciales $U_1, U_2, U_3, U_4, U_5, U_6$ en los respectivos puntos indexados podemos emplear la siguiente malla elemental para coordenadas cilíndricas:

Figura 12. Malla elemental típica para coordenadas cilíndricas ([12]). Aproximación de segundo orden.



Fuente. El autor

La anterior malla elemental nos permite proponer una aproximación de segundo orden por diferencias finitas para la ecuación de Laplace, dada mediante el siguiente esquema:

$$\frac{U_1 - 2U_0 + U_2}{(\Delta\rho)^2} + \frac{U_1 - U_2}{\rho_0(\Delta\rho)} + \frac{U_3 - 2U_0 + U_4}{(\rho_0\Delta\phi)^2} + \frac{U_5 - 2U_0 + U_6}{(\Delta z)^2} = 0 \quad (6.3)$$

Donde $U_0 = U(\rho_0, \phi_0, z_0)$, $U_1 = U(\rho_0 + \Delta\rho, \phi_0, z_0)$, $U_2 = U(\rho_0 - \Delta\rho, \phi_0, z_0)$,
 $U_3 = U(\rho_0, \phi_0 + \rho_0\Delta\phi, z_0)$, $U_4 = U(\rho_0, \phi_0 - \rho_0\Delta\phi, z_0)$, $U_5 = U(\rho_0, \phi_0, z_0 + \Delta z)$,
 $U_6 = U(\rho_0, \phi_0, z_0 - \Delta z)$. Por otra parte, $\Delta\rho, \Delta\phi, \Delta z$ son los pasos o incrementos a lo largo de las respectivas coordenadas cilíndricas.

Por supuesto, esta aproximación constituye el núcleo del algoritmo a desarrollar para encontrar la configuración del campo eléctrico externo, primera etapa de la simulación. Tomando en cuenta la no dependencia del potencial con respecto a la coordenada azimutal o angular ($\frac{\partial U}{\partial \phi} = 0$), la ecuación (6.3) se reduce a:

$$\frac{U_1 - 2U_0 + U_2}{(\Delta\rho)^2} + \frac{U_1 - U_2}{\rho_0(\Delta\rho)} + \frac{U_5 - 2U_0 + U_6}{(\Delta z)^2} = 0 \quad (6.4)$$

Donde ahora $U = U(\rho, z)$.

6.1 DEFINICIÓN DE LA MALLA Y CONDICIONES DE FRONTERA

6.1.1 Descripción de la malla a emplear. La región donde se requiere resolver la ecuación de Laplace es la enmarcada por la caja apantalladora del sistema de extracción cuyas dimensiones (en cm) se toman con respecto al origen del sistema coordenado empleado: $-6 \leq \rho \leq 6$; $-4 \leq z \leq 8$. Esto configura por supuesto una caja apantalladora cuadrada en 2-D y cúbica en 3-D. En el programa final las dimensiones de la caja apantalladora son variables de entrada, no siendo indispensable el que sea cuadrada en 2-D ó cúbica en 3-D. La coordenada radial

se lee, en tanto dato de entrada para el programa, como si se tratase de la coordenada rectangular vertical en el plano (de ahí su valor negativo para el mínimo). Esto es sólo para efectos de programación, ya que el origen del sistema coordenado se tiene ubicado en el punto donde el eje longitudinal del sistema de extracción toca la interfase entre éste y el plasma confinado. En otras palabras, en tanto variable de entrada del programa:

$$\rho = \left| \pm \sqrt{x^2 + y^2} \right| \quad (6.5)$$

Los nodos de la malla a emplear pueden definirse como parejas ordenadas tales que el potencial en un nodo cualquiera en el espacio puede representarse como $U(\rho_i, z_j) = U(i, j)$. De esta manera, el barrido completo de los puntos de la malla puede lograrse empleando $\rho_i = \Delta\rho(i-1); 1 \leq i \leq \# \text{ nodos en } \rho (601)$ para la coordenada radial, y $z_j = -(z_{Min.}) + \Delta z(j-1); 1 \leq j \leq \# \text{ nodos en } z (601)$ para la coordenada axial, donde $z_{Min.}$ es la dimensión de la caja apantalladora que delimita la cavidad de confinamiento del plasma. (Ver Figura 11 nuevamente). Esto da como resultado una malla de 601×601 . En el programa final, la definición de la malla es una variable de programación modificable, y, -como se mencionó en el párrafo anterior-, las dimensiones de la caja apantalladora son variables de entrada.

Relacionado con esto último, el paso o incremento tanto en la coordenada radial como en la axial están definidos de la siguiente manera, en términos tanto del número de nodos como de las dimensiones de la caja apantalladora:

$$\Delta z = \frac{(z_{Máx.} - z_{Min.})}{(\# \text{ nodos en } z) - 1} ; \Delta \rho = \frac{(\rho_{Máx.} - \rho_{Min.})}{(\# \text{ nodos en } \rho) - 1} \quad (6.6)$$

De esta forma, en el programa final los pasos en las coordenadas radial y axial son completamente controlables indirectamente vía las variables de entrada definidas.

6.1.2 Condiciones de frontera. Las condiciones de frontera tipo Dirichlet son expresadas algorítmicamente mediante condiciones lógicas para cada uno de los tres electrodos que conforman el sistema de extracción, así como la caja apantalladora, en términos de sus dimensiones con respecto al origen del sistema coordinado empleado.

$U(i, j) = V_1 ; \rho_{Min_1} \leq i \leq \rho_{Máx_1} ; z_{Min_1} \leq j \leq z_{Máx_1}$. Para el primer electrodo.

$U(i, j) = V_2 ; \rho_{Min_2} \leq i \leq \rho_{Máx_2} ; z_{Min_2} \leq j \leq z_{Máx_2}$. Para el segundo electrodo. (6.7)

$U(i, j) = V_3 ; \rho_{Min_3} \leq i \leq \rho_{Máx_3} ; z_{Min_3} \leq j \leq z_{Máx_3}$. Para el tercer electrodo.

$U(i, j) = V_C ; \rho_{Min_c} \leq i \leq \rho_{Máx_c} ; z_{Min_c} \leq j \leq z_{Máx_c}$. Para la caja apantalladora.

Naturalmente, en el programa final las dimensiones de los electrodos con respecto al sistema coordinado empleado y los potenciales a los que están sujetos son variables de entrada controlables.

6.2 MODIFICACIÓN DE LA ECUACIÓN DE LAPLACE PARA EVITAR LA SINGULARIDAD EN $\rho = 0$.

Partiendo de la ecuación (6.4), es posible indexar los potenciales en los diferentes puntos de la malla elemental utilizando -como es usual- caracteres latinos y resolver para el potencial en el punto nodal (de sub-índice cero, que es removido) de la siguiente manera:

$$U(i, j) = \frac{U(i+1, j) \left[\frac{1}{(\Delta\rho)^2} + \frac{1}{\rho_0 \Delta\rho} \right] + U(i-1, j) \left[\frac{1}{(\Delta\rho)^2} - \frac{1}{\rho_0 \Delta\rho} \right] + \frac{U(i, j+1)}{(\Delta z)^2} + \frac{U(i, j-1)}{(\Delta z)^2}}{2 \left[\frac{1}{(\Delta\rho)^2} + \frac{1}{(\Delta z)^2} \right]} \quad (6.8)$$

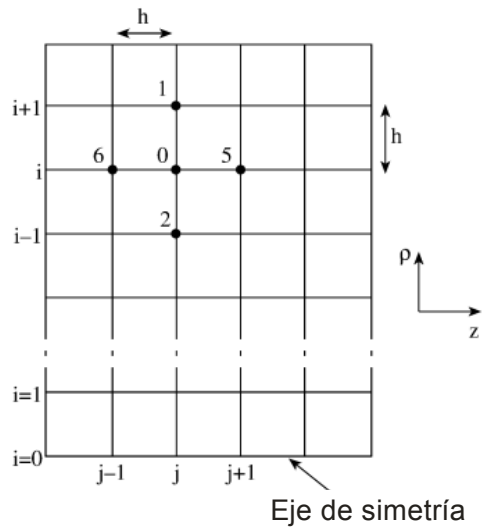
Esta ecuación por supuesto permite obtener el potencial de un nodo cualquiera de la malla en términos del potencial en los nodos vecinos. Si los pasos o

incrementos son iguales ($\Delta\rho = \Delta z = h$) y se tiene en cuenta que $\rho_0 = ih$ la ecuación (6.7) puede reescribirse:

$$U(i, j) = \frac{1}{4} \left[U(i, j-1) + U(i, j+1) + \left(\frac{2i-1}{2i} \right) U(i-1, j) + \left(\frac{2i+1}{2i} \right) U(i+1, j) \right] \quad (6.9)$$

Puede notarse que para los puntos de la malla con coordenada radial nula (puntos a lo largo del eje z) la ecuación se indetermina. Esta singularidad puede removerse considerando que por razones de simetría $U(\Delta\rho, z_0) = U(-\Delta\rho, z_0)$. Véase la Figura 13.

Figura 13. Malla para un sistema axialmente simétrico ([12]).



Fuente. El autor

Ello implica que $\left. \frac{\partial U(\rho, z)}{\partial \rho} \right|_{\rho=0} = 0$. Aplicando la regla de L'Hôpital para el cociente entre $\left. \frac{\partial U(\rho, z)}{\partial \rho} \right|_{\rho=0} = 0$ y $\rho_0 = 0$, que no es otra cosa que el primer término de la ecuación de Laplace, -ecuación (6.2)- se tiene:

$$\lim_{\rho_0 \rightarrow 0} \frac{\left. \frac{\partial U(\rho, z)}{\partial \rho} \right|_{\rho_0}}{\rho_0} = \left. \frac{\partial^2 U(\rho, z)}{\partial \rho^2} \right|_{\rho_0} \quad (6.10)$$

De manera que para los puntos axiales la ecuación de Laplace debe reemplazarse por:

$$\nabla^2 U = 2 \frac{\partial^2 U}{\partial \rho^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial z^2} = 0 \quad (6.11)$$

Que esquematizada por diferencias finitas resulta:

$$U(0, j) = \frac{1}{6} [U(0, j-1) + U(0, j+1) + 4U(1, j)] \quad (6.12)$$

6.3 ALGORITMO PARA RESOLVER LA ECUACIÓN DE LAPLACE

Las ecuaciones (6.8) y (6.11) son el núcleo del algoritmo que se implementó en FORTRAN para resolver la ecuación de Laplace. Lo que resta para desarrollar el algoritmo es asociarles índices de iteración (m) , (n) , e iterarlas computacionalmente hasta que la solución lograda para cada una de ellas a partir de las condiciones de frontera difiera de una iteración a otra en un valor que se tenga como tolerancia permitida. Con el índice de iteración resultan:

$$U^{(m)}(i, j) = \frac{1}{4} \left[U^{(m)}(i, j-1) + U^{(m)}(i, j+1) + \left(\frac{2i-1}{2i} \right) U^{(m)}(i-1, j) + \left(\frac{2i+1}{2i} \right) U^{(m)}(i+1, j) \right] \quad (6.13)$$

$$U^{(n)}(0, j) = \frac{1}{6} [U^{(n)}(0, j-1) + U^{(n)}(0, j+1) + 4U^{(n)}(1, j)] \quad (6.14)$$

De esta manera, $U^{(m)}(i, j)$ será la solución para $i \neq 0, \forall j$ y $U^{(n)}(0, j)$ la solución para $i=0, \forall j$ sí y sólo sí al terminar la iteración número (m) y (n) se tiene simultáneamente que:

$$U^{(m)}(i, j) - U^{(m-1)}(i, j) \leq Tol. \quad (6.15)$$

$$U^{(n)}(0, j) - U^{(n-1)}(0, j) \leq Tol. \quad (6.16)$$

Lo que equivale a decir que las soluciones se tienen cuando los potenciales se estabilizan a la precisión que pongamos como tolerancia. Una vez obtenido el potencial, las componentes del campo eléctrico en la dirección radial y axial pueden ser fácilmente obtenidas a su vez mediante su gradiente. El esquema en diferencias finitas que aproxima el gradiente es el siguiente:

$$E_z(i, j) = - \left[\frac{U(i, j+1) - U(i, j-1)}{2\Delta z} \right] \quad (6.17)$$

$$E_\rho(i, j) = - \left[\frac{U(i+1, j) - U(i-1, j)}{2\Delta \rho} \right] \quad (6.18)$$

Cabe anotar que en el programa final implementado en FORTRAN, la tolerancia es una variable de entrada completamente controlable. Se consideró que una tolerancia del orden de $10^{-7} V$ resultaría adecuada para determinar en qué momento la solución de la ecuación de Laplace para el potencial se habría estabilizado lo suficientemente como para tomarla como definitiva.

7. CAMPO ELÉCTRICO AUTOCONJUGADO

El segundo elemento a considerar en relación con el movimiento de los iones provenientes del plasma confinado es que deben interactuar con la configuración espacio-temporal del campo eléctrico atribuible a sí mismos, eso es, el campo eléctrico propio o autoconjugado, también llamado autocampo (eléctrico). Para hallar este campo eléctrico autoconjugado es necesario resolver la ecuación de Poisson para el potencial autoconjugado que le da origen, que para distinguirlo del potencial eléctrico externo mencionado en el capítulo anterior, llamamos $U_{Aut.}$. Para hallar este potencial no es necesario utilizar la ecuación de Poisson en coordenadas cilíndricas de acuerdo a la geometría empleada en el capítulo anterior, puesto que en este contexto específico no son los electrodos los que configuran condiciones de contorno (de Dirichlet) sino las paredes de la caja apantalladora. Lo que sí se considera es que cuando una partícula (ión) toca un electrodo o las paredes de la caja apantalladora se ve absorbida inmediatamente. Computacionalmente, esto consideró al devolver a la partícula a la posición de partida cada vez que eso ocurra.

Se requiere resolver entonces la ecuación de Poisson en coordenadas cartesianas:

$$\nabla^2 U_{Aut.}(x, y, z, t) = \frac{\partial^2 U_{Aut.}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U_{Aut.}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 U_{Aut.}}{\partial z^2} = -4\pi\rho(x, y, z, t) \quad (7.1)$$

Donde $\rho(x, y, z, t)$ es la densidad (volumétrica) de carga que da cuenta de la carga presente en los propios iones. De entrada ésta se asume uniforme en un instante dado, lo que no le resta demasiada generalidad a nuestro problema puesto que lo que interesa en este trabajo es la consideración de los elementos concernientes a la formación de un haz de iones y no tanto la naturaleza de la

distribución de carga del plasma confinado. Este último es otro trabajo de investigación en proceso perteneciente también al FITEK de la UIS.

7.1 MÉTODO PARTÍCULA EN MALLA (PM) Y PARTÍCULA EN CELDA (PIC) PARA MODELAR UN SISTEMA DE MUCHAS PARTÍCULAS Y ENCONTRAR UN ESTIMATIVO DE LA DENSIDAD VOLUMÉTRICA DE CARGA.

Para nuestro problema planteado, es claro que formalmente la densidad de carga para un instante dado en el miembro derecho de la ecuación (7.1) es una sumatoria de las cargas por unidad de volumen presentes en el haz de iones contemplado. Matemáticamente podemos calcularla, en ese instante, como la suma total de cargas dividida por el volumen en el que están distribuidas. Así:

$$\rho(x, y, z, t) = \frac{\sum_i q_i}{V_0} \quad (7.2)$$

Donde la suma debe hacerse a lo largo del número de iones (protones) considerados. Como la carga de cada protón es e , si V_0 en la ecuación (7.2) es la unidad de volumen del sistema CGS (1 cm^3), la densidad volumétrica de carga resulta en función de la densidad volumétrica de los protones o iones ($n = \left[\frac{\# \text{ de iones}}{\text{cm}^3} \right]$). Así: $\rho(x, y, z, t) = ne$. Es claro también que la suma debe practicarse a lo largo de un gran número de iones, puesto que el volumen de un protón asumido de forma esférica es aproximadamente de $3.3510 \times 10^{-41} \text{ cm}^3$.

De manera que para poder resolver la ecuación de Poisson en estas circunstancias es necesario usar una técnica que permita representar un número muy grande de iones mediante un conjunto más manejable. Para los efectos de este trabajo n puede ser del orden de $10^{12} \frac{\text{iones}}{\text{cm}^3}$, un número apreciablemente grande. Esto se hace pensando, además de la ecuación de Poisson, en la

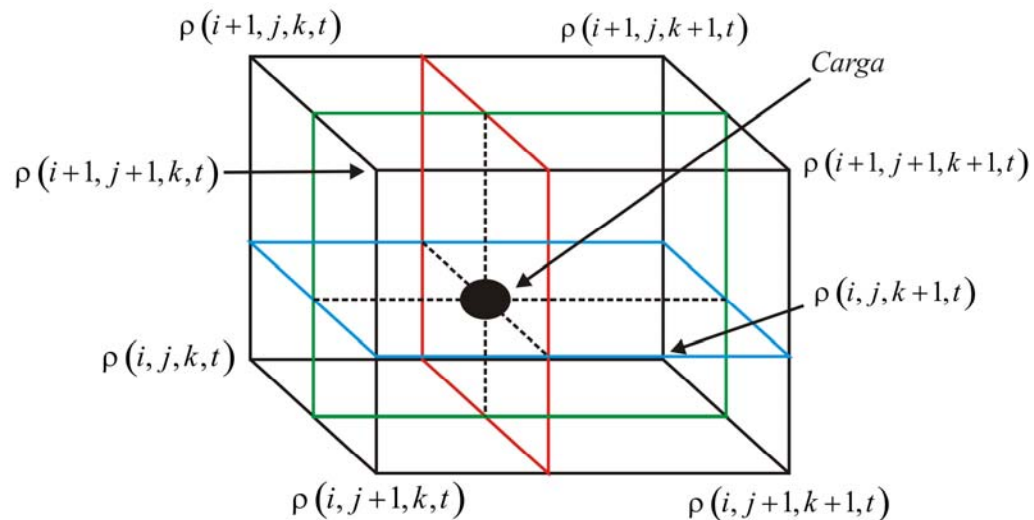
resolución de la ecuación de Newton-Lorentz para cada uno de estos iones, tema que nos ocupará en un capítulo posterior. Una de las técnicas que se puede emplear para sortear esta dificultad se denomina el método de la “partícula en malla” combinado con el de la “partícula en celda”.

7.1.1 Método “partícula en malla” - PM. Este método consiste en representar un número grande de iones mediante una macropartícula, i. e. un “macro-ión”. En nuestro caso, el número de macropartículas empleadas en el algoritmo y posteriormente en el programa en FORTRAN es de 10^6 y es una variable de programación modificable. Por otra parte, el número de iones representados por cada macropartícula es una variable de entrada del programa completamente controlable. Una de las razones claves por las que el método de la partícula en malla es tan útil es que la ecuación de Newton-Lorentz de una macropartícula es idéntica a la ecuación de Newton-Lorentz de todas y cada una de las partículas que ella representa. Por supuesto la solución de este conjunto de ecuaciones de Newton-Lorentz es lo que requerimos para poder conocer las trayectorias de los iones.

7.1.2 Método “partícula en celda”- PIC. Trabajando en coordenadas cartesianas, se considera entonces que las macropartículas se encuentran ubicadas en alguna de las celdas en forma de paralelepípedo que componen una malla 3-D cuya definición en el programa en FORTRAN implementado es una variable de programación modificable. Se toma una malla con definición de $79 \times 79 \times 53$ nodos en las direcciones x, y, z respectivamente. Recordando que el número de macropartículas a emplear es de 10^6 , un corto cálculo da como resultado alrededor de tres macropartículas por cada celda elemental de la malla en el caso que estuviesen distribuidas por sobre todo el volumen disponible, lo que se corresponde con los requerimientos computacionales del método “partícula en celda” que necesita al menos tres macropartículas por celda.

A continuación la celda se divide en octantes (Véase la Figura 14), y se efectúa un procedimiento de ponderación de primer orden para asignar valores de carga a los nodos de la malla. Este procedimiento consiste asignar a un nodo dado (vértice del paralelepípedo), una cantidad de carga proporcional al volumen del octante que le es opuesto. Para realizar este ponderado es necesario entonces emplear coordenadas de malla tales que cada nodo pueda expresarse como una tripleta de enteros -desde el punto de vista espacial- y además considerar unitario el volumen de cada celda.

Figura 14. Celda elemental malla de macropartículas. División del volumen en octantes para ponderado de la carga.



Fuente. El autor

Los pasos para la malla de las macropartículas se definen entonces:

$$\Delta x = \frac{(x_{M\acute{a}x.} - x_{M\acute{i}n.})}{(\# \text{ nodos en } x) - 1} ; \Delta y = \frac{(y_{M\acute{a}x.} - y_{M\acute{i}n.})}{(\# \text{ nodos en } y) - 1} ; \Delta z = \frac{(z_{M\acute{a}x.} - z_{M\acute{i}n.})}{(\# \text{ nodos en } z) - 1} \quad (7.3)$$

Donde $x_{M\acute{i}n.}, x_{M\acute{a}x.}, y_{M\acute{i}n.}, y_{M\acute{a}x.}, z_{M\acute{i}n.}, z_{M\acute{a}x.}$ son en este contexto las dimensiones de la caja apantalladora. Los diferentes números de nodos y las dimensiones de la caja apantalladora se eligen de manera tal que Δx , Δy , y Δz son iguales. En la malla

así definida, se tendrá que $\rho = \rho(x, y, z, t) = \rho(i, j, k, t)$. Ahora bien, la ponderación de primer orden para la carga se realiza de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 \rho(i, j, k, t) &= \rho_0(i, j, k, t - \Delta t) + V_8 \\
 \rho(i+1, j, k, t) &= \rho_0(i+1, j, k, t - \Delta t) + V_7 \\
 \rho(i+1, j+1, k, t) &= \rho_0(i+1, j+1, k, t) + V_5 \\
 \rho(i, j+1, k, t) &= \rho_0(i, j+1, k, t - \Delta t) + V_6 \\
 \rho(i, j, k+1, t) &= \rho_0(i, j, k+1, t - \Delta t) + V_4 \\
 \rho(i+1, j, k+1, t) &= \rho_0(i+1, j, k+1, t - \Delta t) + V_3 \\
 \rho(i+1, j+1, k+1, t) &= \rho_0(i+1, j+1, k+1, t - \Delta t) + V_1 \\
 \rho(i, j+1, k+1, t) &= \rho_0(i, j+1, k+1, t - \Delta t) + V_2
 \end{aligned} \tag{7.4}$$

Donde las densidades $\rho_0(u, v, w, t - \Delta t)$ son las densidades de los nodos acumuladas ó existentes al momento del paso de tiempo inmediatamente anterior. Cada elemento de volumen en la zona de interfase entre el plasma y el sistema de extracción tiene un valor inicial de densidad de carga, que depende de las dimensiones iniciales que se elijan para el haz, las cuales son variables de entrada completamente controlables implementadas en el código del programa final en FORTRAN. Por otra parte, los términos V_m representan los volúmenes de los octantes asociados a los nodos respectivos. Estos volúmenes se calculan de la siguiente manera. Sea (Véase la Figura 14): $dx(t) = x_n(t) - i$: Longitud del segmento entre el eje x , con origen en el nodo ubicado en (i, j, k, t) de la malla para las macropartículas y la n -ésima macropartícula en el instante t , $dy(t) = y_n(t) - j$: Longitud del segmento entre el eje y , con origen en el nodo ubicado en (i, j, k, t) de la malla para las macropartículas y la n -ésima macropartícula en el instante t , $dz(t) = z_n(t) - k$: Longitud del segmento entre el eje z , con origen en el nodo ubicado en (i, j, k, t) de la malla para las

macropartículas y la n -ésima macropartícula en el instante t , $dy'(t) = 1 - dx(t)$: Longitud del segmento entre el eje y' , con origen en el nodo ubicado en $(i+1, j+1, k+1, t)$ de la malla para las macropartículas y la n -ésima macropartícula en el instante t , $dx'(t) = 1 - dy(t)$: Longitud del segmento entre el eje x' , con origen en el nodo ubicado en $(i+1, j+1, k+1, t)$ de la malla para las macropartículas y la n -ésima macropartícula en el instante t , $dz'(t) = 1 - dz(t)$: Longitud del segmento entre el eje z' , con origen en el nodo ubicado en $(i+1, j+1, k+1, t)$ de la malla para las macropartículas y la n -ésima macropartícula en el instante t .

Teniendo presente lo anterior, se definen los volúmenes de los octantes de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
 V_1 &= [dx(t) \times dy(t) \times dz(t)] \frac{ne}{V} \\
 V_2 &= [dy'(t) \times dy(t) \times dz(t)] \frac{ne}{V} \\
 V_3 &= [dx(t) \times dy'(t) \times dz(t)] \frac{ne}{V} \\
 V_4 &= [dx'(t) \times dy'(t) \times dz(t)] \frac{ne}{V} \\
 V_5 &= [dx(t) \times dy(t) \times dz'(t)] \frac{ne}{V} \\
 V_6 &= [dy(t) \times dy'(t) \times dz'(t)] \frac{ne}{V} \\
 V_7 &= [dx'(t) \times dy(t) \times dz'(t)] \frac{ne}{V} \\
 V_8 &= [dx'(t) \times dy'(t) \times dz'(t)] \frac{ne}{V}
 \end{aligned} \tag{7.5}$$

Donde V es el volumen de la celda elemental de la malla de macropartículas. Este tipo de ponderado de primer orden para la distribución de carga permite entonces asignarle un valor de densidad volumétrica de carga a todos y cada uno de los nodos de la malla para las macropartículas.

7.2 CÁLCULO DEL CAMPO ELÉCTRICO AUTOCONJUGADO. UTILIZACIÓN DE UN ALGORITMO/CÓDIGO DESARROLLADO PREVIAMENTE EN FORTRAN

Para encontrar el campo eléctrico autoconjugado es necesario resolver la ecuación de Poisson (7.2) en diferencias finitas.

En analogía a como se explica en el capítulo dedicado al campo eléctrico externo, al plantear una malla elemental para coordenadas cartesianas y una aproximación de segundo orden estándar de la ecuación de Poisson se tiene:

$$\nabla^2 U_{Aut.}(i, j, k, t) = \frac{\Delta^2 U_{Aut.}}{\Delta x^2} + \frac{\Delta^2 U_{Aut.}}{\Delta y^2} + \frac{\Delta^2 U_{Aut.}}{\Delta z^2} \quad (7.6)$$

Esto es;

$$\begin{aligned} & \frac{U_{Aut.}(i, j, k+2, t) - 2U_{Aut.}(i, j, k, t) + U_{Aut.}(i, j, k-2, t)}{4\Delta z^2} + \frac{U_{Aut.}(i+2, j, k, t) - 2U_{Aut.}(i, j, k, t) + U_{Aut.}(i-2, j, k, t)}{4\Delta x^2} \\ & + \frac{U_{Aut.}(i, j+2, k, t) - 2U_{Aut.}(i, j, k, t) + U_{Aut.}(i, j-2, k, t)}{4\Delta z^2} = -4\pi\rho(i, j, k, t) \end{aligned} \quad (7.7)$$

Esta ecuación se resuelve algorítmicamente empleando un código pre-desarrollado en FORTRAN a nuestra disposición basado en el método de la transformada rápida de Fourier, esquema HODIE –High Order Difference Approximation with Identity Expansion- de diferencias finitas [20], [21]. El programa, denominado DFPS3H, resuelve la ecuación de Poisson en un dominio rectangular o topológicamente rectangular en el sistema de coordenadas elegido y

se puede utilizar como subrutina en llamado del programa general de la simulación. En efecto, el programa hace parte de las subrutinas de FORTRAN presentes en la librería IMSLM.

7.2.1 Condiciones de frontera. Las condiciones de frontera para la ecuación de Poisson en aras de resolver el campo eléctrico autoconjugado son por supuesto de tipo Dirichlet en relación con las paredes de la caja apantalladora. En términos de sus dimensiones con respecto al origen del sistema coordenado empleado resultan:

$$U_{Aut.}(i, j, k) = 0 ; i = 0 ; 0 \leq j \leq 79 ; 0 \leq k \leq 53 ; i = 79 ; 0 \leq j \leq 79 ; 0 \leq k \leq 53 .$$

$$U_{Aut.}(i, j, k) = 0 ; 0 \leq i \leq 79 ; j = 0 ; 0 \leq k \leq 53 ; 0 \leq i \leq 79 ; j = 79 ; 0 \leq k \leq 53 \quad (7.8)$$

$$U_{Aut.}(i, j, k) = 0 ; 0 \leq i \leq 79 ; 0 \leq j \leq 79 ; k = 0 ; 0 \leq i \leq 79 ; 0 \leq j \leq 79 ; k = 53 .$$

7.2.2 Cálculo del campo eléctrico autoconjugado a partir del gradiente del potencial autoconjugado. Con el potencial eléctrico autoconjugado puede obtenerse inmediatamente el campo eléctrico autoconjugado, hallando su gradiente con signo menos, debidamente aproximado por diferencias finitas (aproximación de orden dos). Explícitamente:

$$\begin{aligned} E_{Aut.x}(i, j, k, t) &= -\frac{U_{Aut.}(i+1, j, k, t) - U_{Aut.}(i-1, j, k, t)}{2\Delta x} \\ E_{Aut.y}(i, j, k, t) &= -\frac{U_{Aut.}(i, j+1, k, t) - U_{Aut.}(i, j-1, k, t)}{2\Delta y} \\ E_{Aut.z}(i, j, k, t) &= -\frac{U_{Aut.}(i, j, k+1, t) - U_{Aut.}(i, j, k-1, t)}{2\Delta z} \end{aligned} \quad (7.9)$$

8. CAMPO MAGNÉTICO AUTOCONJUGADO

El tercer elemento a considerar en relación con el movimiento de los iones provenientes del plasma confinado es que deben interactuar con la configuración espacio-temporal del campo magnético atribuible a sí mismos, eso es, el campo magnético propio o autoconjugado, también llamado autocampo (magnético). Para hallar este campo magnético autoconjugado, afortunadamente puede hacerse uso de los resultados anteriores, esto es, específicamente puede obtenerse a partir del campo eléctrico autoconjugado del que se habló en el capítulo anterior.

El campo magnético autoconjugado puede obtenerse a partir del campo eléctrico autogenerado empleando la ley de Faraday. En el sistema de unidades que se ha venido usando, el CGS, ésta puede escribirse:

$$\nabla \times \vec{E}_{Aut.} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = -\left(\frac{\partial E_{Aut.z}}{\partial y} - \frac{\partial E_{Aut.y}}{\partial z} \right) \hat{i} + \left(\frac{\partial E_{Aut.z}}{\partial x} - \frac{\partial E_{Aut.x}}{\partial z} \right) \hat{j} - \left(\frac{\partial E_{Aut.y}}{\partial x} - \frac{\partial E_{Aut.x}}{\partial y} \right) \hat{k} \quad (8.1)$$

Donde c es por supuesto la velocidad de la luz. A este respecto el medio considerado se asume vacío puesto que el sistema de extracción, delimitado por la caja apantalladora, debe estarlo. En diferencias finitas la anterior ecuación puede aproximarse para cada una de las componentes del campo magnético autoconjugado (aproximación de segundo orden) mediante:

$$B_{Aut.x}(i, j, k, t + \Delta t) = B_{Aut.x}(i, j, k, t) + \Delta t c \left[\frac{E_{Aut.y}(i, j, k+1, t) - E_{Aut.y}(i, j, k-1, t)}{2\Delta z} - \frac{E_{Aut.z}(i, j+1, k, t) - E_{Aut.z}(i, j-1, k, t)}{2\Delta y} \right] \quad (8.2)$$

$$B_{Aut.y}(i, j, k, t + \Delta t) = B_{Aut.y}(i, j, k, t) + \Delta t c \left[\frac{E_{Aut.z}(i+1, j, k, t) - E_{Aut.z}(i-1, j, k, t)}{2\Delta x} - \frac{E_{Aut.x}(i, j, k+1, t) - E_{Aut.x}(i, j, k-1, t)}{2\Delta z} \right] \quad (8.3)$$

$$\begin{aligned}
& B_{Aut.y} (i, j, k, t + \Delta t) = \\
& B_{Aut.y} (i, j, k, t) + \Delta t c \left[\frac{E_{Aut.x} (i, j+1, k, t) - E_{Aut.x} (i, j-1, k, t)}{2\Delta y} - \frac{E_{Aut.y} (i+1, j, k, t) - E_{Aut.y} (i-1, j, k, t)}{2\Delta x} \right] \quad (8.4)
\end{aligned}$$

9. RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN

Al correr la simulación para diferentes configuraciones geométricas y rangos de valores para las variables en juego se tuvieron en mente los objetivos planteados al comienzo de este trabajo, que eran: asegurar que realmente el sistema planteado extrajera los iones, y asimismo, verificar que efectivamente el sistema permitiera la formación de un haz de iones.

Las variables de entrada de interés físico presentes en el programa y completamente modificables al correr la simulación son las siguientes:

- a) Dimensiones de la caja apantalladora del sistema de extracción (*cm*). [x ó $y_{Mín.}$, x ó $y_{Máx.}$, $z_{Mín.}$, $z_{Máx.}$].
- b) Dimensiones de los tres electrodos cilíndricos huecos componentes del sistema de extracción (*cm*). [x ó $y_{Mín.1}$, x ó $y_{Máx.1}$, $z_{Mín.1}$, $z_{Máx.1}$, x ó $y_{Mín.2}$, x ó $y_{Máx.2}$, $z_{Mín.2}$, $z_{Máx.2}$, x ó $y_{Mín.3}$, x ó $y_{Máx.3}$, $z_{Mín.3}$, $z_{Máx.3}$].
- c) Potenciales fijos a los que están sujetos los tres electrodos cilíndricos huecos componentes del sistema de extracción y la caja apantalladora (*Volts*). [V_1 , V_2 , V_3 , V_C].
- d) Tolerancia permisible para la solución del potencial y el campo eléctrico externo debido a los tres electrodos cilíndricos huecos del sistema de extracción. (Potencial y campo eléctricos externos).

- e) Dimensiones iniciales del haz en la interfase entre la cavidad de confinamiento del plasma y el sistema de extracción (*cm*). $[r_{0,haz.}, z_{0,haz.}]$. Donde

$$r_{0,haz.} = \sqrt{x_{0,haz.}^2 + y_{0,haz.}^2} .$$

- f) Energía de los iones en la región de interfase entre la cavidad de confinamiento para ellos y el sistema de extracción (*eV*).
- g) Factor para la división del paso elemental en el tiempo. Intervalo de tiempo elemental (*seg*).
- h) Número de partículas por macropartícula en la simulación.
- i) Número de ciclos computacionales elementales a transcurrir en la simulación entre la grabación de dos posiciones secuenciales en el tiempo para las partículas cargadas. Número de ciclos computacionales totales transcurridos en la simulación.
- j) Dimensiones de los tres (3) volúmenes cilíndricos de prueba para encontrar la efectividad del sistema de extracción, i. e., razón entre la densidad de corriente al inicio del haz y la densidad de corriente al final del haz (*cm*). Radio, ancho, inicio a la izquierda del primer volumen; radio, ancho, inicio a la derecha del segundo volumen, íbid tercer volumen. $r_1, \Delta z_1, z_{1-Mín.}, r_2, \Delta z_2, z_{2-Máx.}, r_3, \Delta z_3, z_{3-Máx.}$

Es de anotar que las trayectorias se truncan debido a que la simulación se corta después de un número limitado de ciclos computacionales elementales. Se tomó el número de 14.000 ciclos computacionales como referencia puesto que con $\Delta t = 2.74 \times 10^{-11}$ *seg* , al cabo de este número de ciclos la simulación alcanzaba una

situación estable. En consecuencia, algunas trayectorias quedan inconclusas por esta razón. Por otra parte, otras trayectorias inconclusas tienen origen en el hecho de que la simulación considera que si una partícula entra en contacto bien sea con uno de los electrodos del sistema de extracción o la caja apantalladora, se absorbe y computacionalmente se regresa al volumen asumido como inicial para el haz al inicio de la simulación.

Por otra parte, en relación con las variables de entrada j), para dar un estimativo de la efectividad del efecto focalizante del sistema de extracción se debe encontrar la relación entre las densidades de corriente al inicio y al final de la caja apantalladora del sistema de extracción. Por supuesto:

$$\vec{j} = \sum_i n_i q_i \vec{v}_i \quad (9.1)$$

Donde n_i es la concentración volumétrica del portador i-ésimo, q_i es la carga eléctrica del portador i-ésimo, y \vec{v}_i es la velocidad media del portador i-ésimo en el volumen considerado. En nuestro caso la ecuación resulta $j_z = nev_z = \frac{n_0 e \overline{v_z}}{\pi r_{0, haz}^2 z_{0, haz}}$ para el volumen asumido como inicial para el haz; donde n_0 es el número de iones en ese volumen y $\overline{v_z}$ debe ser consistente con una energía térmica de 10 eV .

Teniendo esto presente, para calcular la efectividad de la focalización se desarrolló un programa que -integrado al programa principal de la simulación- permite calcular la densidad de corriente en dos (2) volúmenes de muestreo en el instante computacional en que ésta termina, uno al inicio del sistema de extracción y otro al final. El programa encuentra la razón entre la densidad de corriente del segundo volumen y la del primero, estimando así la efectividad porcentual del sistema de extracción. Esto es:

$$\% Efect._1 = \left[\frac{\overline{en_2 v_{z,2}}}{\pi r_2^2 (z_{2-Max.} - \Delta z_2)} \right] \times 100 \quad (9.2)$$

El programa también calcula la razón porcentual entre las corrientes totales en los volúmenes de muestreo, cantidad que por supuesto también proporciona una idea de la efectividad del sistema de extracción. Esto es:

$$\% Efect._2 = \left[\frac{\overline{en_2 v_{z,2}} \times \pi r_2^2}{\pi r_2^2 (z_{2-Max.} - \Delta z_2)} \right] \times 100 \quad (9.3)$$

$$\left[\frac{\overline{en_1 v_{z,1}} \times \pi r_1^2}{\pi r_1^2 (z_{1-Min.} + \Delta z_1)} \right]$$

Cuando $\Delta z_1 = \Delta z_2$;

$$\% Efect._2 = \left[\frac{\overline{n_2 v_{z,2}}}{\overline{n_1 v_{z,1}}} \right] \times 100 \quad (9.4)$$

Finalmente, el programa calcula la razón entre la cantidad de partículas que parten del primer volumen de muestreo (n_1) y las que llegan al segundo (n_2), proporcionando una idea de la efectividad “óptica” del sistema de extracción. Óptica en el sentido de que en el estudio de la formación de haces se está interesado en que el sistema (ya sea de extracción ó focalización) pueda “focalizar” pero no desde un punto de vista óptico en donde las partículas se hacen converger a un punto, sino desde un punto de vista de física del plasma en donde las partículas se hagan converger a un área circular con cierto radio definido. De esta manera:

$$\% Efect._3 = \frac{n_2}{n_1} \times 100 \quad (9.5)$$

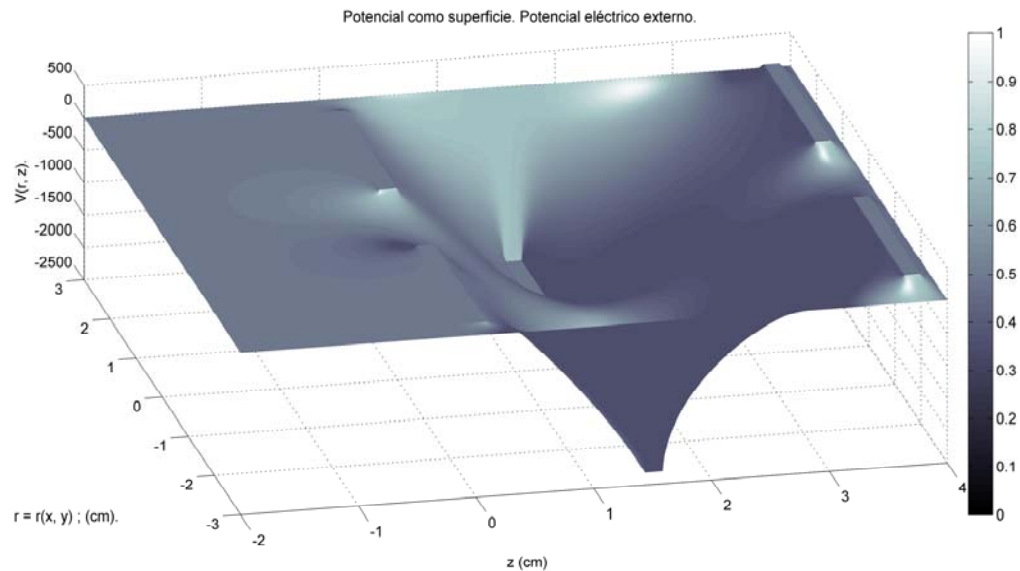
9.1 CONFIGURACIÓN I

Los valores para las diferentes variables de la simulación fueron los siguientes:

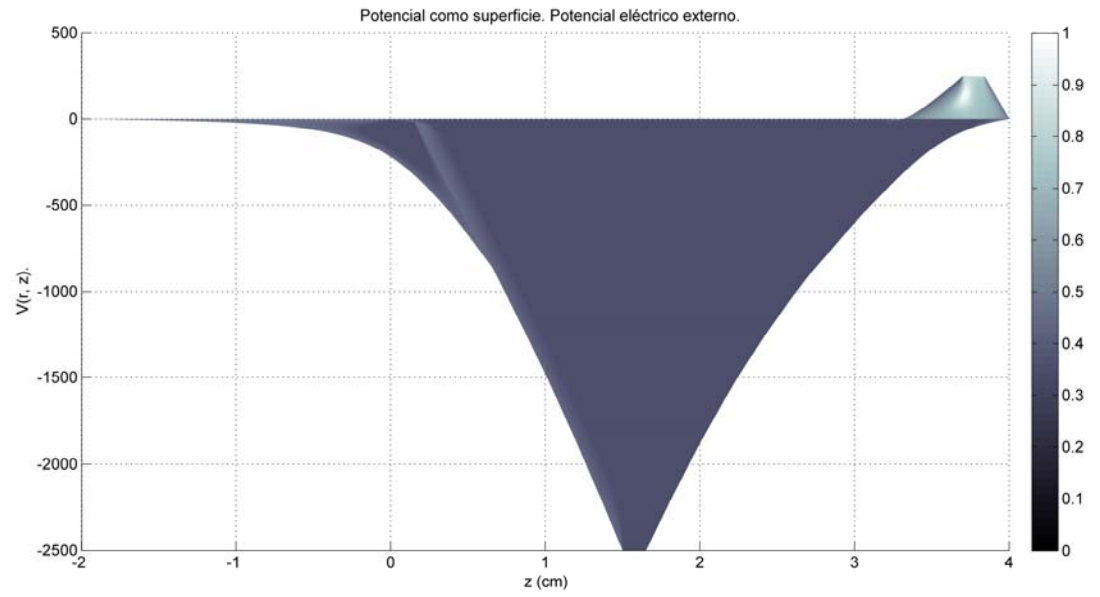
- a) -3.0, 3.0, -2.0, 4.0
- b) 0.7, 2.7, 0.0, 0.15, 1.0, 2.7, 1.5, 1.65, 0.7, 2.7, 3.7, 3.85
- c) 0.0, -2500.0, 250.0, 0.0
- d) $1.0 \text{EXP}(-7)$
- e) 0.69, 0.05
- f) 10
- g) $1.0 \text{EXP}(5)$; $\Delta t \approx 2.74 \times 10^{-11}$ seg .
- h) $1.0 \text{EXP}(6)$
- i) 1, 14000
- j)

	Dimensiones volúmenes de muestreo $r_1, \Delta z_1, z_{1-Min.}$ $r_2, \Delta z_2, z_{2-Max.}$	$\left(\frac{J_2}{J_1}\right) \times 100$	$\left(\frac{I_2}{I_1}\right) \times 100$	$\left(\frac{n_2}{n_1}\right) \times 100$
Set 1	0.69, 0.01, 0.01 0.69, 0.01, 3.99	6.5	6.5	6
Set 2	0.45, 0.01, 0.01 0.45, 0.01, 3.99	11.8	11.8	11
Set 3	0.3, 0.01, 0.16 0.3, 0.01, 3.99	61.5	61.5	60

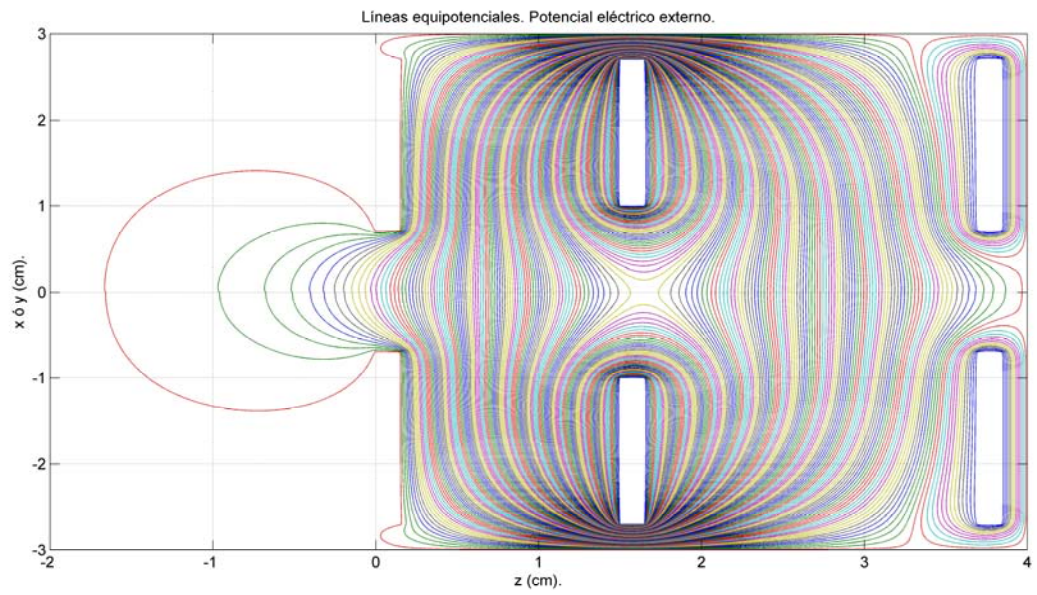
I) Potencial eléctrico externo.



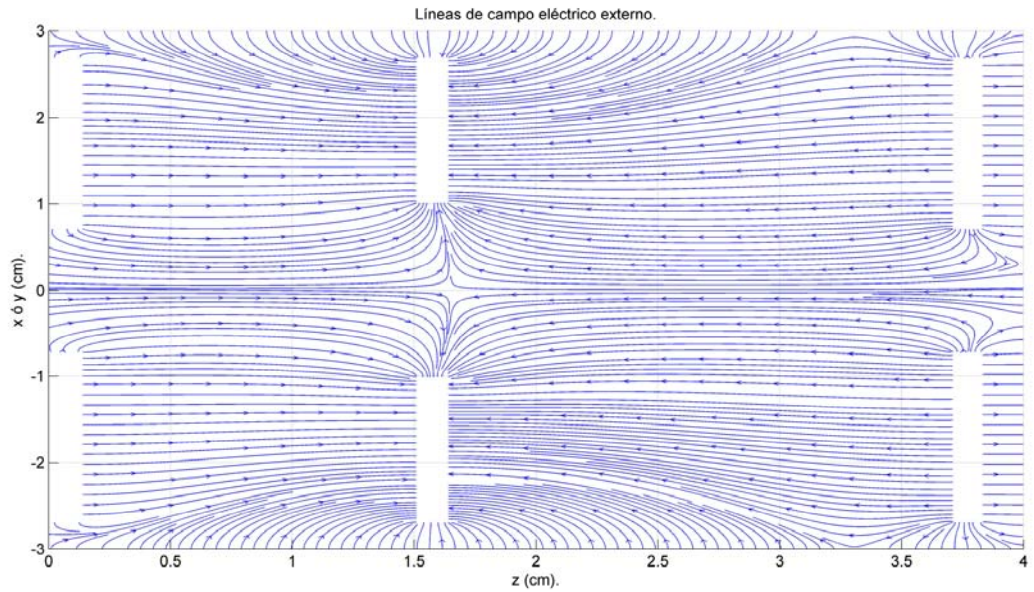
Vista potencial plano $V = V(r, z)$ Vs. z .



Líneas equipotenciales.

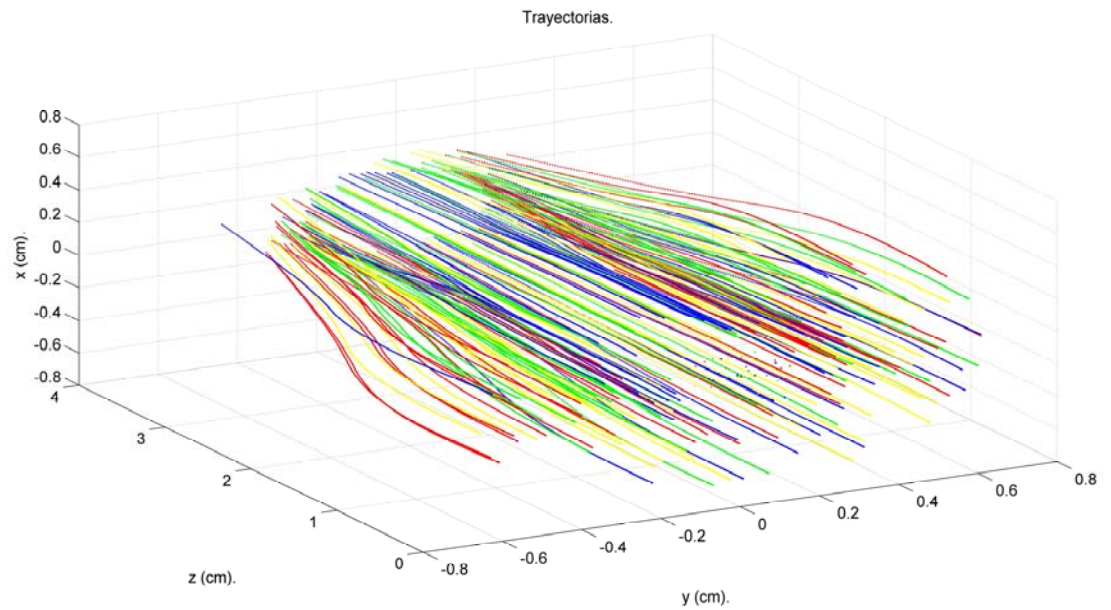


II) Líneas de campo eléctrico externo. La definición del lineado se ha disminuido para efectos visuales.

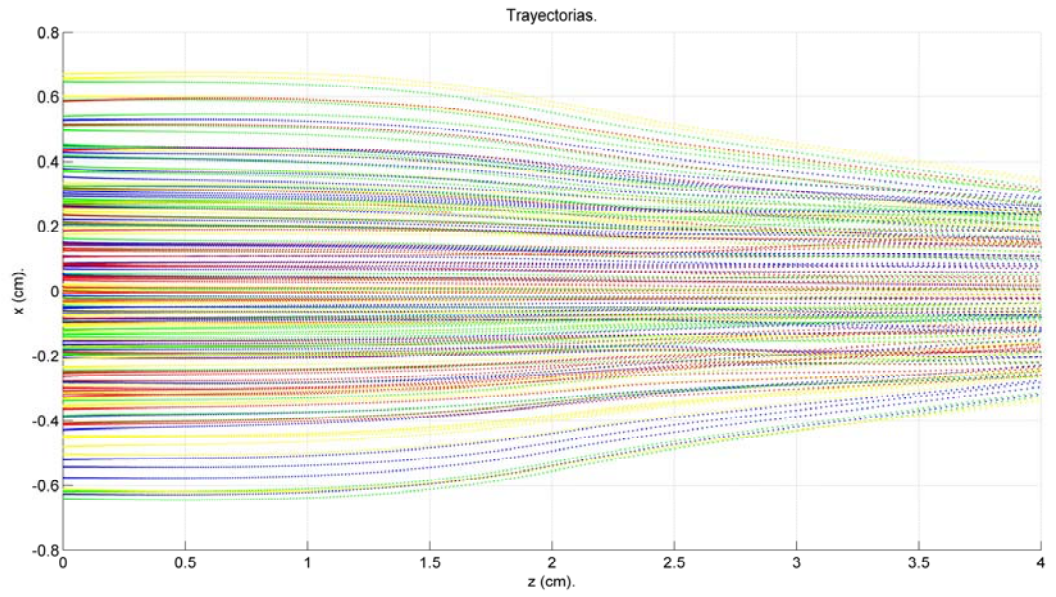


III) Trayectorias.

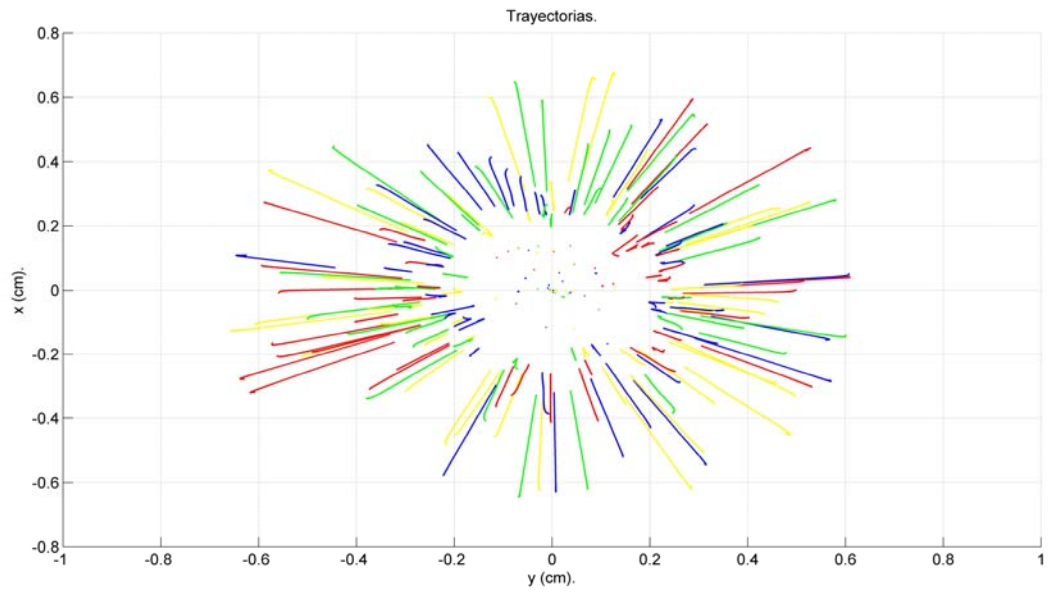
Vista general.



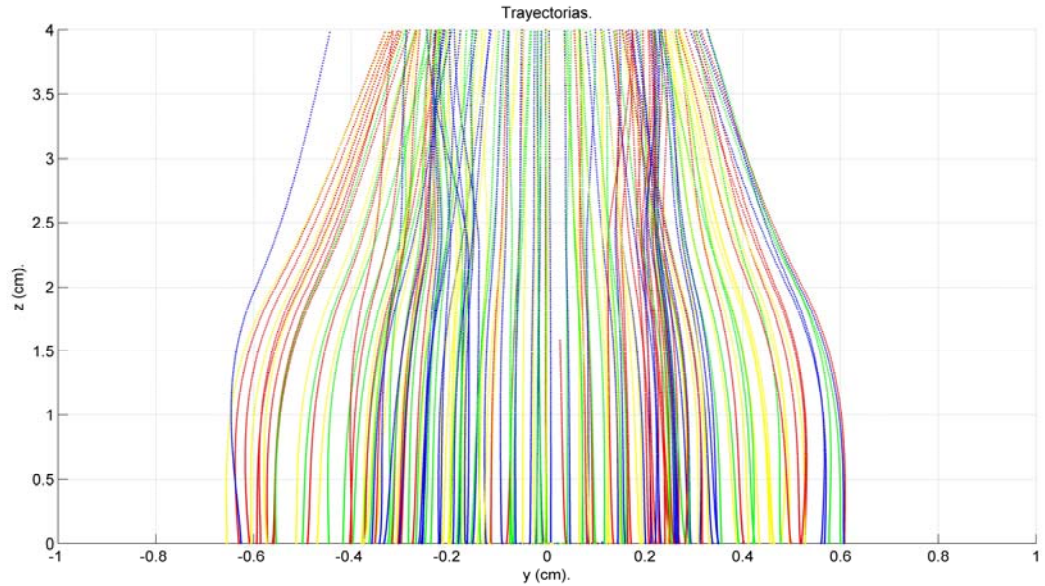
Vista plano x Vs. z.



Vista plano x Vs. y.



Vista plano z Vs. y.



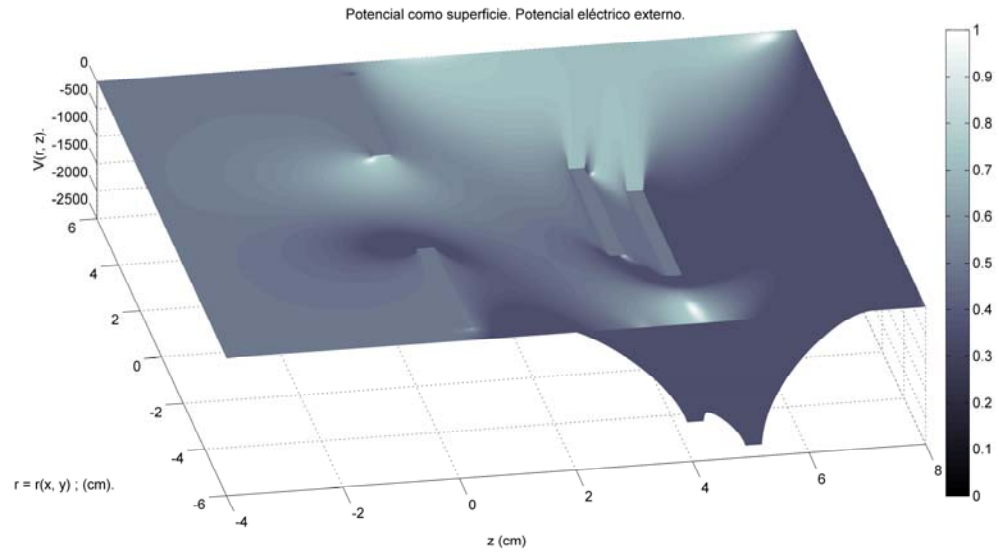
9.2 CONFIGURACIÓN II

Los valores para las diferentes variables de la simulación fueron los siguientes:

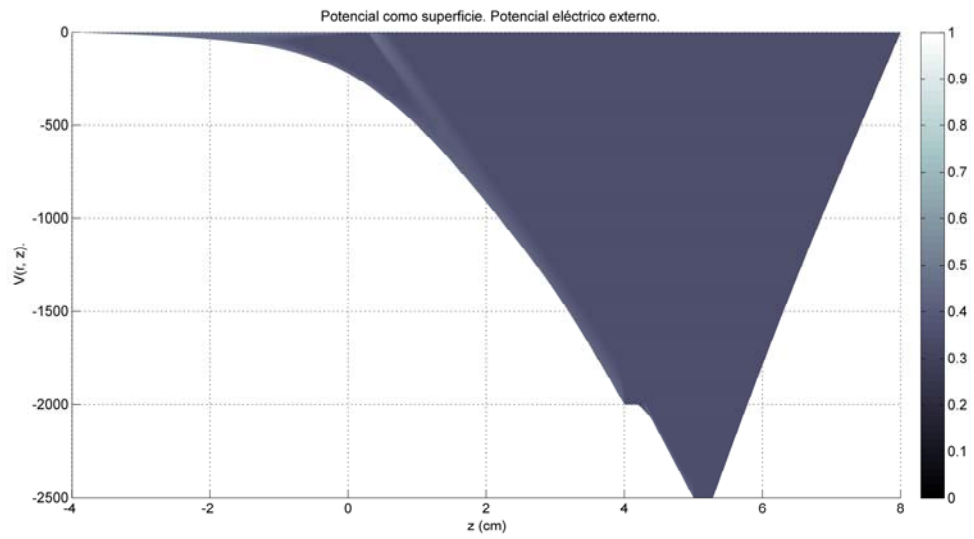
- a) -6.0, 6.0, -4.0, 8.0
- b) 2.0, 5.5, 0.0, 0.3, 1.7, 5.5, 4.0, 4.3, 1.5, 5.5, 5.0, 5.3
- c) 0.0, -2000.0, -2500.0, 0.0
- d) $1.0 \text{EXP}(-7)$
- e) 1.99, 0.1
- f) 10
- g) $1.0 \text{EXP}(5)$; $\Delta t \approx 2.74 \times 10^{-11}$ seg .
- h) $1.0 \text{EXP}(6)$
- i) 1, 14000
- j)

	Dimensiones volúmenes de muestreo $r_1, \Delta z_1, z_{1-Min.}$ $r_2, \Delta z_2, z_{2-Max.}$	$\left(\frac{J_2}{J_1}\right) \times 100$	$\left(\frac{I_2}{I_1}\right) \times 100$	$\left(\frac{n_2}{n_1}\right) \times 100$
Set 1	1.49, 0.01, 0.01 1.49, 0.01, 7.99	8.1	8.1	7
Set 2	0.45, 0.01, 0.01 0.45, 0.01, 7.99	65.9	65.9	62
Set 3	0.35, 0.01, 0.31 0.35, 0.01, 7.99	230.7	230.7	227

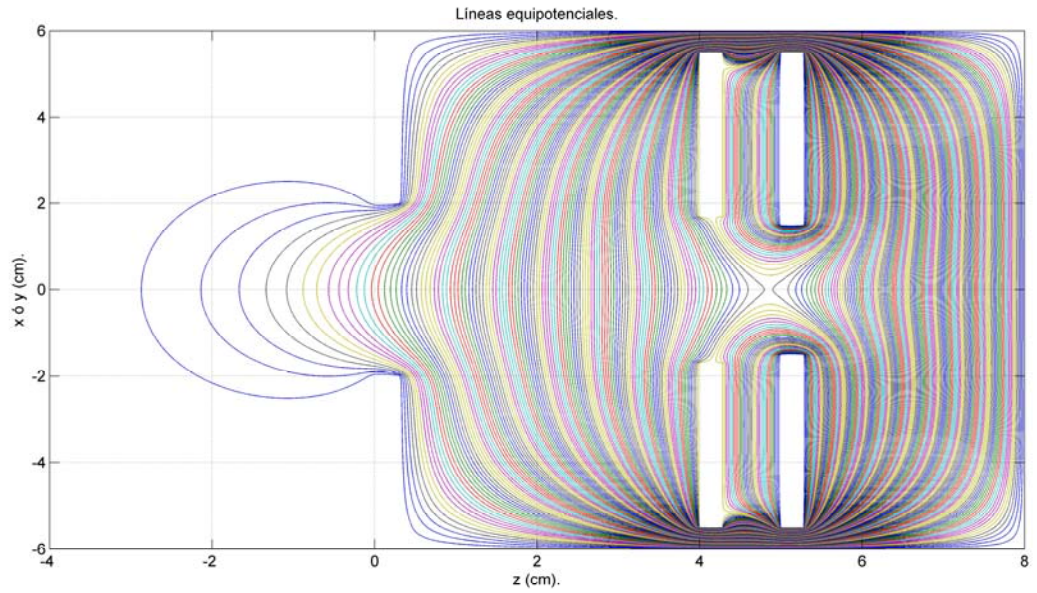
I) Potencial eléctrico externo.



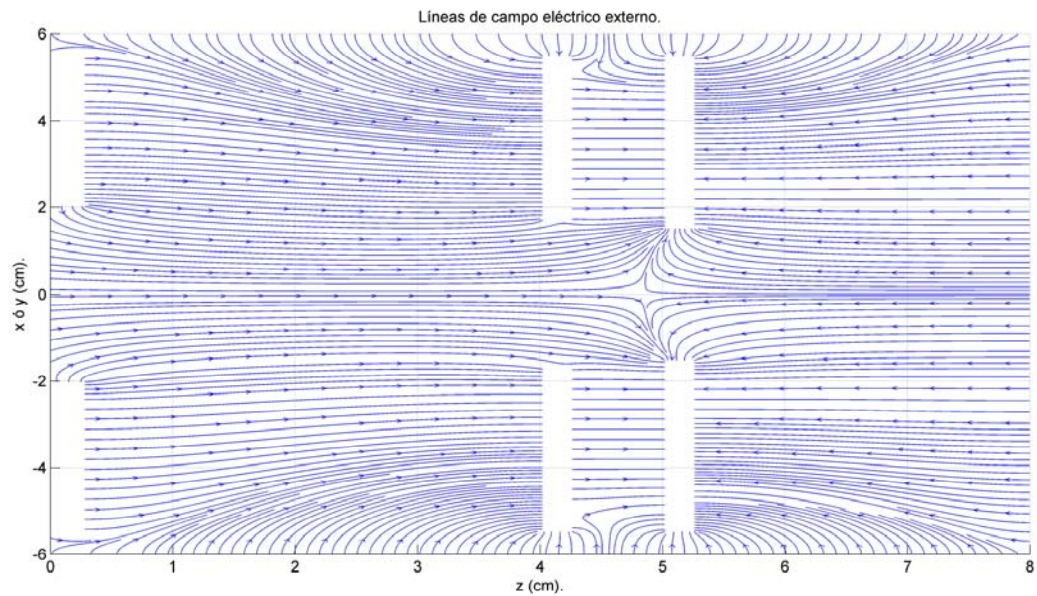
Vista potencial plano $V = V(r, z)$ Vs. z .



Líneas equipotenciales.

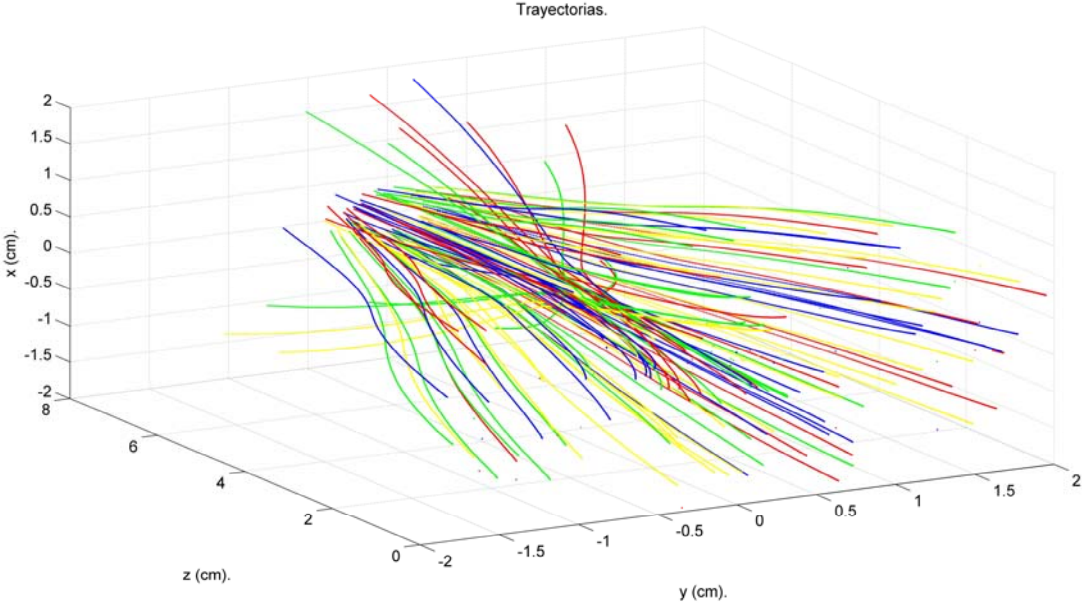


II) Líneas de campo eléctrico externo. La definición del lineado se ha disminuido para efectos visuales.

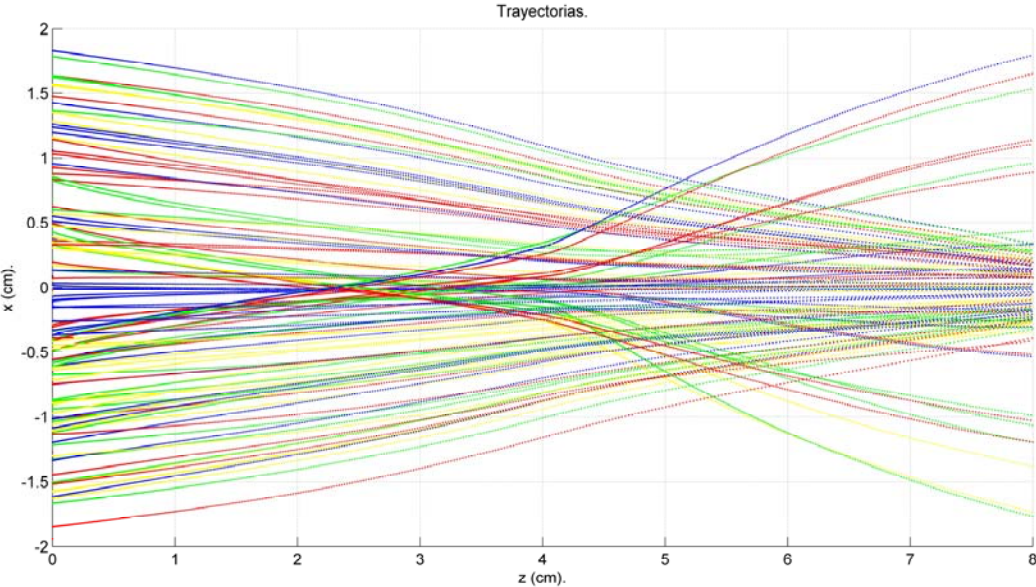


III) Trayectorias.

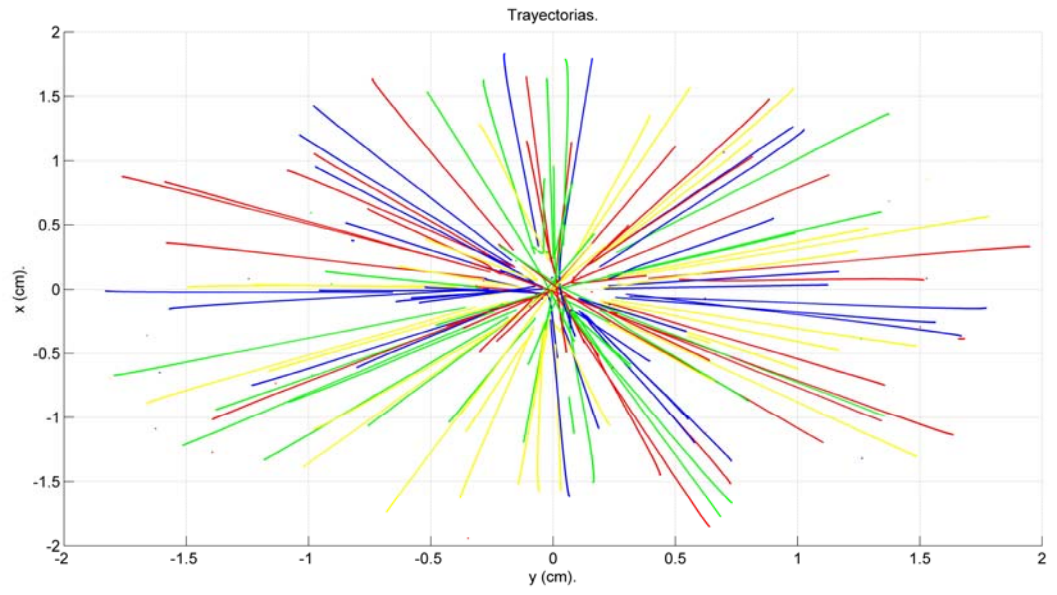
Vista general.



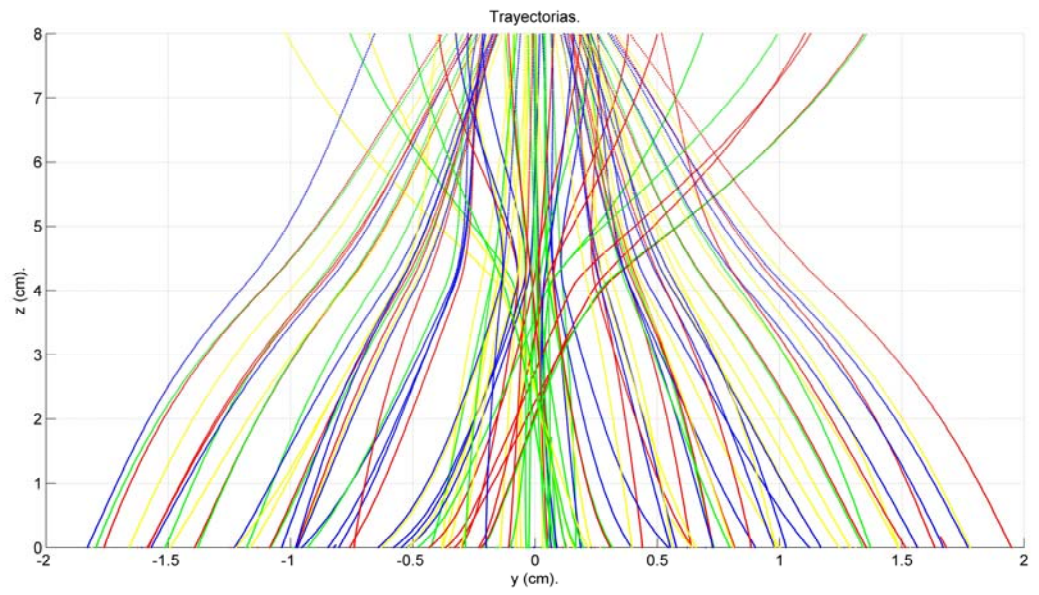
Vista plano x Vs. z.



Vista plano x Vs. y.



Vista plano z Vs. y.



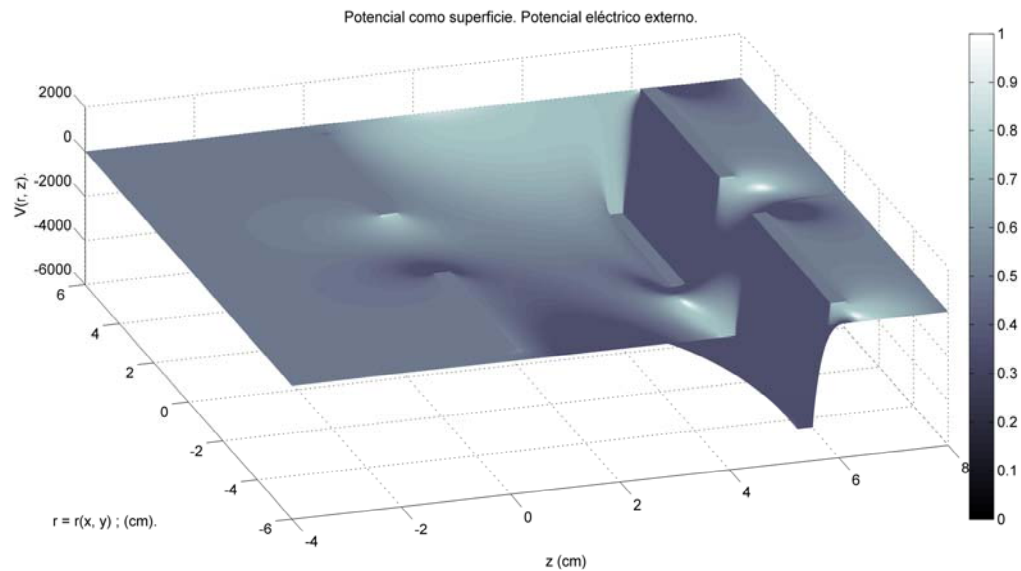
9.3 CONFIGURACIÓN III

Los valores para las diferentes variables de la simulación fueron los siguientes:

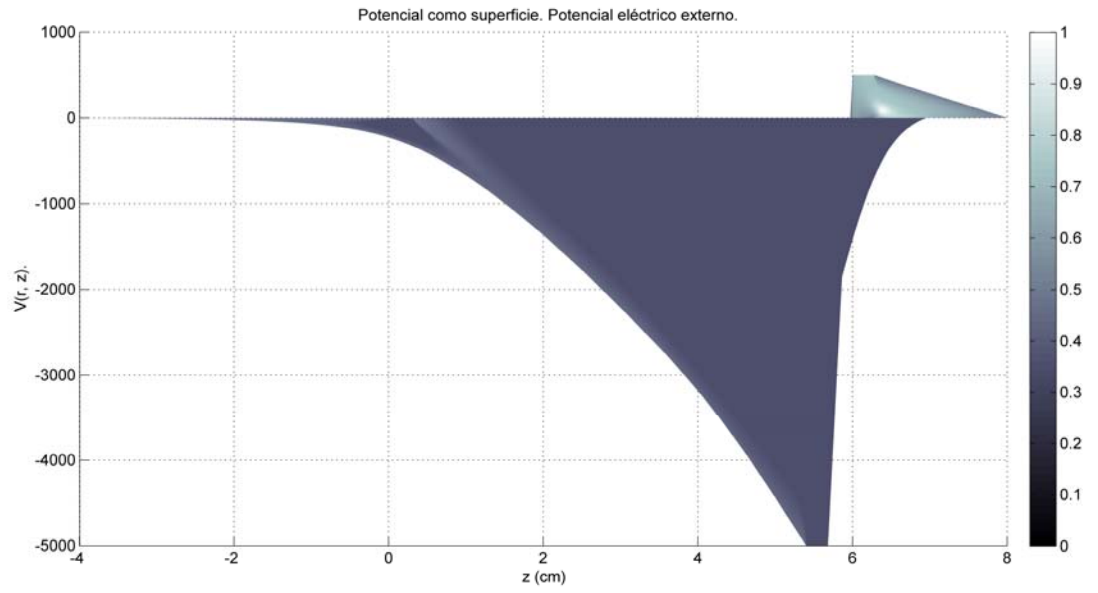
- a) -6.0, 6.0, -4.0, 8.0
- b) 1.5, 5.5, 0.0, 0.3, 1.0, 5.5, 5.4, 5.7, 0.9, 5.5, 6.0, 6.3
- c) 0.0, -5000.0, 500.0, 0.0
- d) 1.0×10^{-7}
- e) 1.49, 0.1
- f) 10
- g) 1.0×10^5 ; $\Delta t \approx 2.74 \times 10^{-11}$ seg .
- h) 1.0×10^6
- i) 1, 14000
- j)

	Dimensiones volúmenes de muestreo $r_1, \Delta z_1, z_{1-Min.}$ $r_2, \Delta z_2, z_{2-Max.}$	$\left(\frac{J_2}{J_1}\right) \times 100$	$\left(\frac{I_2}{I_1}\right) \times 100$	$\left(\frac{n_2}{n_1}\right) \times 100$
Set 1	0.89, 0.01, 0.01 0.89, 0.01, 7.99	14	14	13
Set 2	0.45, 0.01, 0.01 0.45, 0.01, 7.99	52.6	52.6	51
Set 3	0.35, 0.01, 0.31 0.35, 0.01, 7.99	628.5	628.5	606

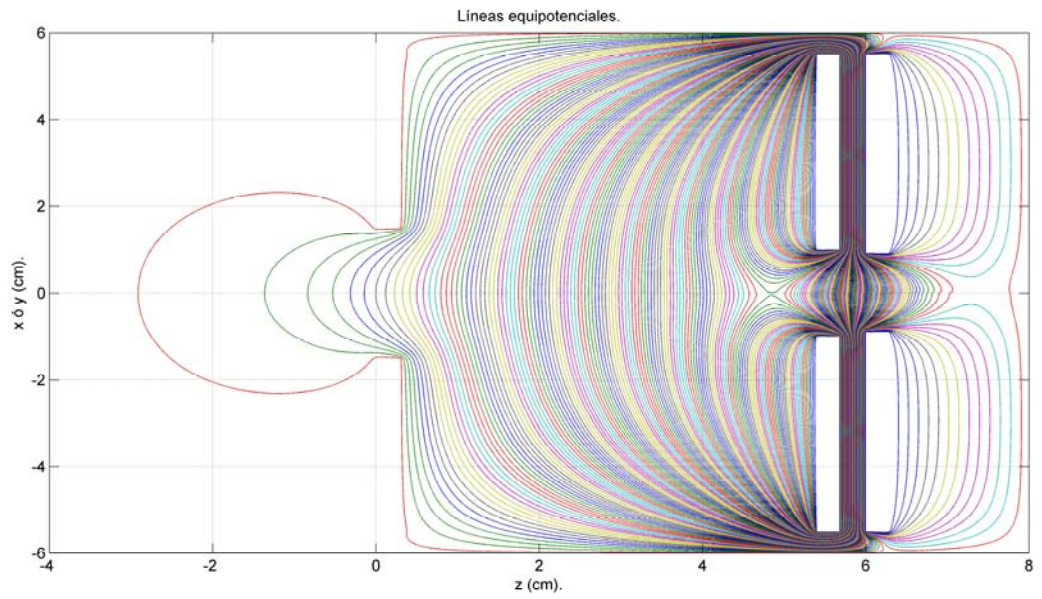
I) Potencial eléctrico externo.



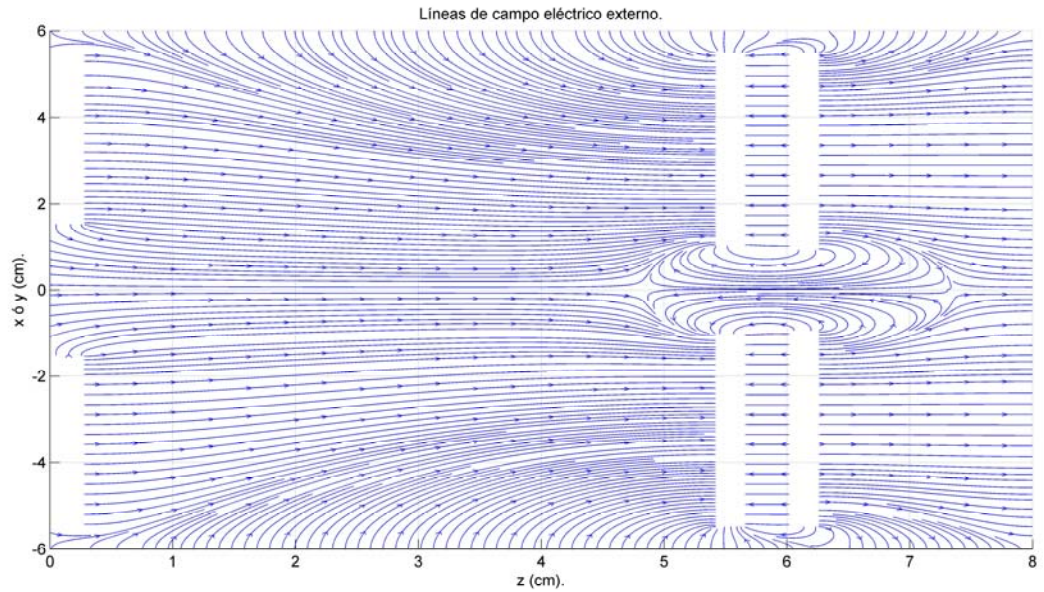
Vista potencial plano $V = V(r, z)$ Vs. z .



Líneas equipotenciales.

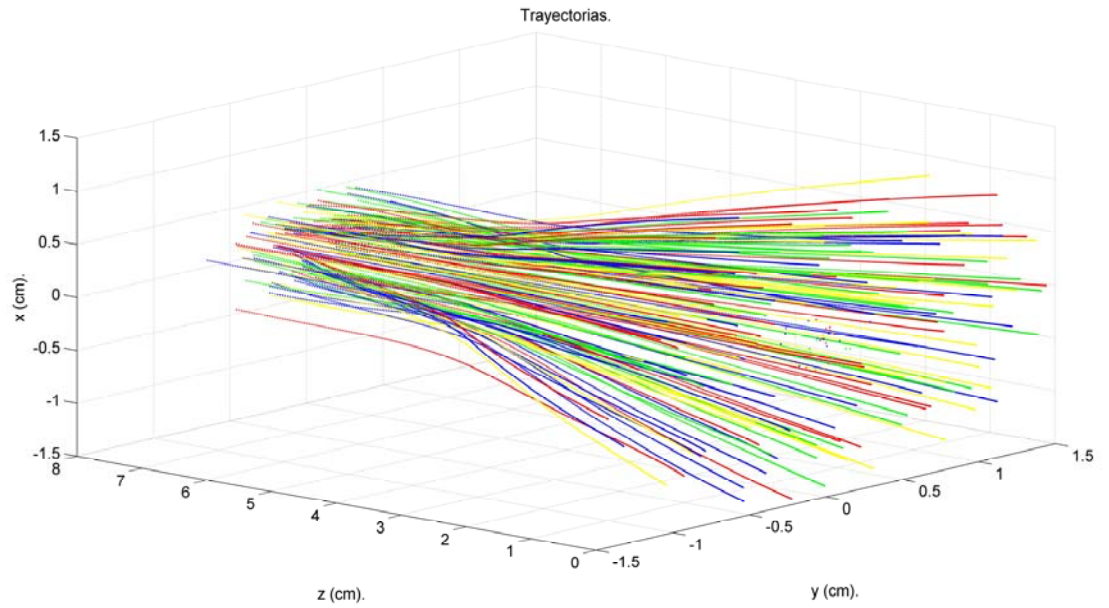


II) Líneas de campo eléctrico externo. La definición del lineado se ha disminuido para efectos visuales.

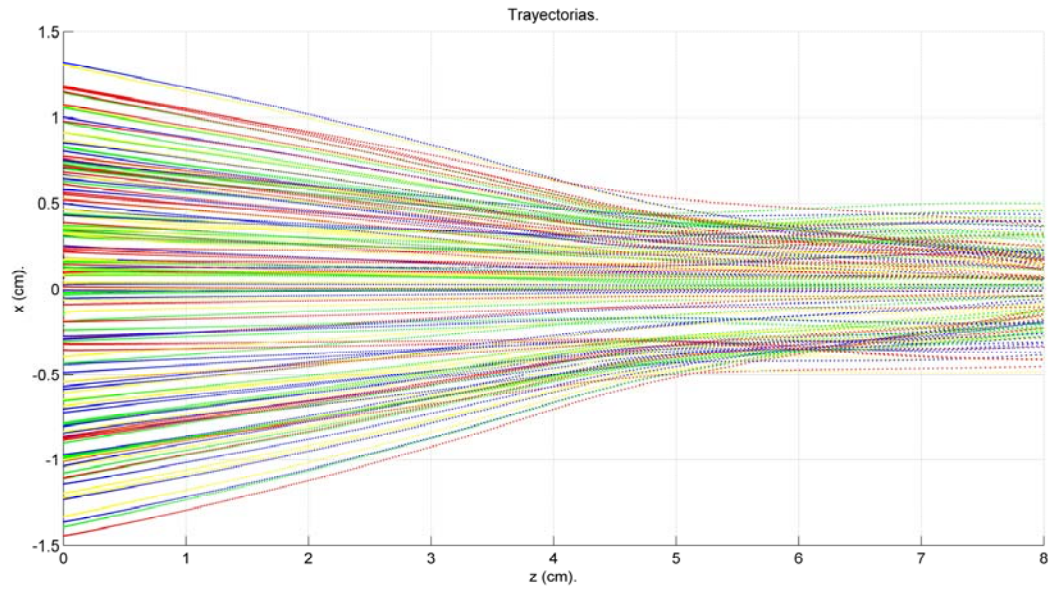


III) Trayectorias.

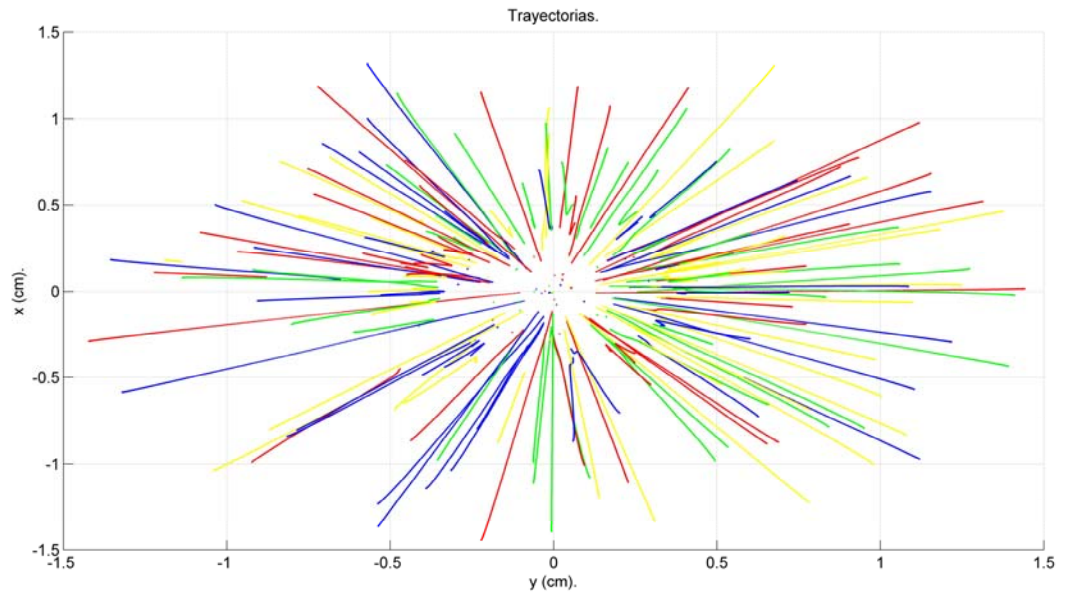
Vista general.



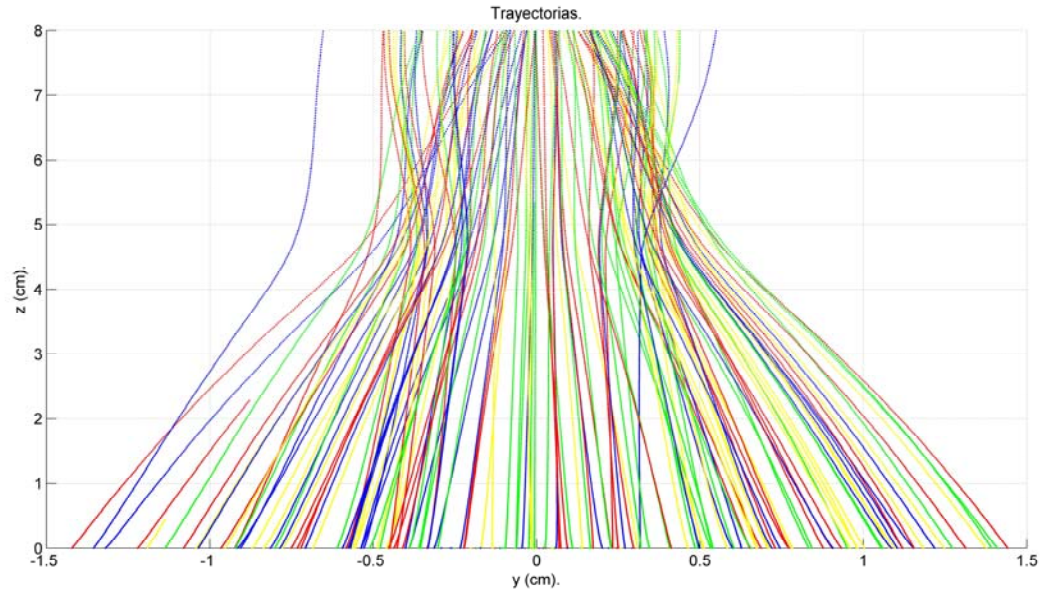
Vista plano x Vs. z.



Vista plano x Vs. y.



Vista plano z Vs. y.



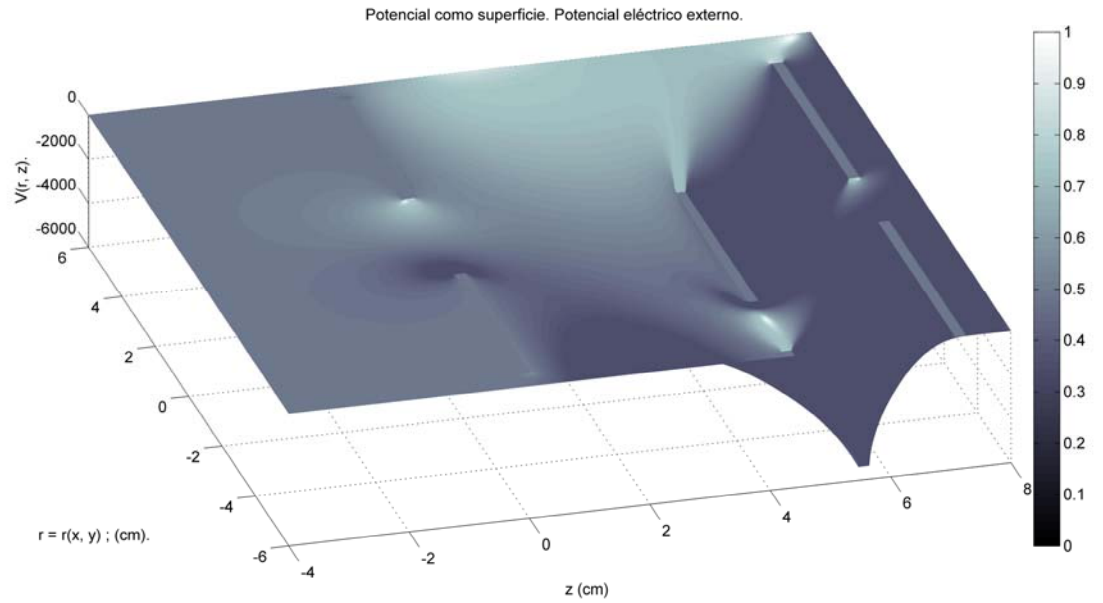
9.4 CONFIGURACIÓN IV

Los valores para las diferentes variables de la simulación fueron los siguientes:

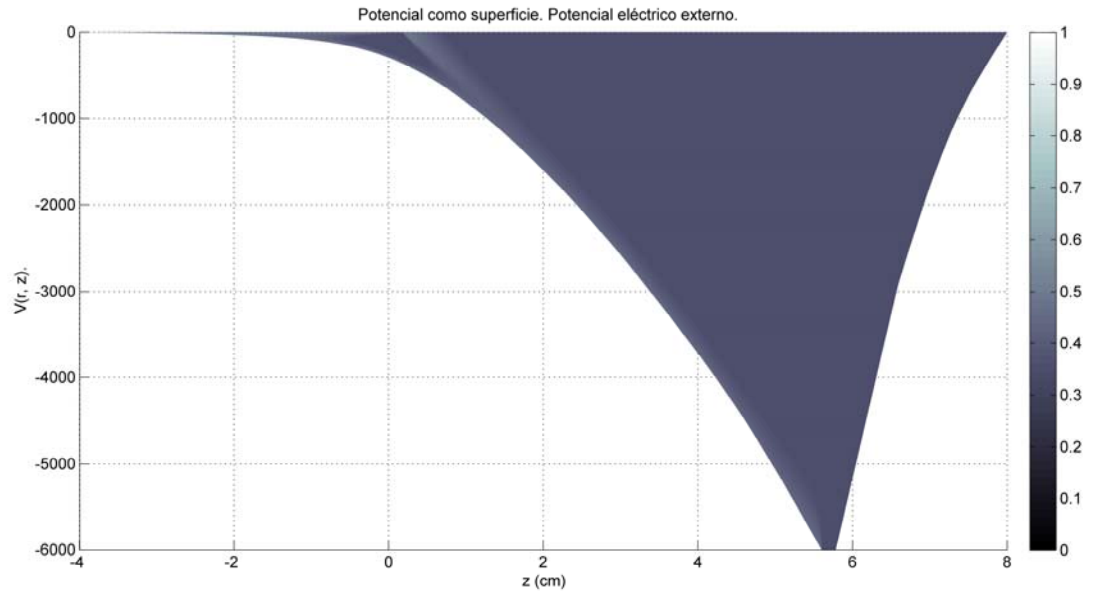
- a) -6.0, 6.0, -4.0, 8.0
- b) 1.5, 5.5, 0.0, 0.2, 0.85, 5.5, 5.6, 5.8, 0.85, 5.5, 7.2, 7.4
- c) 0.0, -6000.0, -600.0, 0.0
- d) $1.0\text{EXP}(-7)$
- e) 1.49, 0.06
- f) 10
- g) $1.5\text{EXP}(5)$; $\Delta t \approx 1.82 \times 10^{-11}$ seg .
- h) $1.0\text{EXP}(6)$
- i) 1, 26484
- j)

	Dimensiones volúmenes de muestreo $r_1, \Delta z_1, z_{1-\text{Min.}}$ $r_2, \Delta z_2, z_{2-\text{Máx.}}$	$\left(\frac{J_2}{J_1}\right) \times 100$	$\left(\frac{I_2}{I_1}\right) \times 100$	$\left(\frac{n_2}{n_1}\right) \times 100$
Set 1	1.49, 0.01, 0.01 1.49, 0.01, 7.99	5.9	5.9	5
Set 2	0.45, 0.01, 0.01 0.45, 0.01, 7.99	29.3	29.3	29
Set 3	0.35, 0.01, 0.21 0.35, 0.01, 7.99	148.06	148.06	145

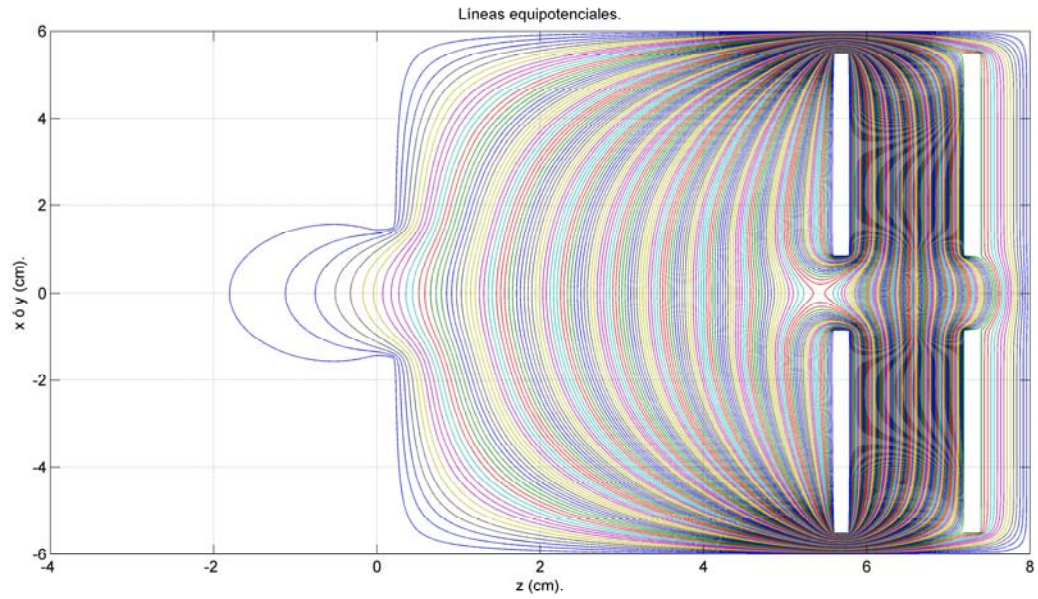
IV) Potencial eléctrico externo.



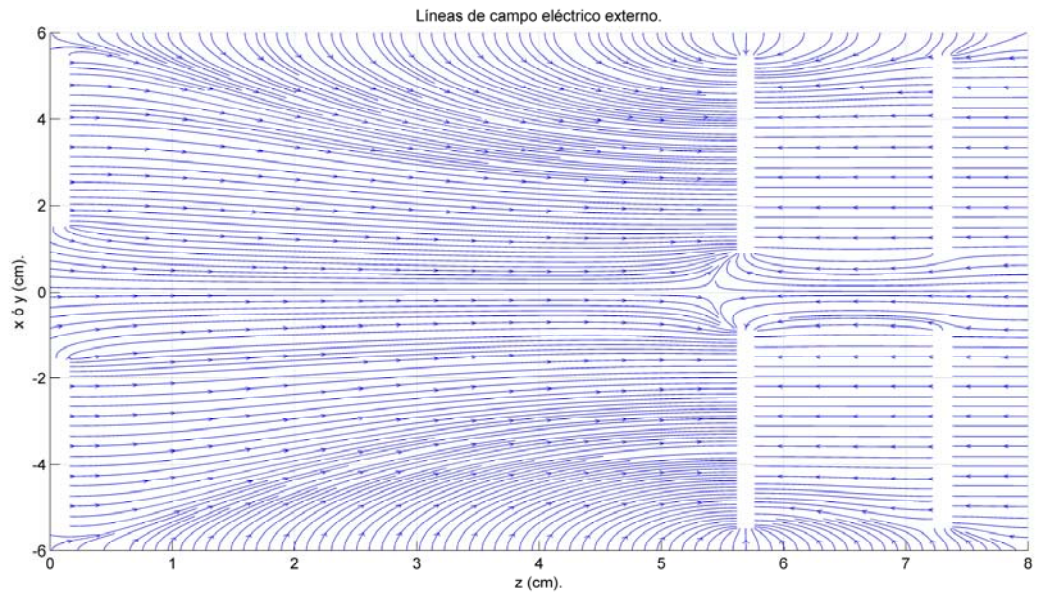
Vista potencial plano $V = V(r, z)$ Vs. z .



Líneas equipotenciales.

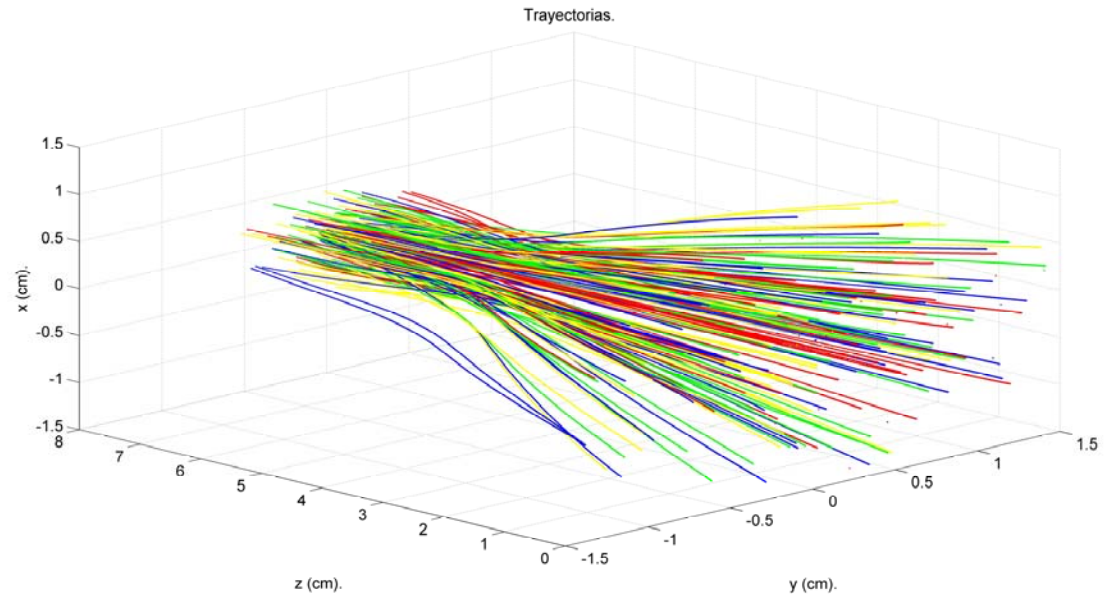


V) Líneas de campo eléctrico externo. La definición del lineado se ha disminuido para efectos visuales.

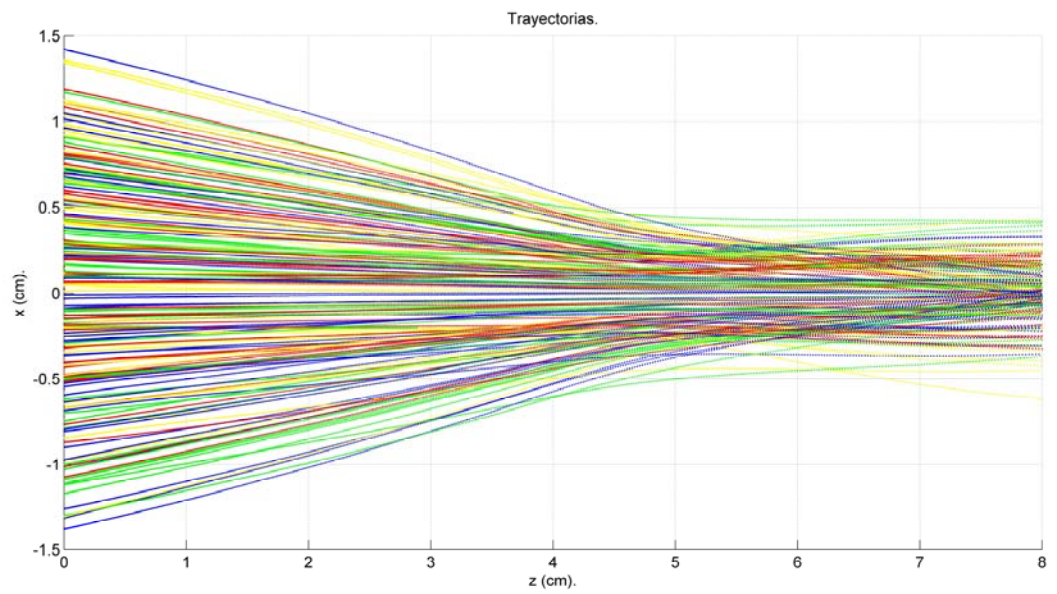


VI) Trayectorias.

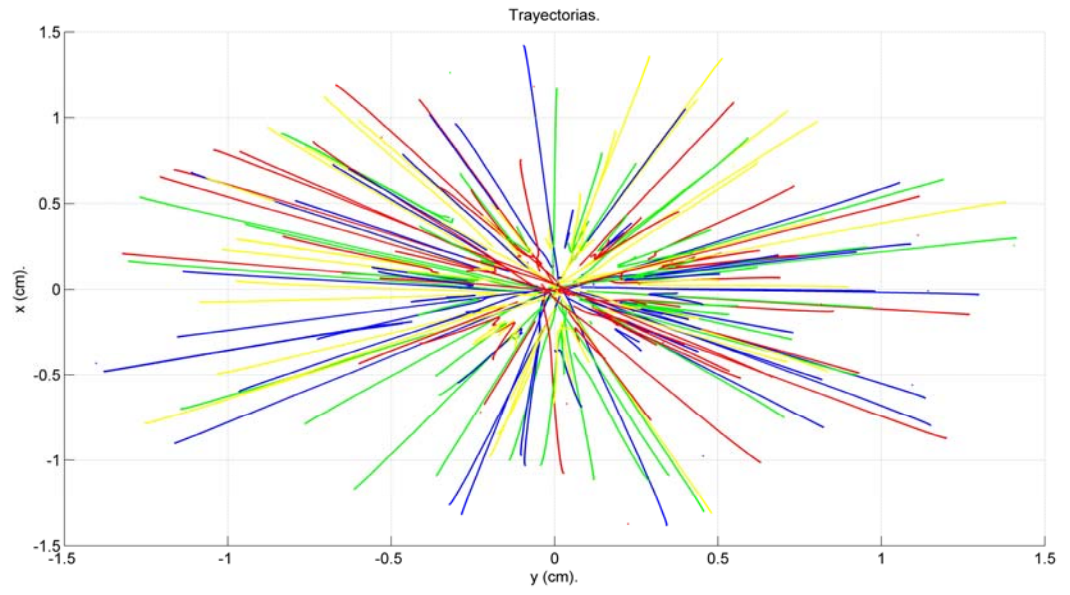
Vista general.



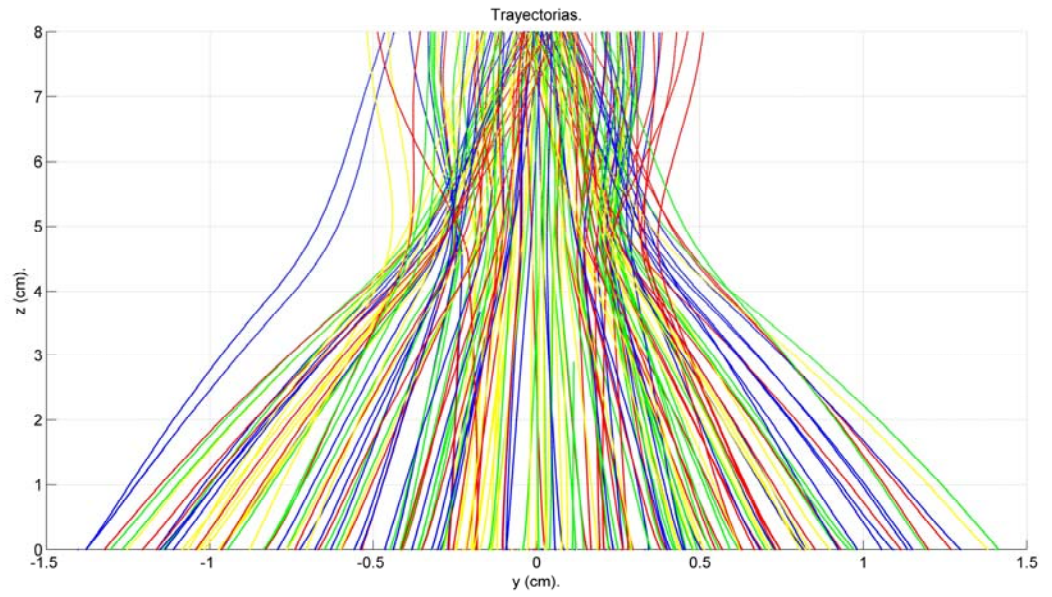
Vista plano x Vs. z.



Vista plano x Vs. y.



Vista plano z Vs. y.



10. OBSERVACIONES Y CONCLUSIONES

Disponiendo de un tiempo limitado para desarrollar simulaciones con diferentes configuraciones geométricas y demás variables se probó con un número de ellas y fueron seleccionadas las cuatro que se presentan en el capítulo anterior. Particularmente se comparan configuraciones donde el potencial de extracción es de aceleración mientras que el de focalización es de frenado (I y III) y configuraciones donde tanto el potencial de extracción como el de focalización son de aceleración (II y IV).

Como se comenta previamente, cada trayectoria calculada por la simulación representa la trayectoria de una macropartícula, que corresponde a la trayectoria de 10^6 partículas cargadas (iones). La simulación muestrea 4 macropartículas indexadas al azar. Ahora bien, puesto que las velocidades iniciales de las macropartículas tienen direcciones aleatorias y magnitudes consistentes con sus energías, el muestreo resultante es completamente aleatorio. Por otra parte, la simulación considera la devolución de las macropartículas al volumen tomado como inicial para el haz una vez que ellas entren en contacto bien sea con cualquiera de los electrodos del sistema de extracción o la pared de la caja apantalladora. Visualmente, cada una de las macropartículas indexadas al azar viene representada por un color diferente de modo que el muestreo para las trayectorias puede ser fácilmente estimado con un conteo manual de las trayectorias de diferentes colores que entran en contacto con la caja apantalladora al final del sistema de extracción. Finalmente, la simulación se deja correr por un tiempo equivalente a 14.000 ciclos computacionales elementales completos (26.484 para el caso IV). Todo lo anterior implica que el muestreo equivalente para las partículas cargadas (iones) es de entre 100 y 160 millones de ellas/ellos por simulación.

10.1 OBSERVACIONES

Con las configuraciones planteadas se pueden plantear las siguientes observaciones generales:

- La geometría del campo eléctrico externo es bastante controlable desde el punto de vista de las variables a disposición de la simulación. Las líneas de campo eléctrico externo pueden adquirir diversas distribuciones según se considere lo más adecuado para optimizar la extracción.
- No se observa influencia apreciable del campo magnético autoconjugado, en el sentido de aparición de trayectorias helicoidales para las partículas cargadas (iones). Esto es de esperar puesto que se están acelerando protones y no electrones, de modo que la velocidad que adquieren es mucho menor que si se tratase de un haz electrónico, con el consecuente mucho menor campo magnético autoconjugado resultante. Empero, debe anotarse que a causa de la simetría inherente al sistema de extracción planteado, el campo magnético autoconjugado resultante, por débil que sea, propende a la formación y mantenimiento del haz, puesto que su dirección es azimutal en relación con la dirección axial (dirección z).
- Debido a la simetría del sistema de extracción, es posible apreciar que éste permite extraer iones con razonable efectividad. Las configuraciones planteadas muestran que las partículas que no están en la vecindad inmediata del electrodo plásmico son extraídas con buena probabilidad de éxito (11% al 62%) por el potencial del electrodo de extracción, que en los cuatro ejemplos mostrados se propone de aceleración.
- En los experimentos computacionales puede notarse que aunque el sistema propuesto es de extracción de iones y no de optimización de las propiedades

“ópticas” del haz, el electrodo de “focalización” realmente cumple su cometido, puesto que se logra un incipiente efecto “focalizante” en todos los casos. En la configuración II también se logra el efecto, pero el recorrido entre el electrodo de “focalización” y el final de la caja apantalladora se dejó adrede más largo para apreciar cómo inmediatamente después de lograrse el efecto de “focalización” aparece nuevamente el efecto de repulsión Coulombiana de las partículas cargadas (iones) del haz. También debe apreciarse que el efecto de “focalización” se logra con potenciales tanto de aceleración como de frenado para el electrodo de “focalización”. Sin embargo, como es razonable suponer, el efecto es mayor en los sistemas cuyo electrodo de “focalización” es de frenado.

- En tanto experimento computacional, el sistema de extracción planteado permite una buena variedad de pruebas y consideraciones previas a la construcción en físico del sistema de extracción de partículas cargadas (iones), con lo que puede resultar una herramienta útil en las etapas iniciales de concepción, diseño y desarrollo de dicho tipo de sistemas.

10.2 CONCLUSIONES

Basados en los resultados es posible concluir lo siguiente:

- El modelo partícula-malla/partícula en celda (PM-PIC), con sus limitaciones intrínsecas, se muestra adecuado para calcular las trayectorias de las partículas componentes de un haz toda vez que éste pueda ser razonablemente considerado como acolisional.
- El sistema de extracción propuesto permite lograr un control bastante razonable del proceso de extracción de las partículas cargadas (iones).

- El sistema de extracción propuesto permite lograr un control bastante razonable de las etapas iniciales de la formación de un haz de partículas cargadas (iones).
- El sistema de extracción propuesto representa una buena primera etapa constituyente de un más complejo sistema de formación de haces iónicos multicargados. En efecto, el sistema de extracción propuesto en este trabajo puede secuenciarse con un sistema específicamente de “focalización”, para continuar optimizando las propiedades “ópticas” del haz obtenido.

REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS

- [1] Alton, G. D., et al. A high temperature, "volume type", ECR ion source for RIB generation. Proceedings of the 1999 Particle Accelerator Conference, New York, 1999. pp. 1881-1883.

- [2] Zelenski, A. N., et al. Optically-pumped polarized H⁻-ion sources for RHIC AND HERA colliders. Proceedings of the 1999 Particle Accelerator Conference, New York, 1999. pp. 106-108.

- [3] Jardin P., et al. Atom-to-ion transformation time in singly charged ECRISs. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, Volume 225, Issue 3, September 2004. pp. 374-382.

- [4] Capacci M., et al. New ion source design for ion propulsion application. Review of Scientific Instruments, February 1998, Volume 69, Issue 2. pp. 788-790.

- [5] Takagi T., et al. Current status of development of ion sources in Japan from a standpoint of materials science. Review of Scientific Instruments, January 1990, Volume 61, Issue 1. pp. 517-522.

- [6] Birdsall C. K., et al. Plasma Physics Via Computer Simulation. Institute of Physics Publishing; Bk&Disk edition (January 1, 1991). 504 pages.

- [7] Dougar-Jabon V. D. X-Ray Source Based on Electron Cyclotron Resonance Discharge in a Magnetic Mirror Trap. Phys. Scr. 2004, Volume 69. pp. 313-315.

- [8] Dougar-Jabon V. D., et al. Three-dimensional simulation of an ECR plasma in a minimum- B trap. *Review of Scientific Instruments*, February 2002, Volume 73, Issue 2. pp. 629-631.
- [9] Dougar-Jabon V. D., et al. Plasma confinement in an electron cyclotron double cusp trap. *Physica Scripta*, Vol. 62 (2000). pp. 183-185.
- [10] Green T. S. Beam formation and space charge neutralization. *IEEE Transactions on nuclear science*, Vol. NS-23, No. 2, April 1976. pp. 918-928.
- [11] Spädtke P. Simulation of the extraction from an ECRIS. *Proc. 15th International Workshop on ECR Sources*, University of Jyväskylä, Jyväskylä, Finland, 2003. p. 77.
- [12] Sadiku M. N. O. *Numerical Techniques in Electromagnetics*. CRC; 2 edition (July 12, 2000). 760 pages.
- [13] Luccio A. U., et al. Solving by parallel computation the Poisson problem for high intensity beams in circular accelerators. *Proceedings of the 2001 Particle Accelerator Conference*, Chicago, 2001. pp. 270-272.
- [14] Yuan C., et al. Bar-driven Evolution and Instability of Self-gravitating Disks. *Bulletin of the American Astronomical Society*, Vol. 37, 2004. p. 380.
- [15] Kapetanacos C. A., et al. Destructive instabilities in hollow intense relativistic electron beams. *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 30. No. 26, 1973. pp. 1303-1306.
- [16] Gratreau P. Single particle trajectories in axisymmetrical electromagnetic fields: application to TOKAMAKS under runaway regime. *Plasma Physics*. Vol. 19, Pergamon Press, 1977. pp. 695-706.

- [17] Holt E. H., et al. Foundations of Plasma Dynamics. Macmillan, (1965). 510 pages.
- [18] Chen, F. Introduction to Plasma Physics. Springer; 1 edition, (December 31 1995). 329 pages.
- [19] Toshiki, T. Computational Plasma Physics. With Application to fusion and astrophysics. Addison-Wesley (October 1988). 525 pages.
- [20] Compaq Visual Fortran Version 6.1.0 Online Documentation. Link: <http://gams.nist.gov/serve.cgi/Module/IMSLM/DFPS3H/3991/>
- [21] Lynch R., et al. High accuracy finite difference approximation to solutions of elliptic partial differential equations. Proc. Natl. Acad. Sci. USA., Vol. 75, No. 6, 1978, pp. 2541-2544.