

03;07,12

Моделирование свободномолекулярного потока паров для лазерного разделения изотопов

© Р.И. Голятина, А.Н. Ткачев, С.И. Яковленко

Институт общей физики РАН,
117942 Москва, Россия

(Поступило в Редакцию 24 октября 1996 г.)

В приближении свободномолекулярного движения проведено моделирование потока паров из одного канала (трубки) и из набора трубок. Получены интегральные характеристики (доли прошедших, прилипших и вернувшихся частиц) и распределения потока и плотности потока паров по углам. Проведены расчеты потока атомов, рассеянных за счет однократных столкновений в атомном пучке.

Введение

В работах [1,2] рассматривалась задача о засорении коллектора при лазерном разделении изотопов методом AVLIS (Atomic Vapor Laser Isotope Separation) (см., например, [3–6]). При более полном анализе необходимо рассматривать свойства источника паров, которые определяют плотность и распределение атомов по скоростям в зоне ионизации (рис. 1). Ниже мы подробнее остановимся на рассмотрении источника паров в виде набора узких каналов (обычно трубок). Такие источники неоднократно рассматривались [7–9]. Однако задача лазерного разделения изотопов имеет свою специфику, что делает необходимым дополнительный анализ. Кроме того, удастся существенно улучшить метод расчета характеристик рассеянного потока атомов, предложенный в [1,2].

Поток из одного канала

Эффективная модель. Рассматривается свободномолекулярное распространение атомов вдоль канала, т. е. принимаются во внимание только их столкновения со стенками трубки. В созданных кодах рассеяние считалось смесью диффузного и зеркального. Кроме того, учитывалась возможность поглощения частиц на стенках.

Конкретно моделировалась следующая ситуация. Излучающей поверхностью считалось дно канала длины l , который представлял собою либо цилиндрическую трубку диаметром d , либо трубку прямоугольного сечения (при моделировании щели один из размеров брался достаточно большим). Распределение выбрасываемых из дна канала частиц по скоростям v бралось в виде

$$f_T(v) = C v_x \exp(-m(v - V)^2/2T),$$

$$\int dv f_T(v) = 1, -\infty < v_y, v_z < \infty \quad 0 < v_x < \infty. \quad (1)$$

Здесь ось x направлена вдоль оси трубки, m — масса атома, T — температура паров в бане, V — средняя скорость потока, C — нормировочная постоянная. При

$V = 0$ распределение (1) соответствует максвелловской функции распределения в объеме, являющимся источником частиц (в бане). Аналогичное распределение при ($V = 0, T = T_w$, где T_w — температура стенок) использовалось для диффузно отраженных частиц. В некотором смысле такой закон отражения аналогичен известному закону Ламберта в оптике. В общем случае при моделировании отражения считалось, что частица с некоторой вероятностью может отразиться диффузно, с некоторой вероятностью зеркально и с некоторой вероятностью может прилипнуть к стенке.

Отметим, что рассмотрение свободномолекулярного потока атомов ограничено достаточно низкими плотностями $N \ll 1/\sigma l$, где σ — сечение упругого столкновения атомов.

Прохождение атомов через канал. При диффузном отражении в случае большого отношения длины трубки к ее диаметру l/d доля k прошедших через трубку частиц, как и следовало ожидать, уменьшается. Для длинных трубок ($l/d > 100$) k практически совпадают с асимптотикой $k \cong 4d/3l$, а во всем диапазоне l/d , включающем короткие трубки, хорошо аппроксимируется (с точностью не хуже 3%) простой зависимостью $k = (1 + 0.17\sqrt{x} + 0.75x)^{-1}$, $x \equiv l/d$.

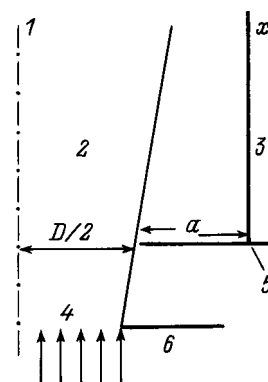


Рис. 1. Геометрия задачи о формировании потока паров и экстракции ионов при лазерном разделении изотопов. 1 — ось симметрии, 2 — зона ионизации, 3 — коллектор, 4 — источник пара, 5 — диафрагма, 6 — баня.

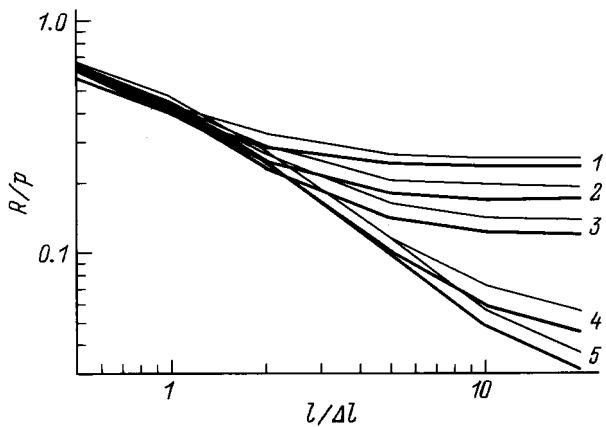


Рис. 2. Отражение атомов от каналов с поглощающими стенками (плоская щель). $v\sqrt{m/2T}$: 1 — 0, 2 — 1, 3 — 2, 4 — 5, 5 — 10 и при $p = 0.1$ (жирные кривые) и $p = 0.3$ (тонкие кривые). Рассмотрен глухой канал, т. е. считается, что выходной срез канала поглощает частицы с той же вероятностью, что и его стенки.

В случае поглощающих стенок большой интерес представляет зависимость доли отраженных частиц от относительной длины канала $l/\Delta l$ (где Δl — калибр, т. е. наименьший поперечный размер канала). Следует отметить важное обстоятельство: если стенки поглощают частицы с некоторой вероятностью $p < 1$, то при максвелловском распределении частиц в объеме, контактирующем с каналом (когда $V = 0$), даже в случае бесконечно длинного канала доля вернувшихся частиц R не так уж мала по сравнению с вероятностью p . Она составляет величину $R \cong (0.2 \div 0.3)p$ как для квадратного канала, так и для плоской щели (рис. 2). Это естественно. При хаотическом распределении скоростей и длинных каналах наибольший вклад в отражение вносит часть поверхности, близкая ко входу в канал, поэтому увеличение длины канала практически не сказывается на вероятности R отражения атома, хотя сильно снижает вероятность его прохождения через канал. В то же время для длинных трубок коэффициент отражения R резко падает с ростом направленности потока атомов, т. е. при $V\sqrt{m/2T} \gg 1$. Это тоже вполне понятно. При направленном потоке большая часть атомов сталкивается со стенкой далеко от входа в канал, откуда мала вероятность вылета обратно, в особенности при низкой вероятности диффузионного рассеяния по сравнению с поглощением ($p \ll 1$).

Распределение потока атомов по углу. Обычно распределение атомов, вылетевших за срез трубки, характеризуют распределением плотности потока атомов по углу между осью симметрии и направлением их скорости. Для практического использования результатов расчета удобнее табулировать распределение плотности потока атомов $j(\rho)$ на плоскости, перпендикулярной оси симметрии в зависимости от приведенного расстояния до оси трубки $\rho = r/x_0 = \text{tg } \Theta$. Здесь r — радиус на плоскости, x_0 — расстояние от среза

трубки до плоскости ($x_0 \gg d$), Θ — угол между осью трубки и направлением на выбранную точку плоскости. При этом $2\pi \cdot j(\rho)\rho d\rho$ дает вероятность попадания атома в кольцо $(\rho, \rho + d\rho)$.

Как известно, при увеличении отношения длины трубки к диаметру направленность некоторой доли потока атомов растет (рис. 3). Однако имеется ряд эффектов, на которые обычно не обращают должного внимания. При увеличении относительной длины трубки l/d доля частиц, прошедших через нее без столкновений, падает пропорционально квадрату обратной относительной длины $(d/l)^2$. В то же время полное число прошедших через трубку частиц падает лишь линейно, пропорционально d/l . Этот факт обусловлен тем, что преобладает вклад рассеянных стенками частиц. Большой вклад рассеянных частиц приводит к тому, что с увеличением относительной длины трубки растет доля частиц, являющихся как бы пьедесталом для пика распределения по углам. Поэтому вероятность $J(\rho) = \int_0^\rho 2\pi \cdot j(u)udu$ попадания атомов в круг радиуса $r = \rho x_0$ при $r \sim x_0$ оказывается практически одинаковой даже для сильно различающихся значений l/d (рис. 3, б).

Этот факт противоречит данным работы [8], согласно которым поток под большими углами к оси пренебрежимо мал (кривая б на рис. 3, а, где $d/l = 33$). Наиболее показателен в этом смысле рис. 4. Угол Θ_α , внутри которого находится заметная доля α потока

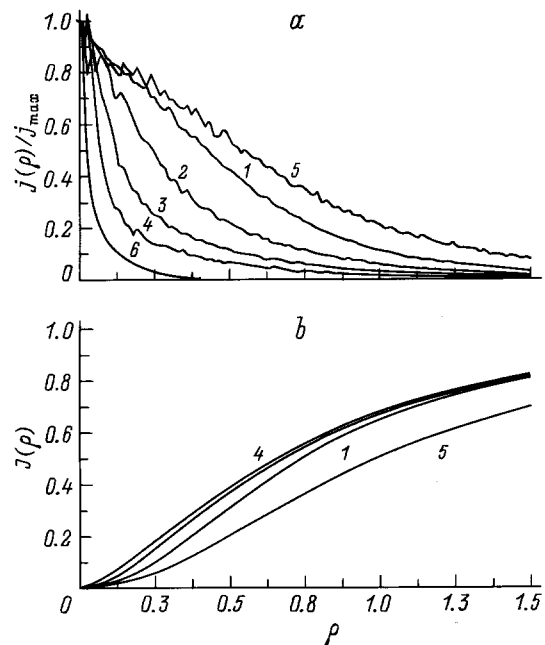


Рис. 3. Направленность потока атомов, прошедших сквозь цилиндрическую трубку. а — нормированные на максимальные значения распределения плотности потока атомов в плоскости, перпендикулярной оси трубки; б — интегралы от распределений плотности потока; 1–4 — диффузно отражающие стенки в отсутствие поглощения при $d/l = 1, 3.3, 10, 33$; 5 — зеркально отражающие стенки при $d/l = 33$. Атомы перед входом в трубку распределены по Максвеллу.

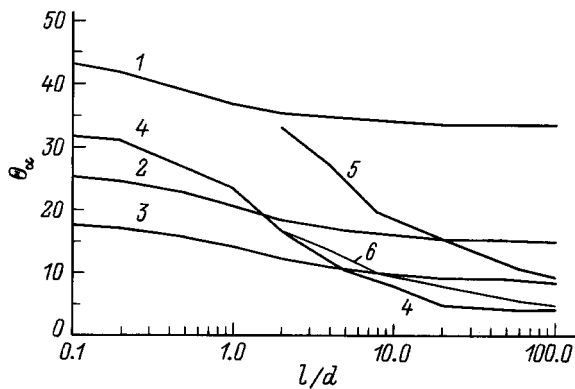


Рис. 4. Углы θ_α , в которые попадает заданная доля $\alpha = 0.5, 0.2, 0.1$ вылетевших из трубки частиц (1–3).

атомов, прошедших сквозь трубку, слабо зависит от ее относительной длины l/d . В то же время угол, соответствующий полувысоте распределения (кривая 4), существенно зависит от относительной длины трубки. Отметим, что наши результаты сильно отличаются и от данных работы [9] (ср. кривые 1 и 5). Возможно, в этой работе приведены не данные для угла, в пределах которого находится половина всех вылетающих из трубки частиц (как там сказано), а данные для удвоенного угла, соответствующего полувысоте распределения. Это предположение косвенно подтверждается тем, что соответствующая кривая 6, восстановленная по данным [9], неплохо согласуется с полученной нами зависимостью 4.

То, что бóльшая доля частиц при прохождении длинных трубок рассеивается под большими углами, важно учитывать в конструкции системы экстракции ионов для лазерного разделения изотопов, поскольку частицы, рассеянные под большими углами, могут засорять расположенный параллельно потоку паров коллектор, на который поступают экстрагируемые из плазмы ионы (рис. 1).

Отметим также, что в случае зеркального отражения частиц стенками пучок вылетевших из трубки частиц имеет еще больший разброс по поперечным скоростям (кривая 5 на рис. 3, а). Это обусловлено тем, что при зеркальном отражении не отсекаются частицы, влетающие в трубку под большими углами к ее оси.

Поток из набора трубок

Характеристики потока при вытянутом источнике. Обычно интерес представляет распределение суммарного потока от множества трубок, заполняющих вытянутый прямоугольник $\Delta L \times L$. Для того чтобы обеспечить максимальный расход вещества, трубки располагают максимально близко друг к другу. Полный поток получается суммированием потоков в данную точку от всех трубок.

Нами созданы программы, позволяющие рассчитывать распределение плотности потока атомов при любом заполнении прямоугольника трубками. Здесь мы ограничимся рассмотрением лишь двух вариантов: а) одного ряда трубок и б) 20 рядов трубок. В обоих вариантах длина системы трубок составляла $L = 1$, а высота трубок $l = 10$ мм. В первом варианте рассматривался один ряд из 500 трубок диаметром $d = 2$ мм ($\Delta L = 2$ мм). Во втором варианте рассматривалось 2000×20 трубок диаметром $d = 0.5$ мм на ширине $\Delta L = 15$ мм. Система координат помещена в центр прямоугольника, образованного трубками, ось x по-прежнему считается направленной параллельно осям трубок, ось y поперек, а ось z вдоль прямоугольника.

Как и следовало ожидать, распределение плотности потока из системы трубок по оси z имеет вид, близкий

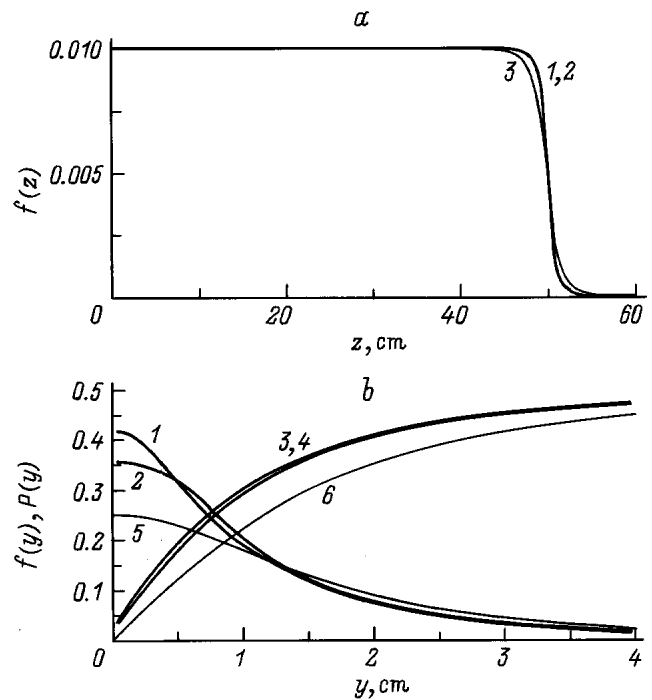


Рис. 5. Распределение потока атомов, прошедших сквозь набор параллельных цилиндрических трубок, образующий прямоугольник шириной ΔL и длиной L . Плотность вероятности $f(z), f(y)$ попадания атома на единицу поверхности плоскости, перпендикулярной осям трубок, находящейся на расстоянии $x_0 = 20$ мм от среза трубок. а — зависимости от расстояния до плоскости симметрии (по оси z) в сечении, проходящем через половину ширины: 1, 2 — один и 20 рядов трубок соответственно; 3 — распределение равновесного излучения атомов из бесконечно узкой и бесконечно тонкой щели; б — в зависимости от расстояния до плоскости симметрии (по оси y) в сечении, проходящем через половину длины (в поперечном сечении): 1, 3 — один ряд трубок; 2, 4 — 20 рядов; 5, 6 — характеристики равновесного излучения атомов из бесконечно узкой, бесконечно тонкой и бесконечно длинной щели. Кривые 3, 4, 6 дают вероятность $P(y)$ попадания атома в полосу шириной $0-y$.

к прямоугольнику (рис. 5). Впрочем, почти такое же распределение, определяемое выражением

$$f(z) = \frac{2x_0^3}{\pi L} \int_{-L/2}^{L/2} \frac{du}{[(u-z)^2 + x_0^2]^2},$$

дает и бесконечно узкая, бесконечно тонкая щель ($\Delta L \rightarrow 0$, $l \rightarrow 0$, кривая 3 на рис. 5, а) (явное выражение для этого интеграла не приведено ввиду его громоздкости).

В случае многих рядов трубок распределение в поперечном направлении по оси y несколько однороднее по сравнению с распределением от одного ряда трубок (кривые 1, 2 на рис. 5, б). Однако доля атомов, рассеянных в поперечном направлении под большими углами, из-за упомянутых выше эффектов немала, и поэтому полная вероятность $P(y)$ попадания атома, прошедшего через трубки в полосу шириной y , практически совпадает для одного и многих рядов трубок (кривые 3, 4 на рис. 5, б). Для сравнения приведены распределения

$$j(y) = \frac{1}{2x_0} \frac{1}{[1 + (y/x_0)^2]^{3/2}}, \quad P(y) = \frac{1}{2} \frac{y}{\sqrt{y^2 + x_0^2}},$$

соответствующие источнику в виде бесконечно узкой, бесконечно тонкой и бесконечно длинной щели ($\Delta L \rightarrow 0$, $l \rightarrow 0$, $L \rightarrow \infty$, кривые 5, 6 на рис. 5, б).

Пренебрежение атом-атомными столкновениями в пучках от разных трубок накладывает дополнительное ограничение на плотность газа на срезе трубок $N \ll 1/\sigma \Delta L$. Возможно, этот простой априорный критерий нуждается в уточнении, которое можно будет сделать впоследствии, если мы сможем рассмотреть задачу с достаточно полным учетом атом-атомных столкновений.

Потоки в рабочей зоне

Моделирование распространения потока без столкновений. В работах [1,2] распределение плотности паров в рабочей зоне определялось на основе прямого моделирования путем подсчета времени, которое пробные частицы проводят в данной ячейке пространства. Более простым и точным является метод, используемый в этой работе.

В свободномолекулярном режиме истечения, как известно, выполняется аналог оптического закона сохранения значения интенсивности вдоль луча в прозрачной среде: $f(\xi, \nu) = f(\xi + \nu\tau, \nu)$. Здесь f — объемная функция распределения частиц по вектору скорости ν в произвольной точке пространства ξ , τ — произвольный временной интервал. Поэтому, задав в произвольной точке пространства сетку по скоростям и построив соответствующие лучи до пересечения с поверхностями, либо излучающими частицы, либо ограничивающими

объем, можно восстановить функцию распределения в данной точке пространства. Интегрируя затем функцию распределения по скорости, получаем плотность частиц в данной точке.

Учет однократных столкновений. Как показано в работах [1,2], в зоне многоступенчатой ионизации паров их плотность должна быть достаточно мала, чтобы длина свободного пробега атомов существенно превосходила поперечные размеры зоны. Однако рассмотрение однократных столкновений необходимо для учета потока паров в области геометрической тени, которая обеспечивается обычно диафрагмой, закрывающей коллектор от прямого попадания потока атомов (см. рис. 1). В данной работе акт столкновения моделировался также, как и в [1,2], однако исходная плотность паров и функции распределения частиц в ячейке по скоростям вычислялись изложенным выше методом.

Рассеянный поток. В работах [1,2] получено выражение для рассеянного в однократных столкновениях однородного, бесконечного по осям y, z потока атомов шириной D . При этом считалось, что атомы летят коллинеарно оси x , а распределение по модулю скорости является "полумаксвелловским"

$$f_x(\nu) = 2(m/\pi T)^{1/2} \exp(-m\nu^2/2T), \\ -\infty < \nu_y, \nu_z < \infty, \quad 0 < \nu_x < \infty. \quad (2)$$

Выражение для плотности потока рассеянных частиц как функцию координаты точки, лежащей на высоте x над диафрагмой, выступающей на длину a над вертикальной плоскостью коллектора (рис. 1), можно записать в виде

$$F(x) = \sigma \sqrt{\frac{2T}{m}} DN^2 \chi(x/a). \quad (3)$$

Здесь $\chi(u)$ — функция, задающая распределение потока по координате x . С точностью не хуже 3% в интервале $0 < u < 3$ можно использовать аппроксимацию $\chi(u) = 0.018u^4/(1 + 1.62u^2 + 0.1u^4)$.

Модель коллинеарного пучка атомов с полумаксвелловским распределением по скоростям дает возможность

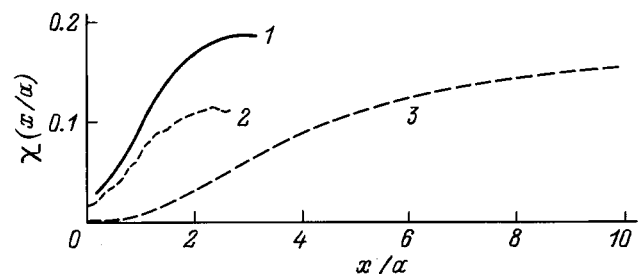


Рис. 6. Рассеяние потока за счет однократных столкновений (зависимость функции $\chi(x/a)$, характеризующей плотность вероятности попадания атома на единицу поверхности плоскости, параллельной потоку паров, от расстояния диафрагмы). Расстояния до оси симметрии, см: 1 — 2, 2 — 4, 3 — теоретическая зависимость для коллинеарного потока частиц.

почувствовать связь различных величин, но в количественном отношении должна проверяться численными расчетами. Дело в том, что, с одной стороны, в реальных условиях атомный пучок имеет заметную расходимость, что приводит к существенному увеличению числа рассеянных атомов, попавших в геометрическую тень. С другой стороны, "полумаксвелловское" распределение (2) завывает число медленных частиц по сравнению с (1).

Были проведены расчеты рассеянного потока для источника в виде плоской щели шириной 2 мм. Ширина диафрагмы $D = 1$ см (рис. 1), расстояние от щели до диафрагмы взято равным 2 см, приведены потоки для двух значений $a = 1.5$ и 3.5 см. Полученные зависимости представлены в виде (3), откуда вычислены функции $\chi(x/a)$ (рис. 6). Результаты моделирования приведены только для области геометрической тени прямого потока.

Как и следовало ожидать, когда пучок атомов не коллинеарен, рассеянный поток уже не характеризуется универсальной функцией $\chi(x/a)$: разным значениям a соответствуют разные функции χ . Кроме того, для расходящегося потока число частиц, попадающих в область геометрической тени, оказывается значительно большим по сравнению со случаем коллинеарного потока — происходит как бы эффективное уменьшение расстояния от коллектора до края диафрагмы a .

Отметим еще одно важное обстоятельство. Рассеянный поток пропорционален квадрату плотности паров в зоне ионизации. Это позволяет на основе результатов численного моделирования и данных измерения плотности рассеянного потока определять среднюю плотность паров в зоне ионизации.

Заключение

Из результатов проведенного рассмотрения наиболее важными мы считаем следующие.

1. Получена простая аппроксимация, описывающая долю прошедших через трубку частиц в зависимости от отношения длины трубки к ее диаметру.

2. Показано, что, хотя с ростом отношения длины трубки к ее диаметру распределение вылетевших частиц по углу несколько сужается, значение угла, в котором содержится заметная доля частиц, меняется очень слабо.

3. Показано, что столкновения в расходящемся потоке атомов приводят к более эффективному засорению области геометрической тени, чем коллинеарный поток.

Для более точного выявления области применимости приближения свободномолекулярного движения необходимы расчеты с учетом многократных столкновений.

Авторы признательны В.А. Кузнецову и А.Ю. Сапожкову за полезные обсуждения.

Список литературы

- [1] Mayorov S.A., Tkachev A.N., Yakovlenko S.I. // Laser Phys. 1994. Vol. 4. N 3. P. 623–630.
- [2] Майоров С.А., Ткачев А.Н., Яковленко С.И. // Математическое моделирование. 1994. Т. 6. № 9. С. 13–25.
- [3] Letokhov V.S., Mishin V.I., Puzetky A.A. // Prog. Quant. Electron. 1977. Vol. 5. P. 139–203.
- [4] Борисов С.К., Мишин В.А., Кузьмина М.А. // Прикладная физика. 1995. Вып. 1. С. 65–81.
- [5] Ткачев А.Н., Яковленко С.И. // Квантовая электрон. 1993. Т. 20. № 11. С. 1117–1120.
- [6] Ткачев А.Н., Яковленко С.И. // Квантовая электрон. 1996. Т. 23. № 9. С. 860–864.
- [7] Рамзей Н. Молекулярные пучки. М.: ИЛ, 1960. 441 с.
- [8] Зайцев Ю.В., Овчинников А.А. // ЖТФ. 1980. Т. 51. Вып. 9. С. 2017–2019.
- [9] Тарасов А.А., Толстых А.Л. // ЖТФ. 1993. Т. 64. Вып. 7. С. 195–196.