УДК 539.198

О РАСПРЕДЕЛЕНИИ ПО УГЛАМ ПОТОКА ПАРОВ ПРИ ДЛИНЕ СВОБОДНОГО ПРОБЕГА ПОРЯДКА РАЗМЕРОВ ЩЕЛИ

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

Методом частиц в ячейках проведено моделирование потока паров в щели в области перехода от эффузионного к газодинамическому режиму истечения. Показано, что столкновения влияют на распределение вылетевших из щели атомов по углам даже при низких плотностях (когда длина пробега порядка глубины щели).

При лазерном разделении изотопов методом AVLIS (Atomic Vapor Laser Isotope Separation, см., например, [1 – 3]) важную роль играет источник атомного пара. Его свойства определяют плотность и распределение атомов по скоростям в зоне ионизации. Эти характеристики в свою очередь определяют как производительность установки, так и обогащение изотопной смеси, получаемой на коллекторе.

При этом плотность паров в зоне ионизации по ряду причин должна быть мала, так что длина свободного пробега в этой области больше поперечного размера потока атомов. Это позволяет рассматривать течение паров в зоне ионизации как свободномолекулярное, а попадание атомов в область геометрической тени учитывать в рамках приближения однократных столкновений [4, 5]. Однако в области истечения паров из тепловой бани приближение свободномолекулярного потока может нарушаться. При этом заранее не ясны даже критерии нарушения режима свободномолекулярного истечения.

Дело в том, что поток атомов формируется обычно либо в щели, либо в системе узких каналов (часто в виде набора трубок). Обычно считается, что свободномолекулярное приближение применимо, если длина свободного пробега много больше поперечного размера трубки. Однако ниже показано, что столкновения влияют на распределение вылетающих из трубки атомов по углам уже при более низких плотностях, когда длина свободного пробега порядка длины (а не поперечного размера) трубки.

Для моделирования потока атомов в условиях, когда гидродинамическое рассмотрение (приближение сплошной среды) еще неприменимо, но движение атомов уже нельзя считать свободномолекулярным, наиболее целесообразно использовать статистический метод частиц в ячейках [6]. Этим методом ниже рассмотрена задача прохождения потока атомов сквозь щель.

Рассматривается двумерный поток атомов, формирующийся в бесконечно длинной щели с диффузионно отражающими стенками. Используются также условия зеркального отражения на стенках для моделирования одномерного разлета газа. Ось x направлена вдоль распространения потока в щели, y – поперек щели, по оси z щель считается бесконечной.

Распределение по скоростям $\mathbf{v}$ проходящих через щель атомов бралось в виде

$$f_T(\mathbf{v}) = Cv_x \exp(-m\mathbf{v}^2/2T), \int d\mathbf{v} f_T(\mathbf{v}) = 1, -\infty < v_y, v_z < \infty, 0 < v_x < \infty. \quad (1)$$

Здесь m – масса атома, T – температура паров в бане, C – нормировочная постоянная. Распределение (1) соответствует максвелловской функции распределения в объеме, граничащем с щелью и являющимся источником частиц (в бане).

Аналогичное (1) распределение при $T = t_w$, где T_w – температура стенок, использовалось для диффузно отраженных частиц. Считалось, что атомы на концах щели (при $x = 0$ и $x = l$) исчезают (l – глубина щели).

Для решения задачи использовался алгоритм, основанный на статистической модели Яницкого и Белоцерковского, предложенной для рассмотрения эволюции пространственно неоднородного идеального газа [6]. Основное преимущество этой модели состоит в том, что она, в отличие от известной модели Берда, является строго марковской.

Алгоритм счета в общих чертах имеет следующий вид. На входе в программу задаются: N_0 – равновесная плотность паров на входе в щель, T_0 – температура паров на входе в щель (температура стенок полагалась равной температуре паров на входе $T_0 = T_w$); S_x, S_y – размеры расчетной области (поперечного сечения щели) по осям x и y; n_x, n_y – число ячеек по x и y. Кроме того, задается ожидаемое среднее число частиц в ячейках вблизи входа в щель n, масса атома m и сечение σ упругого атом-атомного столкновения с рассеянием на большие углы (подробнее см. [4, 5]). Плотность и температура на входе в щель задают плотность поступающего потока атомов $j_0 = N_0 v_f/2$ и, соответственно, полное число частиц, проходящих через единицу длины щели в единицу времени $J_0 = S_y j_0$ (здесь $v_f = \sqrt{\frac{2T_0}{\pi m}}$ – средняя скорость вбрасываемых частиц). В установившемся режиме такое же число частиц J_0 должно в среднем исчезать на входе и выходе щели.

Вводимые параметры задают размеры ячеек $h_x = S_x/n_x$, $h_y = S_y/n_y$ по осям x и y, а также $n_f = nv_f\Delta t/h_x$ – среднее число атомов, вбрасываемых в одну граничную ячейку за шаг по времени, который брался равным $\Delta t = 0,3h_xh_y/(h_x + h_y)v_f$.

Для того, чтобы избежать длительных расчетов, установление потока атомов на начальной стадии рассматривалось без учета столкновений. Далее циклически повторялась следующая процедура.

1. В ячейки, прилегающие к началу щели, приходит $n_\Sigma = n_fn_y$ частиц со скоростями, заданными распределением (1).

2. Всем частицам во всех ячейках (включая прошедшие ранее) придаются новые координаты: $\mathbf{r}' = \mathbf{r} = \mathbf{v}\Delta t$, где $\mathbf{r}$ и $\mathbf{v}$ – радиус-вектор и скорость соответствующей частицы. При этом прослеживается выполнение граничных условий: частицы, пересекшие границы входа и выхода трубки, далее не рассматриваются; частицы, пересекшие боковые поверхности, приобретают новые значения скорости в соответствии с законом диффузного отражения.

3. В каждой пространственной ячейке i с числом частиц n_i разыгрывается $n_i(n_i + 1)/2$ столкновений. Столкновение считается состоявшимся с вероятностью $P_i = (\Delta t\sigma u/h_xh_y)n(J_0\Delta t/n_\Sigma)$, где $\mathbf{u}$ – относительная скорость сталкивающихся частиц. При этом относительная скорость сталкивающихся частиц поворачивается на случайный угол (подробнее см. [4, 5]).

В процессе счета вычисляются следующие средние по времени и по частицам в ячейках величины: 1) среднее число частиц в ячейке $\bar{n}$; 2) средние компоненты скоростей $\overline{< v_x >}, \overline{< v_y >}, \overline{< v_z >}$ и 3) средние квадратов компонент скоростей $\overline{< v_x^2 >}, \overline{< v_y^2 >}, \overline{< v_z^2 >}$ и модуля скорости $\overline{< v^2 >}$.

По окончании расчета вычислялась плотность и температура в каждой ячейке по формулам: $N = \bar{n}N_0/2n$, $T = (\overline{< v^2 >} - \overline{< v >^2})m/3$. Для того, чтобы избежать заметного вклада моментов времени, соответствующих неустановившемуся режиму, при усреднении по времени исключалась не только начальная стадия расчетов без столкновений, но и некоторый временной интервал, следующий непосредственно за этой стадией.

Расчеты показывают, что влияние столкновений на угловое распределение вылетевших частиц начинает сказываться уже тогда, когда с длиной свободного пробега сравнивается глубина щели (см. рис. 1). Уже при $l\sigma N_0 \approx 0,3$ пик распределения в области малых углов заметно уменьшается (при этом ширина щели d в единицах дли-

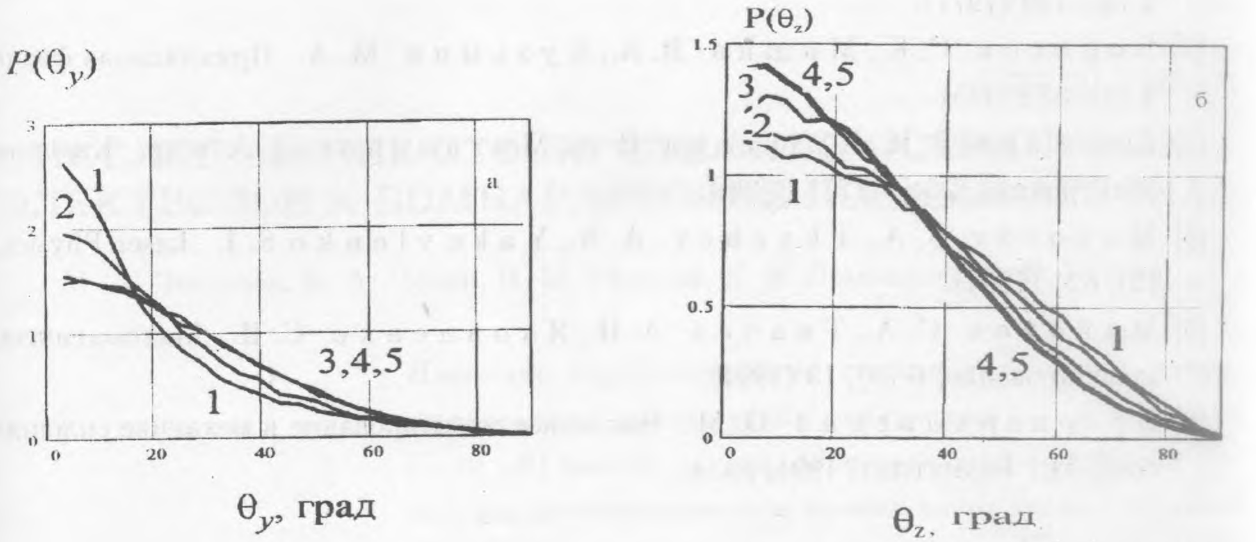

Рис. 1. *Распределение вылетевших из щели атомов а) по углу Θ_y в плоскости, перпендикулярной щели; б) по углу Θ_z в плоскости, параллельной щели (проходящей через ее середину): Без учета столкновений (1), при $N_0 = 3 \cdot 10^{13}$ $см^{-3}$, $l\sigma N_0 \approx 0,32$, $\Delta l\sigma N_0 \approx 0,03(2)$; $N_0 = 2 \cdot 10^{14}$ $см^{-3}$, $l\sigma N_0 \approx 2,2$, $\Delta l\sigma N_0 \approx 0,2(3)$; $N_0 = 6 \cdot 10^{14}$ $см^{-3}$, $l\sigma N_0 \approx 6,5$, $\Delta l\sigma N_0 \approx 0,55(4)$; $N_0 = 1,2 \cdot 10^{15}$ $см^{-3}$, $l\sigma N_0 \approx 13$, $\Delta l\sigma N_0 \approx 1,1(5)$.*

ны свободного пробега очень мала, $d\sigma N_0 \approx 0,05$). Когда же длина свободного пробега становится сравнимой с глубиной щели ($l\sigma N_0 > 2$), распределения по углам в плоскости, перпендикулярной щели, и в плоскости, параллельной щели (проходящей через ее центр), практически совпадают.

В связи с этим отметим следующее обстоятельство. Часто распределение по углам частиц, вылетевших из узкого канала, рассматривают следующим упрощенным образом. Длину канала укорачивают до длины свободного пробега, а дальнейшее движение частиц считают свободномолекулярным. Приводимые здесь результаты расчетов показывают, что по крайней мере для двумерной геометрии (в случае щели) это приближение неоправданно. Точнее просто принять, что распределение соответствует излучению частиц равновесным источником.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Letokhov V. S., Mishin V. I., Puretzky A. A. Prog. Quant. Electron.,

5 (3), 139 (1977).

[2] Борисов С. К., Мишин В. А., Кузьмин М. А. Прикладаная физика, **1** (1), 65 (1995).

[3] Держиев В. И., Кузнецов В. А., Михальцов Л. А. и др. Квантовая электроника, **23** (9), 771 (1996).

[4] Mayorov S. A., Tkachev A. N., Yakovlenko S. I. Laser Physics, 4 (3), 624 (1994).

[5] Майоров С. А., Ткачев А. Н., Яковленко С. И. Математическое моделирование, **6** (9), 13 (1994).

[6] Белоцерковский О. М. Численное моделирование в механике сплошных сред. М., Физматлит, 1994, гл. 4.

Институт общей физики РАН Поступила в редакцию 27 января 1997 г.