

电子束激发原子对金属蒸发的影响*

谢国锋 王德武 应纯同

(清华大学工程物理系, 北京 100084)

(2001 年 12 月 18 日收到 2002 年 2 月 27 日收到修改稿)

在原子蒸气激光同位素分离工程(AVLIS)中,金属受电子束的加热而熔化,并向真空蒸发.蒸气原子通过电子束的过程中,可能与电子发生非弹性碰撞,被激发到高能级.在膨胀的过程中,高能级的原子通过与原子的非弹性碰撞消激发,将原子内的电子能量转换为蒸气的平动能.为了分析电子束与原子作用对蒸气的密度、速度和温度等物理特性的影响,采样直接模拟蒙特卡罗法(DSMC)模拟钷原子蒸发过程.模拟结果表明,电子束与原子的作用使得原子蒸气的速度增加,密度减小,温度升高.

关键词:金属蒸发, AVLIS, DSMC, 电子枪

PACC: 4745, 5100

1. 引 言

蒸发动力学过程是激光分离同位素中的一个重要研究课题.原子蒸气的物理特性,如密度分布、速度分布和温度分布直接关系分离器系统蒸气原子的有效利用和光电离效果.蒸发动力学的数值模拟主要有两种方法,DSMC 和 BGK 模型方程法.文献[1, 2]分别用 DSMC 模拟了一维和二维平面蒸发过程.文献[3—5]分别用 BGK 模型方程法对一维平面、球面和柱面蒸发进行了数值模拟.文献[6—8]模拟了长槽型坩埚二维窄平面金属原子蒸发动力学过程.在这些文章中,都将单原子分子看成没有内部能级结构的简单分子,虽然单原子分子不像双原子或多原子分子那样具有振动和转动能级,但是某些原子,例如铀、钷、钷,具有寿命较长的亚稳态能级,处于亚稳态能级的原子在蒸发过程中,不通过电磁辐射的方式消激发,而是通过原子之间的非弹性碰撞消激发.这些原子的内部能级结构就会对蒸气特产生影响.蒸气在膨胀过程中,原子的内部能量通过碰撞转移为蒸气的迁移能量.一些实验^[9, 10]表明对于铀、钷等金属,原子蒸气的速度比从蒸发液面的温度估算出的速度要快.这是因为这些金属原子具有能量较低的亚稳态能级,蒸发源液面的温度很高,大量的

原子处于亚稳态能级,这些原子在绝热碰撞过程中原子消激发,使得蒸气速度增加.文献[11, 12]用 DSMC 方法,以不同的处理非弹性碰撞的模型模拟了金属原子蒸发过程,并且和实验结果以及不考虑原子内部能量的模拟结果做了比较.一些研究结果^[13—16]表明,对于电子枪加热金属蒸发的情况,测量的蒸气速度比考虑蒸发液面能级分布的模拟结果还高,或者比欧姆法加热金属蒸发的蒸气速度高,这表明蒸气膨胀的过程不是绝热的.蒸气原子在膨胀过程中,会与电子束发生作用,高能电子将一部分原子激发,原子之间通过非弹性碰撞消激发,将电子束的能量转化为蒸气的迁移能量.本文用 DSMC 方法模拟考虑电子束与原子作用的金属(钷)原子蒸发过程,并且同不考虑电子束与原子作用的模拟结果做比较.

2. 理论基础

2.1. DSMC 概述

蒸发动力学是稀薄气体动力学的一个分支,稀薄气体动力学问题用 Boltzmann 方程描述:

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \cdot \frac{\partial f}{\partial r} + X \cdot \frac{\partial f}{\partial \xi} = \iint (\mathcal{J}(r, \xi', t)) \mathcal{J}(r, \xi_1, t) - \mathcal{J}(r, \xi, t) \mathcal{J}(r, \xi_1, t))$$

* 国家“九五”科技攻关项目(批准号 96-A18-01-02)资助的课题.

$$\times g\sigma d\Omega d\xi_1. \quad (1)$$

然而直接求解 Boltzmann 方程非常困难,常用的方法是模型方程法和蒙特卡罗模拟法.在各种蒙特卡罗方法中,直接蒙特卡罗方法(direct-simulation Monte Carlo method)应用最为广泛.DSMC 的基本思想是将蒸气原子间的相互碰撞视为一个随机过程,用少量模拟粒子代替数目众多的真实气体分子,对每个模拟粒子进行跟踪,记录它们的位置和速度,并模拟它们之间随机发生的碰撞,然后对它们采样获得宏观参数.随着计算机运算速度和存储容量的飞速发展,DSMC 方法成为目前研究稀薄气体动力学多维问题、强烈非平衡态问题和化学反应最主要的方法.

在模拟过程中处理碰撞时要选择合适的分子模型,本文选择可变刚球模型^[17].在计算过程中,模拟粒子的碰撞是相当费时的一部分.处理碰撞的方法很多,其中非计时法^[18]和零碰撞技术^[19]计算量与模拟粒子数成正比,是可取的方法.本文采用非计时法.

2.2. 电子束与原子的作用

原子在通过电子束的过程中,高能电子和原子将发生碰撞,有一定的概率将原子激发或者电离.在 Δt 时段中,一个原子被电子束激发到某个能级的概率为

$$p = 1 - e^{-n_e V_r \sigma \Delta t}, \quad (2)$$

其中 σ 是电子与原子的激发截面, V_r 是原子与电子的相对速度,电子速度远大于原子速度,所以 $V_r =$

V_e , $V_e = \sqrt{\frac{2eU}{m_e}}$ 是电子速度, n_e 是电子束的数密度,

$$n_e = \frac{j}{eV_e}, j = \frac{P}{Uw} \quad (3)$$

P 是电子枪单位长度的功率, U 是加速电压, w 是电子束束宽.

电子束打在金属上会发生背散射^[20],背散射的电流与金属原子的原子序数有关,与加速电压的关系不大,对于钷,背散射电流约是入射电流的 45%.

2.3. 亚稳态原子和非弹性碰撞

钷原子基态简并度 $g = 5$,基态之上有四个亚稳态能级,分别是 215($g = 7$),513($g = 9$),999($g = 11$),1719($g = 13$) cm^{-1} .原子在膨胀过程中,一部分被电子束激发,一些激发态原子,由于能级寿命很短,能量以电磁辐射的方式损失.亚稳态能级寿命较

长,处于亚稳态的原子在蒸发膨胀的过程中,由于禁忌跃迁,不能以电磁辐射的方式消激发,但是可以通过原子之间的非弹性碰撞消激发,原子的内能转变为动能,使得蒸气原子的密度、速度、温度等特性发生改变.

用 DSMC 方法模拟亚稳态原子消激发必须根据两个原子碰撞前的速度以及碰撞前所处的能级求出经过非弹性碰撞之后,两个原子各自的速度,以及碰撞后两个原子所处的能级.

两个原子发生非弹性碰撞,满足动量守恒和能量守恒,在质心坐标系中,满足下面关系,

$$E_k + E_i + E_j = E_{k'} + E_{i'} + E_{j'}, \quad (4)$$

其中 E_k 和 $E_{k'}$ 分别表示碰撞前后两个原子相对质心系的总动能,碰撞前,两个原子处于亚稳态 i 和 j ,碰撞后两个原子处于亚稳态 i' 和 j' ,其中 E_i 是 i 亚稳态能量.碰撞后两个原子处于哪个能级是不确定的,是一个概率事件.处于能级 i' 和 j' 的概率可以通过下式计算:

$$p(i', j', E_{k'}) = \frac{g_{i'} g_{j'} E_{k'}}{\sum g_{i'} g_{j'} E_{k'}}, \quad (5)$$

其中 $g_{i'}$ 和 $g_{j'}$ 分别表示亚稳态 i' 和 j' 的简并度,可以通过(5)式进行抽样来决定这次碰撞发生后,两个原子处于亚稳态 i' 和 j' 的概率,然后根据(4)式求出 $E_{k'}$,

$$E_{k'} = \frac{m}{4} |v_r'|^2, \quad (6)$$

其中 $v_r' = v_1' - v_2'$ 是碰后两原子的相对速度.求出 $E_{k'}$ 后根据(6)式就可以求出碰后两原子相对速度的大小 $|v_r'|$.从统计观点看,大量原子碰撞,碰后两原子的相对速度 v_r' 应该服从空间各向同性分布.对空间各向同性分布进行抽样,可以完全确定碰后两原子的相对速度 v_r' .再根据动量守恒方程,可以完全确定碰后两原子的速度大小和方向.

3. 模拟结果及分析

二维平面真空自由蒸发示于图 1.

3.1. 电子束与原子作用对蒸气特性的影响

蒸发源液面温度为 2500K,电子与原子碰撞总截面 10^{-15}m^2 ,电子枪功率 5kW/cm,电压 5kV,束宽 5mm,束偏转半径 5cm,模拟区域宽 0.6m,高 0.4m,蒸发源液面半宽度 5mm,壁面温度 350K,壁面吸收

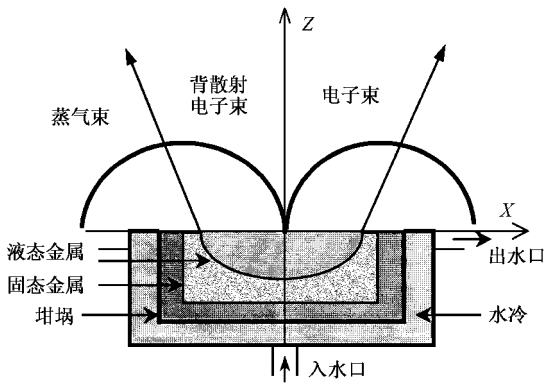


图 1 蒸发模型示意图

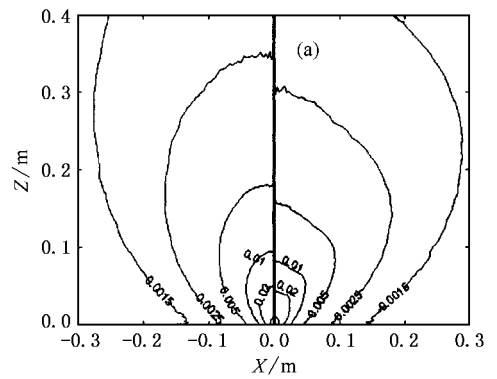
系数 0.5. 考虑电子束与原子作用的情况下, 蒸气密度、速度和温度与不考虑电子束作用的比较如图 2 所示. 图中左边边表示不考虑电子束与原子作用, 右边边则考虑. 图中的数据都是归一化的, 温度的归一化因子是液面温度 T_s , 速度归一化因子是 $V_s = \sqrt{2RT_s}$, R 是气体常数, 原子数密度归一化因子是蒸发液面处的饱和数密度 n_0 .

蒸气原子在膨胀过程中通过电子束的区域时, 电子束将原子激发到亚稳态, 原子吸收了电子束的能量, 原子之间通过非弹性碰撞消激发, 将这部分能量转化为蒸气的平动能, 所以蒸气的速度增加、密度减小、温度升高. 对于某一固定位置, 例如 $X = 0, Z = 0.4$ 处, 不考虑电子束作用情况下, 蒸气的纵向速度和温度分别是 628m 和 157K; 而考虑电子束的作用, 分别为 680m 和 250K. 从 (c) 图看出, 电子束与原子的作用对温度场的影响很大, 在电子束轨迹附近, 由于被电子激发的原子吸收了电子部分能量, 通过原子间的碰撞将这种能量转化为平动能, 所以在膨胀过程中延缓了温度的降低.

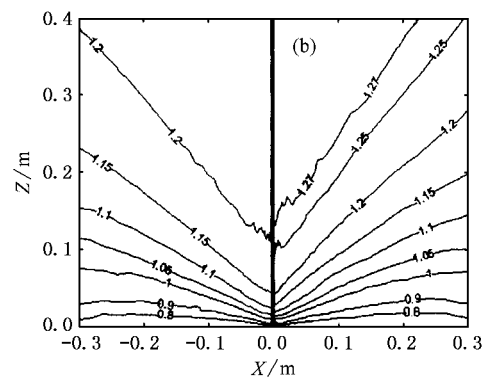
不考虑电子束作用的情况下, 蒸气的各种物理量对于 Z 轴是对称的. 而考虑电子束作用的情况下, 各种物理量不再对称, 例如蒸气的温度分布如图 3 所示 (图中入射电子束在右边, 背散射束在左边). 因此电子束打在金属上产生背散射电子束, 背散射的束流强度大约入射束的 45%, 背散射束所在的半边和入射束所在的半边比较, 蒸气的速度和温度都要低一些.

3.2. 电子枪参数的影响

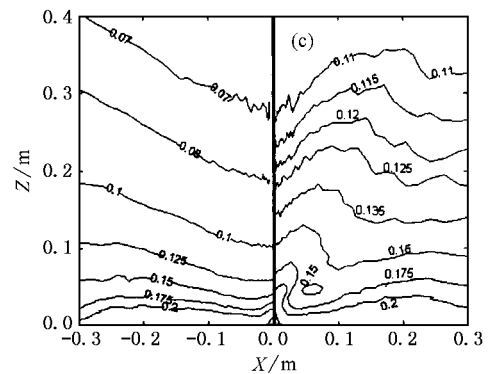
电子枪的参数影响电子束对原子的作用, 主要因素是束流强度. 当电子枪功率不变, 束流强度分别



(a) 密度比较



(b) 速度比较



(c) 温度比较

图 2 电子束与原子作用对蒸气密度、速度和温度的影响



是 1.0A 和 0.3A 时, Z 轴上的纵向速度和温度分布如图 4 所示. 束流越强, 原子与电子碰撞的概率越大, 蒸气的宏观速度越高, 温度越高.

3.3. 电子与原子碰撞截面的影响

电子与原子碰撞激发的截面与入射电子的能量、原子的能级有关, 实验和理论上都难以确定. 截

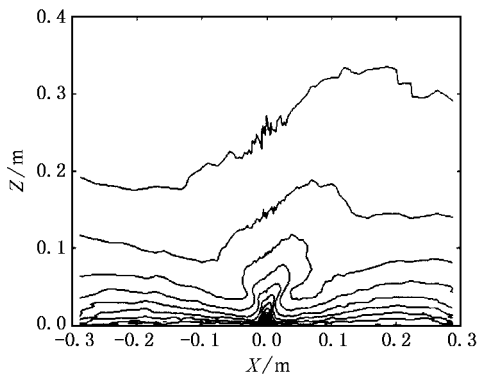
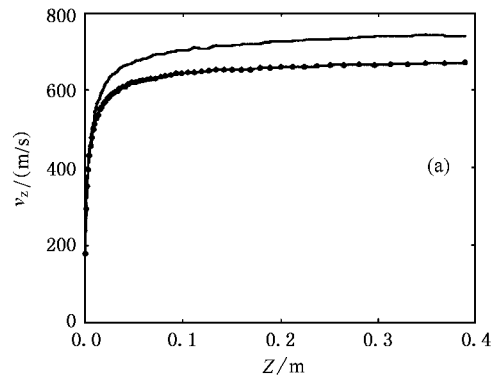
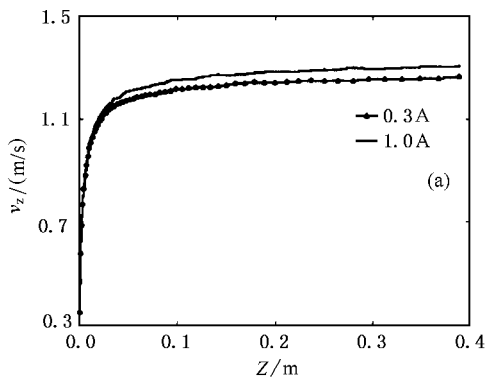


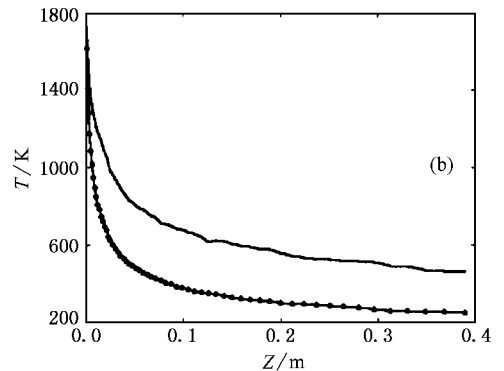
图3 考虑背散射情况下蒸气的温度分布



(a) 纵向速度

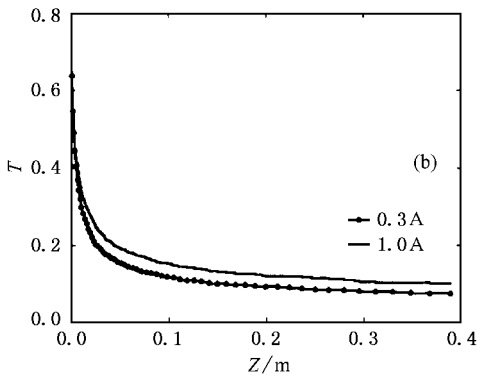


(a) 纵向速度



(b) 温度

图5 不同激发截面 Z 轴上蒸气的纵向速度和温度分布



(b) 温度

图4 不同束流强度 Z 轴上蒸气的纵向速度和温度分布

面对结果的影响较大,激发总截面分布为 $5.0 \times 10^{-15} \text{ m}^2$ 和 $1.0 \times 10^{-15} \text{ m}^2$, Z 轴上的纵向速度和温度分布如图5所示。

图中带点的数据表示总截面为 $1.0 \times 10^{-15} \text{ m}^2$, 不带点的表示总截面为 $5.0 \times 10^{-15} \text{ m}^2$. 截面越大,原子与电子碰撞的概率越大,电子的能量转化为蒸气的平动能就越多。

4. 结 论

本文用 DSMC 方法模拟了钷原子二维窄平面蒸发动力学过程,考虑了电子束与蒸气原子的作用,分析了电子束对蒸气特性的影响。

1. 钷原子在通过电子束的区域时,被电子束激发,吸收了电子束的能量,在膨胀的过程中,原子之间通过非弹性碰撞消激发,将这部分能量转化为蒸气的平动能,使得蒸气的速度增加、密度减小、温度升高。

2. 电子枪的束流强度对蒸气影响比较明显,束流越强,原子与电子碰撞的概率越大,蒸气的宏观速度越高,温度越高。

3. 电子和原子的激发截面对蒸气的影响很明显,截面越大,电子的能量转化为蒸气的平动能越多,蒸气的宏观速度越高,温度越高。

- [1] Sibold D and Urbassek H M 1993 *Phys. Fluids A* **5** 243
- [2] Kong Y F, Ying C T and Wang D W 1996 *J. Tsinghua University* **36** 50 (in Chinese) [孔羽飞、应纯同、王德武 1996 清华大学学报 **36** 50]
- [3] Aoki K, Sone Y and Yamada T 1990 *Phys. Fluids A* **2** (10) 1867
- [4] Sone Y and Sugimoto H 1993 *Phys. Fluids A* **5** (6) 1491
- [5] Sone Y, Sugimoto H 1995 *Phys. Fluids* **7** 2072
- [6] Xiao J X and Wang D W 1999 *J. Tsinghua University* **39** 52 (in Chinese) [肖踞雄、王德武 1999 清华大学学报 **39** 52]
- [7] Xiao J X and Wang D W 2000 *Chinese Atomic Energy Science and Technology* **34** 244 (in Chinese) [肖踞雄、王德武 2000 原子能科学技术 **34** 244]
- [8] Xie G F, Wang D W and Ying C T 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 584 (in Chinese) [谢国锋、王德武、应纯同 2002 物理学报 **51** 584]
- [9] Uetake N, Asano T and Suzuki T 1991 *Rev. Sci. Instrum.* **62** 1942
- [10] Asano T, Uetake N, Suzuki K, Shinkuu 1991 *J. Vac. Soc. Jpn.* **34** 238
- [11] Nishimura A and Shibata T 1995 *J. Nucl. Sci. Technol.* **32** 905
- [12] Balakrishnan J, Boyd I D and Braun D G 2000 *J. Vac. Sci. Technol. A* **18** 907
- [13] Nishimura A, Arisawa T, Ogura K, Ohba H and Shibata T 1991 *Prog. Rep. At. Collision Res. Jpn.* **17** 117
- [14] Nishimura A, Arisawa T, Ohba H, Ogura K, Shibata T, Shinkuu 1992 *J. Vac. Soc. Jpn.* **35** 305
- [15] Nishimura A, Ohba H, Ogura K and Shibata T 1992 *J. Nucl. Sci. Technol.* **29** 1054
- [16] Wang Y G, Wang D W, Kong Y F, Yin M, Bao C Y and Ying C T 1994 *Chinese Journal of Nuclear Science and Engineering* **14** 364 (in Chinese) [王永刚、王德武、孔羽飞、严敏、包成玉、应纯同 1994 核科学与工程 **14** 364]
- [17] Bird G A 1994 *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows* (New York : Oxford University Press) p40
- [18] Bird G A 1994 *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows* (New York : Oxford University Press) p219
- [19] Koura K 1986 *Phys. Fluids* **29** 3509
- [20] Schiller, Siegfried 1982 *Electron beam technology* (New York : Wiley) p36

The effect of atoms excited by electron beam on metal evaporation *

Xie Guo-Feng Wang De-Wu Ying Chun-Tong

(Department of Engineering Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

(Received 18 December 2001 ; revised manuscript received 27 February 2002)

Abstract

In atomic vapor laser isotope separation (AVLIS), the metal is heated to melt by electron beams. The vapor atoms may be excited by electrons when flying through the electron beam. The excited atoms may be deexcited by inelastic collision during expansion. The electronic energy transfers translational energy. In order to analyse the effect of reaction between atoms and electron beams on vapor physical parameters, such as density, velocity and temperature, direct-simulation Monte Carlo method (DSMC) is used to simulate the 2-D gadolinium evaporation from long and narrow crucible. The simulation results show that the velocity and temperature of vapor increase, and the density decreases.

Keywords : metal evaporation, AVLIS, DSMC, electron gun

PACC : 4745, 5100

* Project supported by the State Key Technology R & D Programme of China (Grant No. 96-A18-01-02).