第 51 卷 第 3 期 2002 年 3 月
1000-3290/2002/51(03)/0584-06

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.51,No.3,March,2002
©2002 Chin. Phys. Soc.

电子枪功率与束宽对金属原子蒸气特性的影响

谢国锋 王德武 应纯同

(清华大学工程物理系,北京 100084)

(2001 年 7 月 2 日收到;2001 年 8 月 9 日收到修改稿)

在原子法激光同位素分离工程中,电子枪加热金属铀产生的原子蒸气的密度、速度以及温度等宏观量分布特性是非常重要的参数.为了分析电子枪功率和束宽对原子蒸气密度、速度、温度、质量通量和速度分布等物理特性的影响,采用直接 Monte Carlo 方法用柱坐标模拟了铀原子平面蒸发动力学过程.在电子枪加热方式下,蒸发源温度场不均匀,而且温度场随电子枪功率和束宽变化.着重研究这种变化对蒸气各种物理特性的影响.模拟结果表明,电子枪功率越高,蒸气径向宏观漂移速度越大,蒸发量越大;电子束束宽越窄,蒸发量越大.

关键词:金属蒸发,原子法激光同位素分离,直接 Monte Carlo,电子枪

PACC:4745,5100

1 引 言

铀原子蒸发动力学过程是激光分离同位素中一个重要研究课题.铀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.文献[1]用直接 Monte Carlo(DSMC)方法模拟了二维无限长窄平面自由真空蒸发的蒸发动力学过程,文中假设蒸发源表面温度均匀.实际上,电子枪加热方式下,蒸发源表面温度不均匀,温度场随电子枪功率和束宽变化而变化.本文从实际出发,着重研究电子枪功率和束宽变化对蒸气物理特性的影响.

2 理论基础

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:

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\boldsymbol{\xi}\cdot\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{r}}+\boldsymbol{X}\cdot\frac{\partial f}{\partial \boldsymbol{\xi}}=\iint\left(f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{\xi}',t)f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{\xi}_1',t)-f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{\xi},t)f(\boldsymbol{r},\boldsymbol{\xi}_1,t)\right)g\sigma\,\mathrm{d}\Omega\,\mathrm{d}\xi_1. \quad (1)$$

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 Monte Carlo 模拟法.在各种 Monte Carlo 方法中,DSMC 方法应用最为广泛.DSMC 方法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.

由 Bird 建立的 DSMC 方法[2]处理问题的基本步骤如下:

1)将要研究的空间进行单元格划分,单元格 Δr 的大小根据具体情况而定,但应满足 $\Delta r<\lambda$,λ 是分子的平均自由程;选取适当的时间步长 Δt_m,满足 $\Delta t_m<\Delta t_p$,Δt_p 是平均碰撞时间.

2)各个单元中所有模拟粒子在时间步长 Δt_m 内按各自的速度移动到相应的位置,

$$\boldsymbol{r}_{n+1}=\boldsymbol{r}_n+\boldsymbol{v}_n\Delta t_m, \quad (2)$$

这一步不考虑碰撞,相当于 Boltzmann 方程中的迁移项.

3)模拟每个单元格中粒子的相互碰撞,计算出每个粒子碰撞后的速度,这一步只考虑碰撞,各个粒子的位置不改变,这相当于 Boltzmann 方程中的碰撞项.

重复 2)和 3)两步,判断到达稳态后对模拟粒子进行采样,然后对采样进行统计平均,得到宏观物理量.

设碰撞前两个粒子的速度分别是 $\boldsymbol{c}_1$ 和 $\boldsymbol{c}_2$,碰撞后两个粒子的速度分别是 $\boldsymbol{c}_1'$ 和 $\boldsymbol{c}_2'$,碰撞前后的相对速度分别是 $\boldsymbol{g}=\boldsymbol{c}_1-\boldsymbol{c}_2$,$\boldsymbol{g}'=\boldsymbol{c}_1'-\boldsymbol{c}_2'$.碰撞过程

满足动量守恒和能量守恒,从动量守恒和能量守恒式解得 $|g| = |g'|$,表明碰撞前后两个粒子的相对速度大小不变,只改变相对速度的方向.从统计观点来看,对于刚球模型,碰撞后两个粒子的相对速度方向在空间是各向同性分布的,按照各向同性进行抽样,就可以确定相对速度大小和方向.通过动量守恒方程,就可以确定碰撞后两个原子的速度.

在处理碰撞中还要选择分子模型,本文选择可变刚球模型[3].在计算过程中,模拟粒子的碰撞是相当费机时的一部分.处理碰撞的方法很多,其中 Bird 的计时法[2]和非计时法[3]及 Koura 的零碰撞技术[4]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.

在 DSMC 方法中,网格的作用是选取碰撞对和对分子进行宏观量统计,合理地设计网格很重要.每个网格中的模拟分子不能太多也不能太少,一般让每个网格中有几十个模拟分子最佳.网格的大小应该根据这个原则而变化,例如真空蒸发问题,蒸气密度在空间变化很大,所以网格的大小也不能固定,要采用变网格的方法,密度大的地方网格小,密度小的地方网格大.

在真空蒸发情况下,蒸气原子从蒸发源注入到真空的粒子数通量为

$$\Phi = \frac{1}{4} n_v V_T, \tag{3}$$

$$n_v = \frac{p_v}{kT_0}, \tag{4}$$

$$V_T = \sqrt{8kT_0/\pi m}, \tag{5}$$

其中 T_0 是蒸发源表面温度,p_v 是在该温度下原子的饱和蒸气压,m 是原子质量.

3　模拟结果及分析

本文的模拟区域如图 1 所示.蒸发源是二维无限长窄平面,y 轴是平面蒸发源的对称轴.本文网格采用柱坐标,模拟区域 $R(0,0.8\text{m})$,$\theta(0,90°)$.边界条件如下:蒸发源对于返回液面的原子为汇,$R = 0.8\text{m}$ 的圆弧为汇,原子炉下壁面,即 $\theta = 0$ 处蒸发源以外的部分,吸收系数为 0.5,这样简化的边界条件基本符合原子炉的形状和蒸发的物理过程.

电子枪加热坩埚内的金属,熔化形成熔池,根据薄勇的计算[5],电子枪的功率和束宽影响熔池表面的温度和熔池宽度,图 2(a)给出电子枪功率为

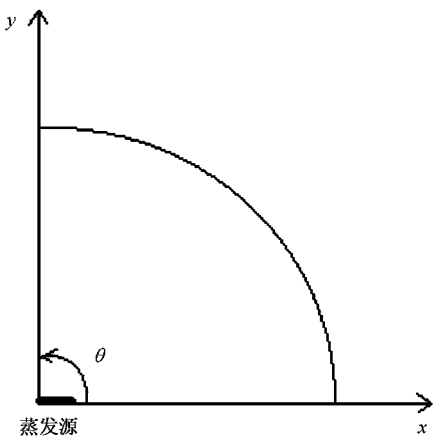


图 1　模拟区域

5kW、半束宽分别为 3,4 和 5mm 情况下熔池表面的温度分布;(b)给出电子枪功率分别为 4,5 和 6kW、半束宽为 3mm 情况下熔池表面的温度分布.图中温度分布曲线的拐点处为熔池边缘.电子束束宽增加,中心最高温度下降,$|\nabla T|$ 减小,熔池变宽.电子枪功率增加,熔池表面温度升高,熔池宽度增加.

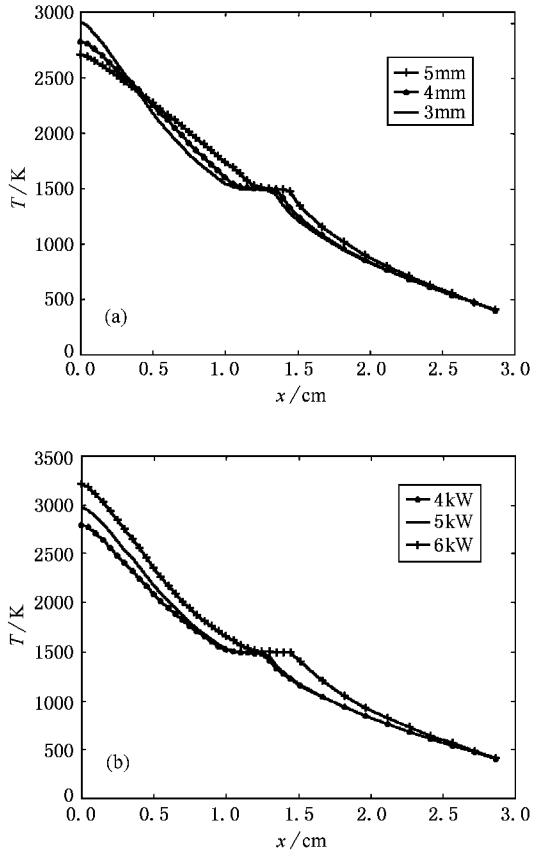
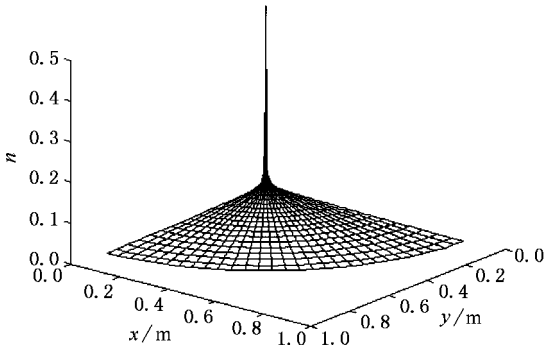


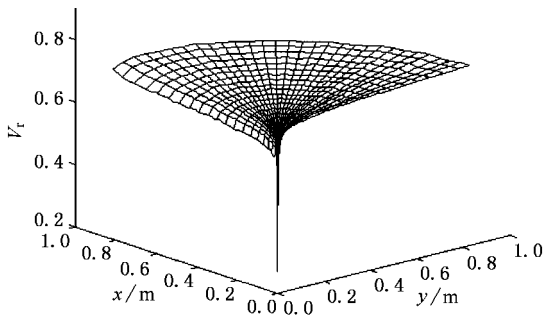
图 2　电子枪不同束宽熔池表面温度分布(a)和电子枪不同功率熔池表面温度分布(b)

3.1 蒸气的密度、速度和温度分布

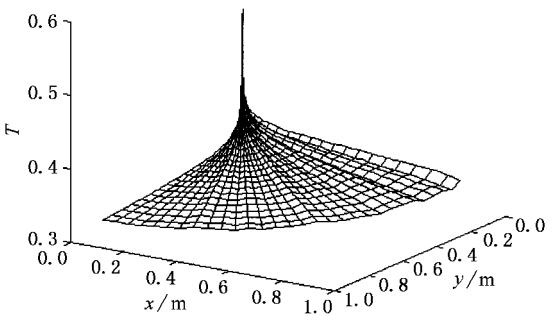
图 3 为电子枪功率为 5kW、半束宽为 3mm 情况



(a)密度



(b)径向速度



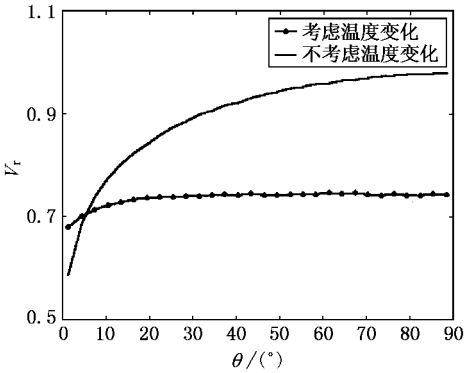
(c)温度

图 3 密度、速度和温度分布

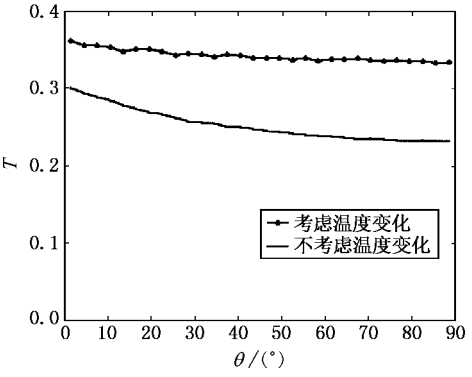
下,铀金属原子蒸气的归一化密度、速度和温度分布.密度的归一化因子是 $n_\nu = p_\nu / kT_0$, T_0 是熔池表面中心温度,p_ν 是对应的饱和蒸气压;径向速度的归一化因子 $V_s = \sqrt{2kT_0/m}$;温度的归一化因子是 T_0.

3.2 考虑和不考虑蒸发源表面温度分布蒸气特性比较

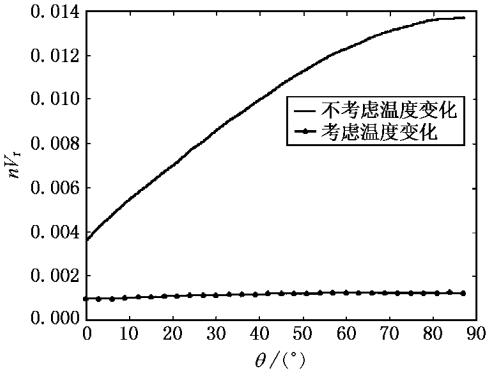
从图 2 可以看出,电子枪加热金属熔池,熔池表面的温度分布不均匀.而以往的研究没有考虑到熔池温度分布对蒸发的影响,例如文献[1]中假设熔池



(a)径向速度



(b)温度



(c)原子数通量

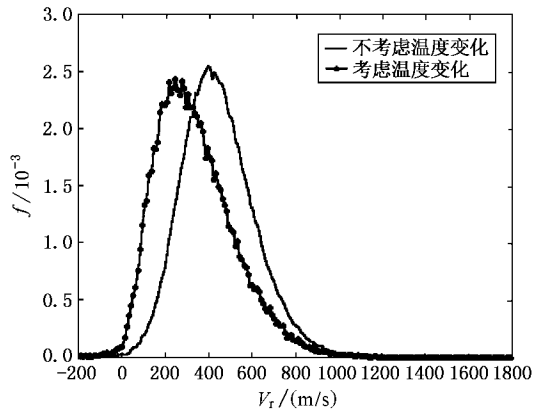
图 4 径向速度和温度比较

表面温度均匀分布,取该温度为熔池表面的中心温度,采用 DSMC 方法模拟了二维平面蒸发动力学过程.本文考虑熔池表面温度分布,并与假设熔池表面温度分布均匀的计算结果作了比较.图 4 是 R = 20cm 处,两种情况的径向速度、温度和原子数通量分布.电子枪功率为 5kW,半束宽为 3mm,原子数通

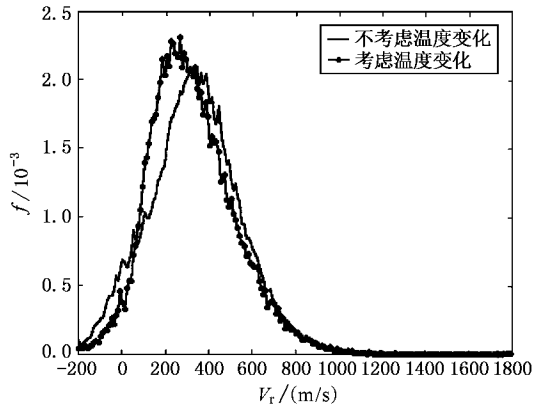
量的归一化因子为 $n_v V_s$.

假设熔池表面温度分布均匀的情况,由于认为整个熔池表面的温度就是熔池表面中心温度,从表面蒸发的原子数远远多于考虑熔池表面温度分布的情况,原子数通量远大于考虑熔池表面温度分布的情况,原子间的碰撞频繁程度也远大于考虑熔池表面温度分布的情况,所以蒸气的宏观径向漂移速度高,而温度低.

蒸发源表面的温度分布对于原子蒸气的速度分布函数也有影响.图 5 给出 $R = 20\text{cm}$,$\theta = 90°$ 和 $\theta = 10°$ 两处的径向速度分布.



(a) $\theta = 90°$



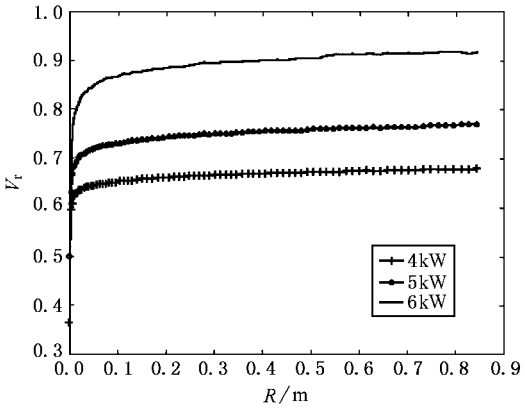
(b) $\theta = 10°$

图 5　速度分布函数

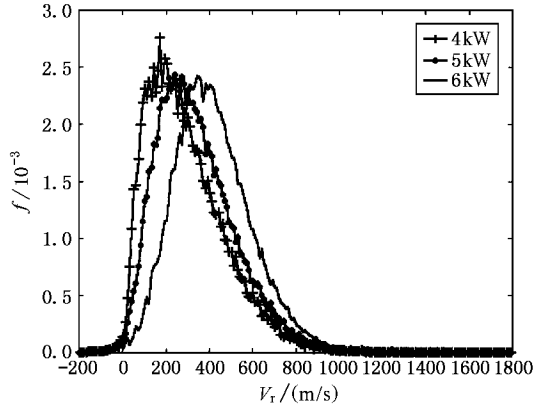
由于考虑了蒸发源表面的温度分布,原子数比不考虑温度分布的情况少,原子间碰撞少,所以速度分布函数的峰值位置与不考虑温度分布的情况向左移.

3.3　电子枪功率对蒸气特性的影响

电子枪的功率不同时,蒸气的特性不同.图 6 (a)给出 $\theta = 90°$,电子枪功率分别为 4,5 和 6kW 蒸气的径向速度,(b)给出 $R = 20\text{cm}$,$\theta = 90°$ 处,电子枪功率分别为 4,5 和 6kW 蒸气的径向速度分布函数.



(a)径向速度



(b)径向速度分布函数

图 6　不同功率的径向速度及其分布函数

电子枪的功率越高,熔池的温度越高,熔池宽度越宽,蒸发量越大,原子间的碰撞越频繁,所以蒸气的宏观径向漂移速度越高,表现在速度分布函数上就是峰值位置右移.

图 4(c)给出 $R = 20\text{cm}$ 处,原子数通量与 θ 角的分布关系.人们更感兴趣的是在一定角度内原子数通量占总通量的比例.

$$p = \frac{\int_{90°}^{\theta} nV_r \mathrm{d}\theta}{\int_{90°}^{0} nV_r \mathrm{d}\theta}. \tag{6}$$

图 7 给出不同电子枪功率下,p 与 θ 的关系.在电子枪功率为 6kW 的情况下,$\theta = 30°$,即 θ 在 30°到 90°范围内,蒸发量占蒸发总量的 78%,而 θ 在 60°到 90°范围内,蒸发量占蒸发总量的 43%.

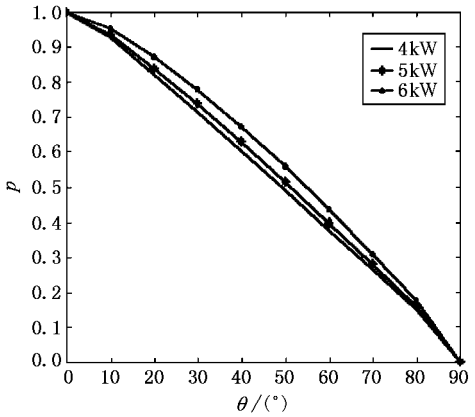


图 7 p 与 θ 的关系

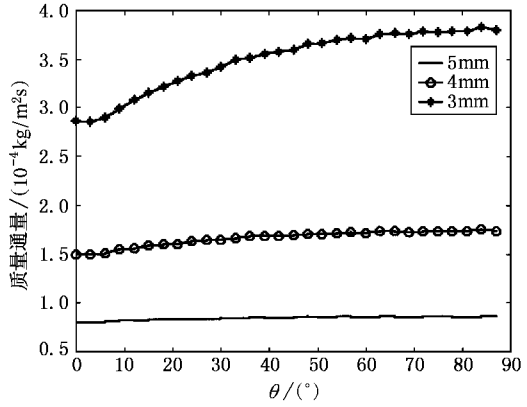


图 8 不同电子束束宽蒸气质量通量

3.4 电子束束宽对蒸发量的影响

从图 2 可以看出,同一电子枪功率下,电子束束宽不同,熔池表面的温度分布不同.束宽越窄,熔池表面中心温度越高,温度梯度越大.不同的束宽,金属的蒸发量不同.图 8 分别给出电子束半束宽为 3,4 和 5mm 情况下,R = 20cm 处的原子质量通量(没有归一化,单位:kg/m^{2}s).可见,电子束束宽越窄,质量通量越大,蒸发量越大.

4 结 论

在以往研究蒸发动力学文献中,都认为蒸发源液面温度均匀,以克努森数作为参变量,研究不同克努森数下,蒸气的各种特性.然而在原子法激光同位素分离工程中,以电子枪加热方式,蒸发源液面温度并不均匀.本文充分研究了熔池液面温度不均匀时,电子枪功率和束宽对蒸气特性的影响,模拟方法更接近工程实际情况.

1. 与以前不考虑蒸发源液面温度分布相比,考虑蒸发源液面温度分布的模拟结果表明,蒸气的径向宏观漂移速度降低,温度升高,蒸发量减少.

2. 电子枪功率不同情况下,功率越高,蒸发源液面温度越高,蒸发量越大,蒸气的径向宏观漂移速度越高.

3. 电子束束宽不同情况下,束宽越窄,蒸发源液面中心温度越高,蒸发源液面温度梯度越大,蒸发量越大.

[1] Kong Y F, Ying C T and Wang D W 1996 *J Tsinghua University*, **36** (6) 50(in Chinese)[孔羽飞、应纯同、王德武 1996 清华大学学报 **36** (6) 50]

[2] Bird G A 1976 *Molecular Gas Dynamics* (London: Oxford University Press)

[3] Bird G A 1994 *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows* (New York: Oxford University Press)

[4] Koura K 1986 *Phys. Fluids* **29** 3509

[5] Bu Y *Acta Phys. Sin.* submitted (in Chinese)[薄 勇 已投物理学报]

The influence of electron gun's power and electron beam's width on metal atom vapor physical parameters

Xie Guo-Feng Wang De-Wu Ying Chun-Tong
(*Department of Engineering Physics, Tsinghua University, Beijing* 100084, *China*)
(Received 2 July 2001; revised manuscript received 9 August 2001)

Abstract

The density, velocity and temperature distribution of the atomic flow are very important parameters in atomic vapor laser isotope separation (AVLIS). In order to analyse the influence of electron gun's power and electron beam's width on vapor physical parameters, such as density, velocity, temperature, mass flux, velocity distribution function, direct-simulation Monte Carlo method (DSMC) is used to simulate the two-dimensional metal evaporation from long and narrow crucible. By the electron-gun heating method, the temperature of evaporation source is not uniform. It is changed by the electron gun's power and electron beam width. Our research focuses on the changes of the physical parameters of atomic flow during the changes of the electron gun's power and the electron beam's width. The simulation results show that the larger the power of electron gun, the higher the radial velocity and the mass flux of vapor. The narrower the width of the electron beam, the higher the mass flux of vapor.

Keywords: metal evaporation, AVLIS, DSMC, electron gun
PACC: 4745, 5100