

直接模拟蒙特卡罗法模拟二维平面蒸发 亚稳态原子退激过程

谢国锋, 王德武, 应纯同

(清华大学 工程物理系, 北京 100084)

摘要:在原子法激光同位素分离(AVLIS)工程中,金属受电子束的加热而熔化,有一部分原子处于亚稳态能级,为了分析在蒸发过程中亚稳态原子退激对原子蒸气的速度、温度等物理特性的影响,采用直接模拟蒙特卡罗(DSMC)法模拟钷原子蒸发过程,分析亚稳态原子退激过程对蒸气特性的影响。模拟结果表明:亚稳态原子退激使得原子蒸气的速度增加,温度升高;克努森数 Kn 越小,原子间碰撞越频繁,亚稳态原子退激的影响越大。

关键词:金属蒸发;原子法激光同位素分离;直接模拟蒙特卡罗法;亚稳态;非弹性碰撞

中图分类号:G552.2 **文献标识码:**A **文章编号:**1000-6931(2002)02-0147-04

Direct-simulation Monte-Carlo Method for Metastable States' Deexcitation in 2-D Evaporation Process

XIE Guo-feng, WANG De-wu, YING Chur-tong

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

Abstract: In atomic vapor laser isotope separation, the metal is heated and melted by electron beam, and some atoms are on the metastable states. In order to analyse the influence of metastable states' deexcitation on vapor physical parameters, such as velocity, temperature, direct-simulation Monte-Carlo method is used to simulate the 2-D gadolinium evaporation from long and narrow crucible. The simulation results show that the metastable states' deexcitation increases the velocity and temperature of the vapor, and the smaller Kn is, the more frequently atoms collide, the larger influence of metastable states' deexcitation is.

Key words: metal evaporation; atomic vapor laser isotope separation; direct-simulation Monte-Carlo method; metastable states; inelastic collision

金属原子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。金属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到分离器系统蒸气原子的有效利用和光电

离效果。文献[1]用直接模拟蒙特卡罗(DSMC)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,但它未考虑亚稳态原子退激过程,实验测得的数据和不考虑亚稳态

收稿日期:2001-01-02;修回日期:2001-09-04

作者简介:谢国锋(1975—),男,湖南湘潭人,在读博士研究生,核燃料循环与材料专业

原子退激过程的理论计算结果有一定差异。为了更准确地模拟金属原子蒸发过程,本工作采用 DSMC 法模拟亚稳态原子退激过程,并分析它对原子蒸气特性的影响。

1 理论基础

二维平面真空自由蒸发示意图示于图 1。

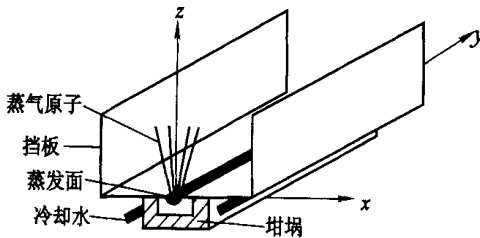


图 1 蒸发模型示意图

Fig. 1 The model of evaporation

在高真空的原子炉中,线性电子枪产生的高能电子束轰击坩埚中的长条形金属,金属熔化,一部分金属原子向真空蒸发。

1.1 DSMC 法概述

DSMC 法是研究蒸发等稀薄气体动力学问题的常用数值方法。DSMC 法的基本思想是:将蒸气原子间的相互碰撞视为一随机过程,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,获取宏观参数。

用 DSMC 法模拟蒸发,需适当选择分子模型和网格划分方法。本工作采用可变刚球分子模型^[2]和可变网格。另外,在处理原子碰撞时,应选用既精确又高效的方法,本工作采用 K. Koura 的零碰撞技术^[3]。

1.2 亚稳态原子和非弹性碰撞

钪原子基态简并度 $g = 5$,基态之上有 4 个亚稳态能级,分别是 $215 (g = 7)$ 、 $513 (g = 9)$ 、 $999 (g = 11)$ 、 $1\ 719 (g = 13) \text{ cm}^{-1}$ 。金属熔池表面温度很高,据 Boltzmann 分布,相当一部分原子处于激发态,其中一些能级寿命很短,能量以电磁辐射方式损失。亚稳态能级寿命较长,处于亚稳态的原子在蒸发膨胀过程中,由于禁忌跃迁,不能以电磁辐射方式退激,但可通过原子间的非弹性碰撞退激,原子的内能转变为动能,

使得蒸气原子的速度、温度等特性发生改变。

原子的热布居(在一定温度下,原子中的电子在各个能级上的分布)服从 Boltzmann 分布:

$$\frac{N_i}{N_0} = \frac{g_i}{g_0} \exp\left[-\frac{E_i}{kT}\right] \quad (1)$$

用 DSMC 法模拟亚稳态原子退激,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。

两个原子的非弹性碰撞满足动量守恒和能量守恒。在质心坐标系中,满足关系:

$$E_k + E_i + E_j = E_k + E_i + E_j \quad (2)$$

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 , E_i 是 i 亚稳态能量; E_j 是 j 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。处于能级亚稳态 i 和 j 的概率由下式计算:

$$P(i, j, E_k) = \frac{g_i g_j E_k}{g_i g_j E_k} \quad (3)$$

可通过式(3)进行抽样来决定碰撞发生后两个原子处于亚稳态 i 和 j ,再根据式(2)求出 E_k ,

$$E_k = \frac{m}{4} |v_r|^2 \quad (4)$$

其中: $v_r = v_1 - v_2$ 是碰撞后两原子的相对速度。

求出 E_k 后,由式(4)即可求出碰撞后两原子相对速度的大小 $|v_r|$ 。从统计观点看,大量原子碰撞后两原子的相对速度 v_r 应服从空间各向同性分布。对空间各向同性分布进行抽样,可完全确定碰撞后原子的相对速度 v_r 。再根据动量守恒方程即可完全确定碰撞后两原子的速度大小和方向。

2 模拟结果及分析

本文模拟钪原子蒸发。蒸发源液面半宽度 0.5 cm ,模拟区域高 40 cm ,宽 30 cm ,壁面温度 350 K ,壁面吸收系数 0.5 。当克努森数 $Kn = 0.02$ 时,蒸气原子的密度分布、横向速度分布(x 方向)、纵向速度分布(z 方向)和温度分布示于图 2。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 $V_s = \sqrt{2RT_s}$, R 是摩尔气体常数; 原子数密度归一化因子是蒸发液面处的饱和数密度 n_0 。

为了显示亚稳态原子退激对蒸气物理特性的影响,下面将未考虑亚稳态原子退激的模拟

结果与考虑了亚稳态原子退激的模拟结果进行比较。当 $Kn = 0.02$ 时, z 轴上原子的纵向速度分布和温度分布示于图 3。

由图 3a 可知:由于亚稳态原子通过非弹性碰撞退激, z 轴上原子的饱和速度比未考虑亚

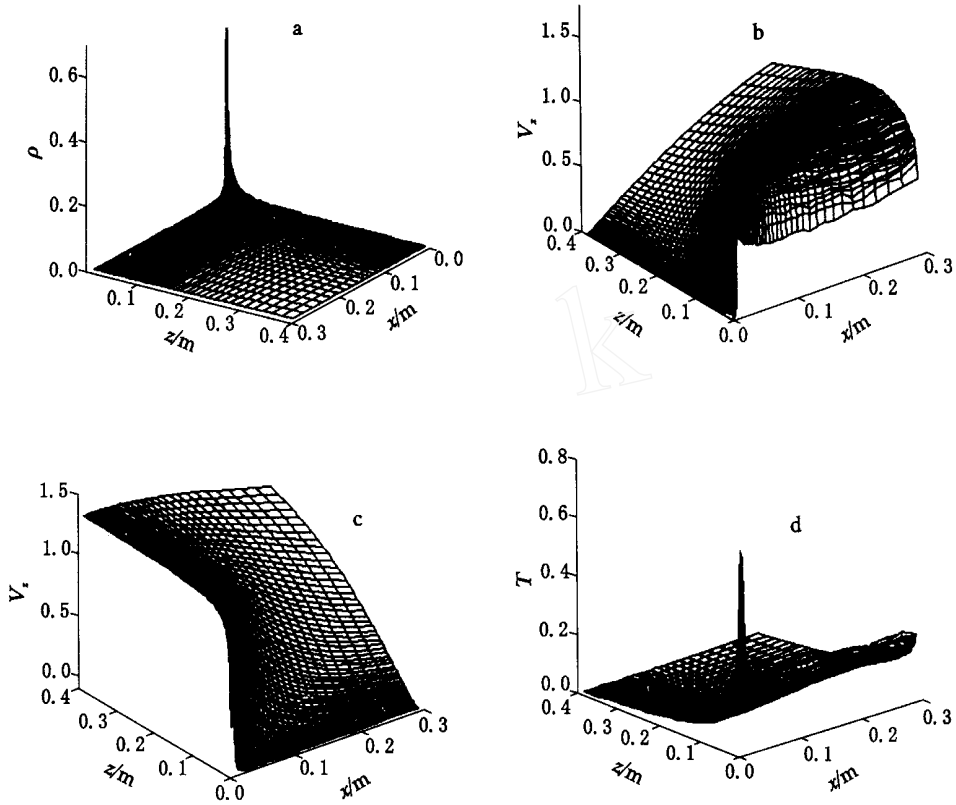


图 2 蒸气原子密度分布(a)、横向速度分布(b)、纵向速度分布(c)和温度分布(d)
 Fig. 2 The distributions of density(a), x velocity(b), z velocity(c) and temperature(d)

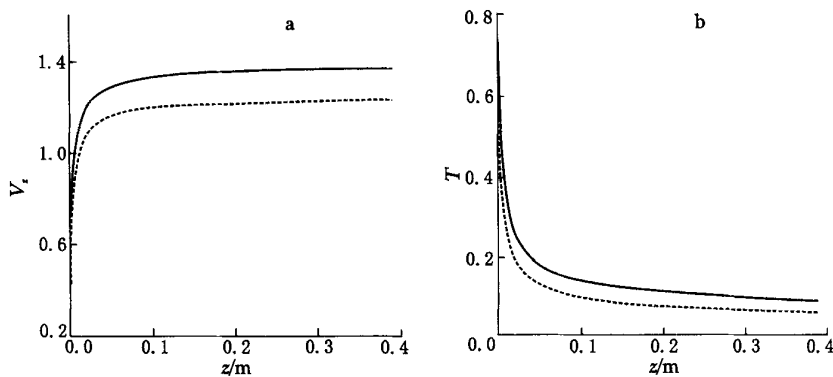


图 3 z 轴上原子的纵向速度分布(a)和温度分布(b)
 Fig. 3 The distributions of z velocity(a) and temperature(b) on the z axis
 实线——考虑退激;虚线——未考虑退激

稳态原子退激时的饱和速度高出 15% 左右,这说明原子亚稳态的能量通过非弹性碰撞转变为原子蒸气的宏观漂移动能。由图 3b 可知: z 轴上原子温度比未考虑亚稳态原子退激时的温度高,这说明原子亚稳态的能量通过非弹性碰撞转变为原子蒸气的热运动能量。

克努森数 Kn 是蒸发动力学中的一个重要参数。 $Kn = \lambda/l$, 是蒸发液面处的分子平均自由程, l 是蒸发液面的半宽度。当蒸发源液面宽度一定时, Kn 越小,表明蒸发液面温度越高,蒸气原子密度越大,原子之间的碰撞越频繁。在不同 Kn 下,亚稳态原子对蒸气物理特性影响的程度是不同的。不同 Kn 下, z 轴原子的纵向速度分布和温度分布示于图 4。

图 4a 中的实线和虚线从高到低分别是 Kn 为 0.02、0.2 和 2.0 时的计算结果。由此可看出: 1) 当 Kn 增大时,原子的饱和速度减小,这是因为 Kn 越大,原子密度越低,原子间的碰撞越少,原子热运动能量通过碰撞转变为宏观漂移动能越少; 2) Kn 增大时,亚稳态原子退激对蒸气原子速度的影响变小,这也是因为 Kn 越大,原子密度越低,原子间的碰撞越少,原子亚稳态能量通过非弹性碰撞转变为宏观漂移动能越少的缘故。而且 Kn 越大,液面温度

越低,根据式(1),处于激发态的原子数目大为减少。

图 4b 中的实线和虚线从低到高分别是 Kn 为 0.02、0.2 和 2.0 时的计算结果。由此也可看出: 1) 当 Kn 增大时,原子的相对温度(归一化温度)升高,这是因为 Kn 越大,原子密度越低,原子间的碰撞越少,原子热运动能量通过碰撞转变为宏观漂移动能的部分越少,相对温度相应越高; 2) Kn 增大时,亚稳态原子退激对蒸气原子温度的影响相对变小,这也是因为 Kn 越大,原子密度越低,原子间的碰撞越少,退激作用的影响越小的缘故。

3 结论

1) 钷蒸气原子中有相当数量的原子处于亚稳态,它们通过非弹性碰撞从高能级退激到低能级,亚稳态的激发能通过退激转变为原子的热运动能量和宏观漂移能量,使得原子蒸气的速度增加、温度升高。

2) 亚稳态原子对蒸气物理特性影响的程度与克努森数 Kn 有关, Kn 越大,原子密度越低,原子间的碰撞越少,亚稳态原子退激作用的影响程度越小。

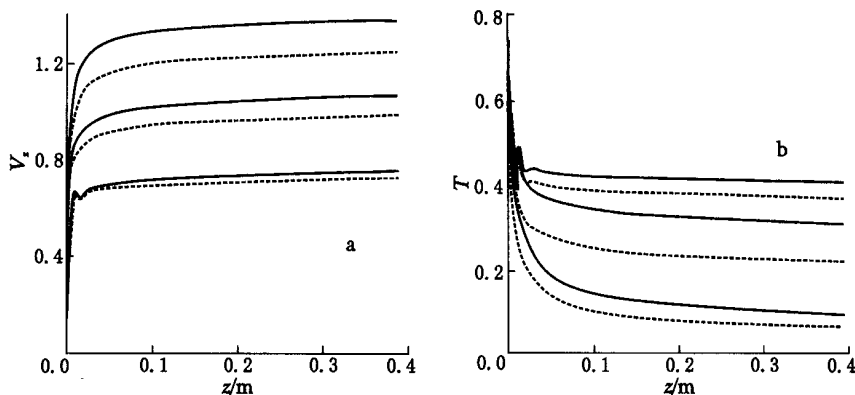


图 4 不同 Kn 下 z 轴上原子的纵向速度分布(a)和温度分布(b)

Fig. 4 The distributions of z velocity(a) and temperature(b) of the vapor with different Kn

实线——考虑退激;虚线——未考虑退激

参考文献:

- [1] 孔羽飞,应纯同,王德武. 直接蒙特卡罗模拟高温金属原子蒸发[J]. 清华大学学报,1996,36(6):50~54.
- [2] Bird GA. Molecular Gas Dynamics and the Direct

Simulation of Gas Flows[M]. New York: Oxford University Press, 1994. 40~41.

- [3] Koura K. Null-collision Technique in the Direct-simulation Monte-Carlo Method[J]. Phys Fluids, 1986,29(11):3 509~3 511.