

Lawrence Berkeley National Laboratory

LBL Publications

Title

Application of the particle-in-cell method to calculate the parameters of molecular beams from gasdynamic sources

Permalink

<https://escholarship.org/uc/item/5496d620>

Journal

Technical Physics Letters, 24(8)

ISSN

0320-0116

Authors

Krygin, GB
Ezhov, VF
Ryabov, VL
et al.

Publication Date

1998-08-01

DOI

10.1134/1.1262233

Peer reviewed

01;03

Приложение метода крупных частиц к расчету параметров молекулярных пучков из газодинамических источников

© Г.Б. Крыгин, В.Ф. Ежов, В.Л. Рябов, В.В. Ящук

Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова, Гатчина

Поступило в Редакцию 9 октября 1997 г.

В окончательной редакции 16 марта 1998 г.

Метод крупных частиц использован для расчета полей течения газов, формируемых сверхзвуковыми соплами различной конфигурации при режимах истечения, характерных для газодинамических источников молекулярных пучков. Тестирование разработанной схемы расчета проводится путем сравнения рассчитанных полей течения из звукового сопла с полуэмпирическими расчетами Ашкенаса и Шермана. Для сопла с конической сверхзвуковой частью расчеты сопоставляются с результатами времяпролетных измерений, выполненных на установке генератора молекулярных пучков ПИЯФ РАН. Обсуждаются перспективы дальнейшего использования описанных расчетных методов для разработки и оптимизации газодинамических источников молекулярных пучков.

Разработка и создание новых типов газодинамических источников требуют соответствующего развития и теоретических методов, нацеленных на оптимизацию условий формирования и параметров пучка. Однако сложность процессов, происходящих при сверхзвуковом расширении газа, последовательно проходящего режимы от сплошного до свободномолекулярного течения, детская зависимость параметров потока от конструкции сопла, геометрии скиммера, вакуумных условий объясняют отсутствие общего теоретического подхода к описанию газодинамических источников.

Практические расчеты источников молекулярных пучков обычно выполняются в два этапа. На первом этапе в рамках газодинамики сплошных сред решается задача о формировании соплом сверхзвукового потока при заданных начальных и граничных условиях. Переход ко второму этапу, на котором рассматривается свободномолекулярное течение, осуществляется с использованием представлений о неизменности ("замораживании") параметров потока, начиная с некоторого момента

сверхзвукового расширения. Оправданием такой упрощенной схемы расчета газодинамических источников, опускающей из внимания переходную область динамики разреженных газов, является ее достаточность для практических целей, так как параметры пучков настолько сильно зависят от неконтролируемых условий формирования, определяемых, например, скиммерными взаимодействиями, что теряется смысл абсолютно точных расчетов.

Характерной особенностью недорасширенной сверхзвуковой струи, формируемой в газодинамическом источнике, является очень большая неравномерность потока. В этом и подобных случаях в качестве первого этапа естественно использовать так называемые однородные методы сквозного счета, одним из которых является известный метод крупных частиц [1], который дает возможность рассматривать широкий класс многомерных стационарных и нестационарных задач газовой динамики при помощи единого численного подхода и позволяет получить пространственные поля течений в широком диапазоне скоростей движения — от дозвуковых до гиперзвуковых.

В настоящей работе мы не стремились дать исчерпывающее описание процессов, происходящих при формировании молекулярных пучков в газодинамических источниках. Основная цель работы состояла в том, чтобы получить достаточно простой и надежный метод численного нахождения параметров течения, оказывающих основное влияние на работу такого рода источников.

Еще в семидесятых годах накопленный к тому времени богатый расчетный и экспериментальный материал стал основой при создании Ашкенасом и Шерманом полуэмпирического описания поля течения из звукового сопла [2]. Предложенные ими аналитические выражения позволяют найти пространственные распределения параметров потока и определить положение его структурных особенностей.

Согласно [2], выражение для распределения числа Маха M вдоль оси потока имеет простой вид, отражающий почти чисто радиальное расширение:

$$M = A \left(\frac{Z - Z_0}{D} \right)^{\gamma-1} - \frac{1}{2} \left(\frac{\gamma + 1}{\gamma - 1} \right) \cdot \left(A \left(\frac{Z - Z_0}{D} \right)^{\gamma-1} \right)^{-1}, \quad (1)$$

где γ — отношение C_p к C_v для расширяющегося газа, а величины A и Z_0 — зависящие от γ константы, определяемые расчетным или экспериментальным путем.

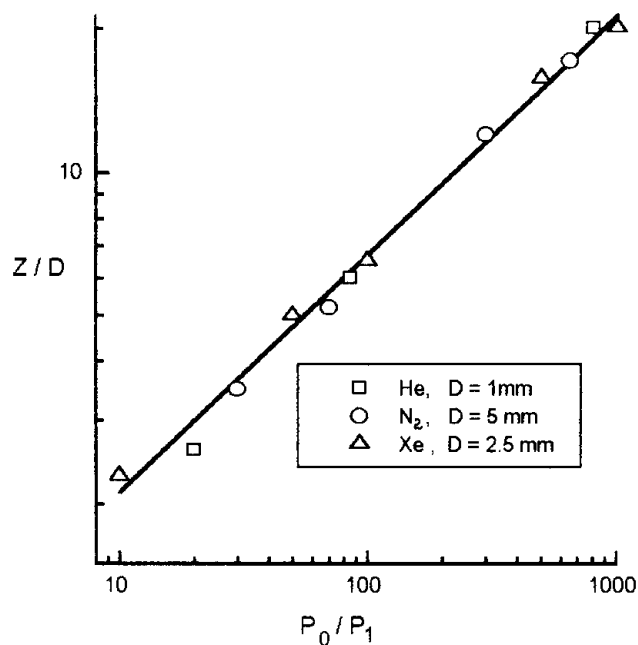


Рис. 1. Положение диска Маха в потоке, формируемом звуковым соплом, в зависимости от отношения давлений P_0/P_1 . Сплошной линией показан результат расчета по формуле (2).

В условиях газодинамики сплошных сред для данной величины γ форма и размер всякого скачка уплотнения и диска Маха определяются исключительно заданным отношением давлений в ресивере сопла P_0 и камере расширения P_1 . Причем аксиальное расстояние от сопла до диска Маха Z_M в диапазоне отношений P_0/P_1 от 15 до 17 000 не зависит даже от γ [2]:

$$\frac{Z_M}{D} = 0.67 \cdot \left(\frac{P_0}{P_1} \right)^{1/2}. \quad (2)$$

Такого сорта аналитические выражения, найденные Ашкенасом и Шерманом, представляются очень удобными для тестирования методов и программ газодинамических расчетов.

Результаты наших расчетов методом крупных частиц практически совпадают с вычисленными по (1) распределениями числа Маха вдоль оси и неплохо передают зависимости (2), как показано на рис. 1. Расчеты проводились в цилиндрической системе координат на фиксированной в пространстве расчетной сетке, состоящей из прямоугольных ячеек (800 по оси r на 400 по оси z). Отметим, что полученные результаты слабо (порядка нескольких процентов) зависят от размеров расчетной сетки.

Соотношения (1), (2) и подобные им хорошо согласуются с экспериментом при условии, что в описываемой области течение остается изэнтропическим сплошным. При переходе к режиму неизэнтропического свободномолекулярного течения уменьшение частоты столкновений молекул газа приводит к "замораживанию" статической поступательной температуры в потоке, а вместе с ней — и величин числа Маха. Независимо от геометрии конкретной задачи переход к свободномолекулярному течению (второй этап расчета) можно описать с позиции конкуренции между скоростью изменения значения статической температуры в потоке и частотой столкновений [3]:

$$\frac{1}{T} \cdot \left| \frac{dT}{dt} \right| = U \cdot \frac{1}{T} \cdot \left| \frac{dT}{dZ} \right| = \left(\frac{8kT}{\pi m} \right)^{1/2} \sqrt{2} \cdot n \cdot \sigma, \quad (3)$$

здесь U — средняя массовая скорость частиц потока; k — постоянная Больцмана; m — молярная масса газа, n — плотность числа частиц, σ — вычисленное по вязкости сечение столкновений. "Замораживание" наступает, когда частота столкновений становится меньше скорости изменения статической температуры. Достижимое при этом число Маха на оси потока будет M_F .

Как показали наши расчеты и эксперименты, такой подход позволяет находить с достаточной для практических целей точностью предельные параметры потоков, формируемых соплами различной конфигурации.

Представленные в данной работе эксперименты проводились на установке генератора молекулярных пучков ПИЯФ [4]. На рис. 2 показаны распределения напорного давления в сверхзвуковом потоке азота, сформированном коническим соплом, геометрия которого задается величинами $D = 1.1 \text{ mm}$ (диаметр критического сечения), $\alpha_1 = 80^\circ$, $\alpha_2 = 41^\circ$ (углы раствора конусов дозвуковой и сверхзвуковой частей). Условия торможения в ресивере сопла ($P_0 = 760 \text{ Torr}$,

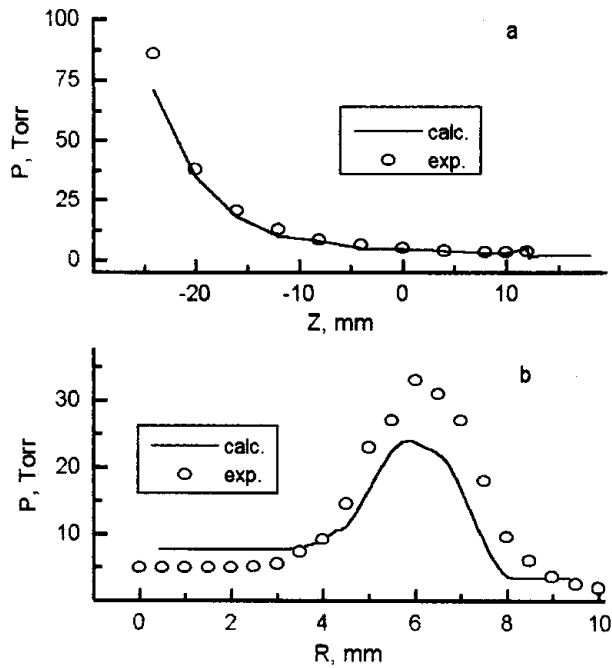


Рис. 2. Распределения напорного давления в сверхзвуковом потоке азота, сформированном коническим соплом ($D = 1.1$ mm, $\alpha_1 = 80^\circ$, $\alpha_2 = 41^\circ$, $P_0 = 760$ Torr, $T_0 = 300$ K, $Q = 100$ l/s): a — осевое распределение, b — поперечное распределение на срезе сопла при $Z = 0$.

$T_0 = 300$ K) вместе с низкой скоростью откачки в камере источника ($Q = 100$ l/s) обеспечивали режим истечения, характерный для плотного газа, практически во всей области измерений. Видно, что выполненные расчеты воспроизводят продольное распределение напорного давления и структуру струи в поперечном сечении.

Расчетные зависимости предельно достижимого числа Маха M_F от P_0 , соответствующие истечению азота и гелия из сопла ($D = 1$ mm, $\alpha_1 = 80^\circ$, $\alpha_2 = 40^\circ$) в вакуумную камеру генератора молекулярных пучков ($Q = 4 \times 10^4$ l/s), приведены на рис. 3. Видно вполне достаточное для наших целей согласие расчета с экспериментом.

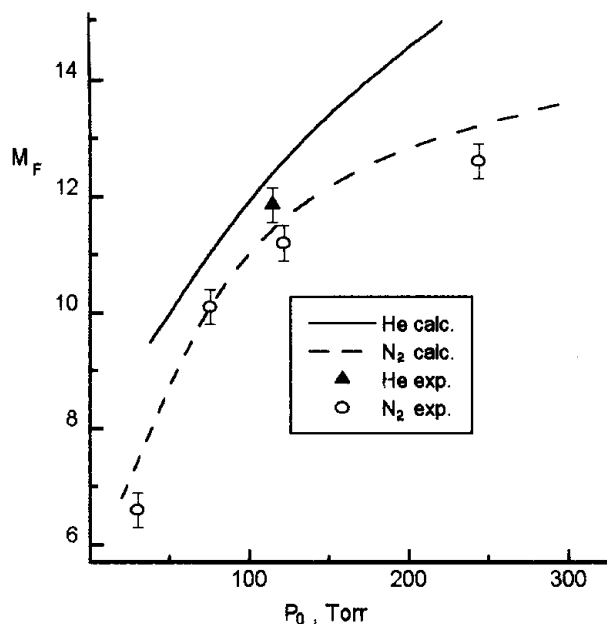


Рис. 3. Зависимости предельно достижимого числа Маха M_F от P_0 ($D = 1$ mm, $\alpha_1 = 80^\circ$, $\alpha_2 = 40^\circ$, $T_0 = 300$ K, $Q = 4 \cdot 10^4$ l/s) для азота и гелия.

Развитый в данной работе подход успешно применен к описанию многосоплового источника молекулярных пучков [5]. Выполненные на его основе расчеты параметров струи газа-носителя (число Маха, скорость, температура) неплохо согласуются с нашими экспериментальными данными. На основе этих расчетов была разработана принципиально новая конфигурация источника, позволившая значительно улучшить параметры пучка.

Основной вывод, который можно сделать на основании проведенных исследований, состоит в том, что есть достаточное для практических целей согласие измеренных экспериментально и рассчитанных параметров течений, формируемых соплами различной конфигурации при режимах, характерных для газодинамических источников молекулярных пучков.

В настоящее время метод активно используется для численного оптимизационного моделирования источника генератора молекулярных пучков ПИЯФ. Оптимизация геометрии формирователя направлена на уменьшение полного расхода газа-носителя, увеличение достижимой на оси величины числа Маха и уменьшение температуры пучка.

Данная работа выполнена в рамках подготовки эксперимента по поиску эффектов нарушения T -инвариантности в молекулах, поддержанного грантом № 97-02-16908 Российского фонда фундаментальных исследований.

Список литературы

- [1] Белоцерковский О.М., Давыдов Ю.М. Метод крупных частиц в газовой динамике. М.: Наука, 1982. 392 с.
- [2] Ashkenas H., Sherman F.S. // Rarefied Gas Dynamics IV / Ed. by J.H. de Leeuw. Academic Press, 1966. P. 84–105.
- [3] Anderson J.B. // Molecular Beams and Low Density Gasdynamics / Ed. by R.P. Wegener. N.Y., 1974. P. 1–91.
- [4] Ежов В.Ф., Грошев М.Н. и др. Препринт ПИЯФ-2179. Гатчина, 1997.
- [5] Яцук В.В., Ежов В.Ф., Крыгин Г.Б., Рябов В.Л. // Письма в ЖТФ. 1997. Т. 24. В. 20. С. 47.