ПМТФ, № 4, 1972

УДК 533.6.011.8:539.198.08

К ОПРЕДЕЛЕНИЮ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ МОЛЕКУЛ ПО СКОРОСТЯМ В МОЛЕКУЛЯРНОМ ПУЧКЕ МЕТОДОМ МЕХАНИЧЕСКОГО СЕЛЕКТИРОВАНИЯ

Э. П. Павлов, В. Д. Перминов

(Москва)

Приводятся результаты решения некорректной по А. Н. Тихонову задачи о восстановлении функции распределения молекул по скоростям в молекулярном пучке по экспериментальным значениям интенсивности. Указывается на немаксвелловский характер полученной функции распределения.

Одним из методов определения функции распределения по скоростям $f(v)$ в свободно-молекулярном потоке является метод механического селектирования [1-3]. Система для определения функции $f(v)$ указанным методом состоит из механического селектора и детектора. Помещенный в молекулярный пучок механический селектор, вращаясь со скоростью ω, пропускает только те молекулы пучка, скорости которых лежат в некотором интервале $[v_0(\omega) - \Delta_1(\omega),\ v_0(\omega) + \Delta_2(\omega)]$, называемом полосой пропускания селектора. Детектор, находящийся за селектором, регистрирует прошедшие через него молекулы.

Простой механический селектор, который обладает рядом преимуществ по сравнению с селекторами, использовавшимися ранее, описан в работе [4]. В настоящей работе представлена методика обработки экспериментальных данных, полученных при помощи такого селектора.

1. Будем считать, что все молекулы, которые подлетают к щели стоящего перед селектором коллиматора, летят параллельно его оси. Тогда функция распределения $f(v)$, определяемая методом механического селектирования, находится из следующего уравнения:

$$\int\limits_{v_0-\Delta_1}^{v_0+\Delta_2} H(v_0, v)\, v f(v)\, dv = J(v_0) \tag{1.1}$$

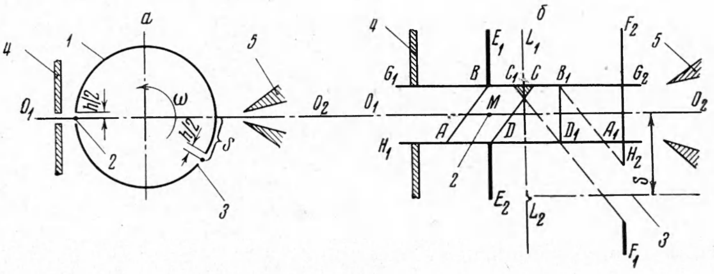
Здесь $f(v)\,dv$ — число молекул в единице объема, имеющих скорости в интервале $[v, v + dv]$; $J(v_0)$ — зарегистрированная интенсивность молекул, имеющих скорости из интервала $[v_0 - \Delta_1,\ v_0 + \Delta_2]$; $H(v_0, v)$ — прозрачность селектора, равная отношению интенсивности молекул пучка со скоростями из интервала $[v, v + dv]$ на выходе из селектора к их интенсивности на входе в него (вне интервала $[v_0 - \Delta_1,\ v_0 + \Delta_2]$ функция $H(v_0, v) \equiv 0$).

Для системы, которая состоит из плоского реверсивного селектора и детекторного устройства, описанных соответственно в работах [4,5], функция $H(v_0, v)$ имеет следующий вид:

$$H(v_0, v) = \eta K(v_0, v)$$

Здесь η — коэффициент захвата, равный отношению интенсивности молекул, которые попали в селектор, к интенсивности свободно-молекулярного порока перед селектором (за интенсивность потока принимается интенсивность, регистрируемая детектором при отсутствии селектора), а $K(v_0, v)$ — функция пропускания селектора, равная отношению интенсивности молекул со скоростями v из $[v, v + dv]$, прошедших через селектор, к интенсивности молекул, попавших в селектор (вне интервала $[v_0 + \Delta_1, \ v_0 + \Delta_2]$ функция $K(v_0, v) \equiv 0$).

Функция пропускания плоского реверсивного селектора практически совпадает с функцией пропускания однокольцевого двухщелевого селектора [4].



Фиг. 1

Такой селектор, схематически изображенный на фиг. 1, *а* представляет собой тонкое кольцо *1* радиуса R с входной *2* и выходной *3* щелями шириной h. Там же изображены щель коллиматора свободно-молекулярного потока *4* и щель заборника детектора *5*, центры которых вместе с центром кольца O лежат на одной оси O_1O_2. Кольцо вращается с угловой скоростью ω. Ось вращения кольца *1* перпендикулярна оси O_1O_2, длина дуги закрутки селектора равна s.

Взаимодействие такого селектора с потоком при $h \ll R$ удобно рассматривать, воспользовавшись схемой, представленной на фиг. 1, *б*. Две тонкие прямые ленты, которые изображены на этой фигуре прямыми E_1E_2 и F_1F_2, перпендикулярными оси O_1O_2, движутся в противоположных направлениях со скоростью ωR. Расстояние между лентами равно $2R$, ширина входной *2* и выходной *3* щелей h на лентах E_1E_2 и F_1F_2 равна ширине щелей коллиматора *4* и заборника *5*. Расстояние от центра выходной щели *3* до оси O_1O_2 в момент, когда центр входной щели *2* лежит на этой оси, равно s. Граница потока между коллиматором и заборником изображена прямыми G_1G_2 и H_1H_2.

Так как согласно предположению все подлетающие к щели коллиматора молекулы летят параллельно оси O_1O_2, то во время прохождения щели *2* мимо щели *4* в селектор попадут только те молекулы со скоростями из интервала $[v, v + dv]$, которые находятся внутри параллелограмма $ABCD$, стороны AD и BC которого лежат на границах потока и равны $vh/\omega R$, а диагональ BD является его высотой. Параллелограмм $ABCD$ движется как целое со скоростью v вдоль оси O_1O_2.

На фиг. 1, *б* нанесен пунктиром след выходной щели *3* на плоскости, неподвижно связанной с параллелограммом $ABCD$. Очевидно, что через селектор пройдут молекулы, которые находятся в заштрихованной части параллелограмма $ABCD$, лежащей на следе выходной щели *3*.

Функция пропускания селектора $K(v_0, v)$ равна отношению заштрихованной площади S' к общей площади S параллелограмма $ABCD$ ($S = h^2v/\omega R$). Для вычисления S' заметим, что она является общей частью параллелограммов $ABCD$ и $A_1B_1C_1D_1$, который получается при пересечении следа щели *3* с границами потока G_1G_2 и H_1H_2 и является зеркальным отображением $ABCD$ относительно оси L_1L_2. Если расстояние между центрами этих параллелограммов MM_1 обозначить через x, то, как нетрудно показать, площадь S' определяется из следующего выражения:

$$S' = \begin{cases} h\,(2a - x)^2/4a, & a \leqslant x \leqslant 2a \\ h\,(2a^2 - x^2)/4a, & -a \leqslant x \leqslant a \\ h\,(2a + x)^2/4a, & -2a \leqslant x \leqslant -a \end{cases} \tag{1.2}$$

$$a = AD = A_1D_1 = hv/\omega R$$

Расстояние x определяется по формуле

$$x = 2R - sv/\omega R \tag{1.3}$$

Скорость v_0, при которой S' максимальна ($x = 0$), называется далее основной скоростью молекул, пропускаемых селектором, вращающимся с угловой скоростью ω

$$v_0 = 2R^2\,\omega/s \tag{1.4}$$

Такое же выражение в работе [4] получено для молекул, пропускаемых селектором, у которого величина $h \to 0$.

Воспользовавшись (1.2) — (1.4), получим выражение для функции пропускания

$$K(y) = \begin{cases} (1 + 2\varepsilon - y)^2 / 4\varepsilon^2, & 1 + \varepsilon \leqslant y \leqslant 1 + 2\varepsilon \\ (2\varepsilon^2 - 1 + 2y - y^2) / 4\varepsilon^2, & 1 - \varepsilon \leqslant y \leqslant 1 + \varepsilon \\ (1 - 2\varepsilon - y)^2 / 4\varepsilon^2, & 1 - 2\varepsilon \leqslant y \leqslant 1 - \varepsilon \end{cases} \tag{1.5}$$

Здесь $y = v_0 / v$, а $\varepsilon = h / s \ll 1$. В случае, когда изменение $f(v)$ в пределах полосы пропускания мало, распределение по скоростям в потоке перед селектором может быть определено непосредственно по результатам измерений. Действительно, из (1.5) и (1.1) получаем

$$J(v_0) = \eta v_0^2 f(v_0) \int\limits_{1-2\varepsilon}^{1+2\varepsilon} \frac{K(y)}{y^3}\,dy = \eta v_0^2 f(v_0)\,\varphi(\varepsilon)$$

Отсюда

$$f(v) = \frac{J(v)}{\eta v^2 \varphi(\varepsilon)}, \quad \varphi(\varepsilon) = \frac{1}{4\varepsilon^2} \ln \frac{(1 + 2\varepsilon)(1 - \varepsilon)^2}{(1 - 2\varepsilon)(1 + \varepsilon)^2} \tag{1.6}$$

В случае, когда изменением $f(v)$ на полосе пропускания пренебречь нельзя (что типично для высокоскоростных молекулярных пучков), необходимо решать интегральное уравнение (1.1) с ядром (1.5). Это исходное уравнение селекции является частным случаем интегрального уравнения первого рода, задача нахождения решения которого в общем случае является некорректно поставленной. Методам решения таких задач, называемых иногда обратными, посвящены многочисленные работы (см., например, [6–10]).

В данной работе для решения интегрального уравнения использовался метод регуляризации, предложенный в работе [6]. Согласно этому методу семейство приближенных решений $f^\alpha(v)$, сходящихся при $\alpha \to 0$ к решению (1.1), если правая часть $J(v_0)$ задана точно, является экстремалями функционала

$$M^\alpha[f, J] = N[f, J] + \alpha\Omega[f]$$

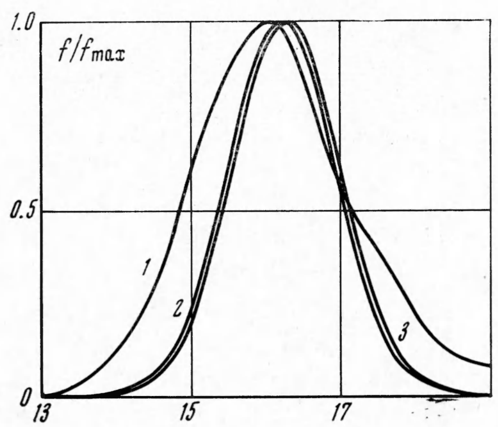
$$N[f, J] = \int\limits_0^\infty \left\{\eta \int\limits_{v_0-\Delta_1}^{v_0+\Delta_2} K(v_0, v)\, v f(v)\, dv - J(v_0)\right\} dv_0$$

$$\Omega[f] = \int\limits_0^\infty \left[\left(\frac{df}{dv}\right)^2 + f^2\right] dv$$

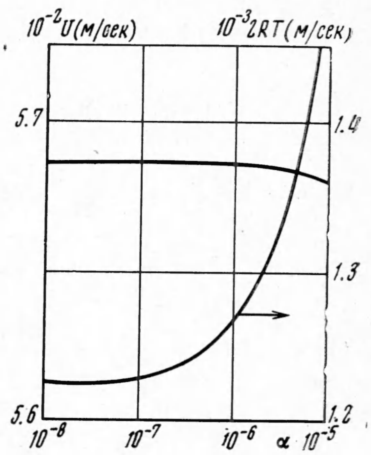
При этом единственность решения (1.1) предполагается.

Для численного решения этой вариационной задачи использовался соответственно модифицированный метод локальных вариаций [11], а для отбора решения по параметру α использовался метод работы [9].

В качестве $J(v_0)$ были использованы данные интенсивности, полученные на установке МП, описанной в работе [5], при давлении в форкамере 155 *тор*. В качестве источника молекулярного пучка использовалась струя аргона, истекающая из звукового сопла радиусом 0.1 *мм*. Газ в форкамере имел комнатную температуру (293° K). Расстояние от скиммера первой диафрагмы до среза сопла, при котором взаимодействие со



Фиг. 2



Фиг. 3

скиммером не возмущало функции распределения по скоростям, выбиралось по методике, предложенной в работе [12]. Параметры селектора были таковы, что $\varepsilon = 0.031$.

Полученная функция распределения, нормированная на максимальное значение, показана на фиг. 2 (кривая *1*); по оси абсцисс отложена величина, равная отношению скорости к $\sqrt{2RT}$. Фиг. 3 иллюстрирует скорость установления по α моментов функции распределения средней скорости u и среднеквадратичного уклонения (дисперсии) $2RT$.

Из доказанных в [6] теорем, в частности, следует, что для получения $f^\alpha(v)$, отличающегося от решения (1.1) не больше чем на ε', функция $J(v_0)$ должна быть задана с соответствующей точностью и, обратно, задание $J(v_0)$ с некоторой точностью не позволяет при уменьшении α получить $f^\alpha(v)$, отличную от решения (1.1) меньше чем на ε_0. При этом естественно ожидать, что точность полученного решения будет хуже точности экспериментальных данных. И хотя точная зависимость между ними не получена, в пробных расчетах [13, 9] точность решения примерно в 1.5—2 раза хуже точности исходных данных.

Широко распространенным методом получения функции распределения является метод поиска решения уравнения (1.1) в определенном классе функций с одним или несколькими неизвестными параметрами [14,15]. Эти параметры выбираются такими, чтобы левая часть (1.1) в некотором смысле мало отличалась от измеренной $J(v_0)$. Как указано в [10], этот метод имеет смысл только тогда, когда решение уравнения действительно принадлежит этому классу.

В работах по определению функции распределения в высокоскоростных молекулярных пучках обычно считается, что

$$f_n(v) \sim v^{2n} \exp[-(v-u)^2/2RT]$$

Здесь n, u и T — параметры.

Так как прямое решение уравнения (1.1) дает возможность найти функцию распределения $f(v)$, а следовательно, и ее моменты u и $2RT$, то можно, воспользовавшись последними посмотреть, насколько близко функции $f_n(v)$ аппроксимируют численное решение уравнения селекции. Функции $f_n(v)$, нормированные на максимальное значение, для $n=0$ и $n=1$ приведены на фиг. 2 (кривые *2* и *3*). Сравнение показывает, что функция распределения молекул по скоростям в молекулярном пучке не является максвелловской.

Поступила 6 VII 1971

ЛИТЕРАТУРА

1. Hostettler H. U., Bernstein R. B. Improved slotted disk type velocity selector for molecular beams. Rev. Sci. Instr., 1960, vol. 31, No. 8, pp. 872—878.
2. Scott J. E., Morton H. S., Phipps J. A., Moonan J. F. Distribution function measurements in rarefied gas flow through an orifice. Rarefied Gas Dynamics, vol. 2, New York — London, Akad. Press., 1966.
3. Truijillo S. M., Rol P. K., Rothe E. W. Slotted-disk velocity selector of extended range. Rev. Sci. Instr., 1962, vol. 33, No. 8.
4. Павлов Э. П. Многокольцевой механический селектор. Уч. зап. ЦАГИ, 1970, т. 1, № 5.
5. Боровков И. С. Вершинин И. Д., Павлов Э. П., Санкович В. М. К определению парциальных интенсивностей компонентов молекулярного потока. ПМТФ, 1968, № 5.
6. Тихонов А. Н. О решении некорректно поставленных задач и методе регуляризации. Докл. АН СССР, 1963, т. 151, № 3.
7. Лаврентьев М. М. О некоторых некорректных задачах математической физики. Новосибирск, Изд-во СО АН СССР, 1962.
8. Иванов В. К. О линейных некорректных задачах Докл. АН СССР, 1962, т. 145, № 2.
9. Тихонов А. Н. О некорректно поставленных задачах. В сб. «Вычислительные методы и программирование», вып. 8, М., Изд-во МГУ, 1967.
10. Тихонов А. Н., Иванов В. К., Лаврентьев М. М. Некорректно поставленные задачи. В сб. «Дифференциальные уравнения с частными производными» «Наука», 1970.
11. Черноусько Ф. Л. Метод локальных вариаций для численного решения вариационных задач. Ж. вычислит. матем и матем. физ., 1965, т. 5, № 4.
12. Anderson J. A., Andres R. P., Fenn I. B., Maise G. Studies of low dencity supersonic jets. Rarefied Gas Dynamics, vol. 2, New York — London, Acad. Press., 1966.
13. Тихонов А. Н., Гласко В. Б. О приближенном решении интегральных уравнений Фредгольма I рода. Ж. вычислит. матем. и матем. физ., 1964, т. 4, № 3.
14. Nöller H. G. Approximate calculation of expansion of gas from nozzle into high vacuum. J. Vacuum Sci. and Technol., 1966, vol. 3, No. 4.
15. Alcalay J. A., Knuth E. L. Molecular — beam time—of—flight spectroscopy. Rev. Sci. Instr., 1969, vol. 40, No. 3.