

УДК 333.6.011

## МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ СВЕРХЗВУКОВОГО МОЛЕКУЛЯРНОГО ПУЧКА ИЗ ВРЕМЯПРОЛЕТНЫХ СПЕКТРОВ

Л.В. Ленин, А.В. Лазарев, Н.Н. Застенкер, Д.Н. Трубников

(кафедра физической химии)

Предложен метод определения параметров сверхзвукового молекулярного пучка из экспериментальных времяпролетных спектров без параметрического представления функции распределения по скоростям. Основные соотношения метода выведены из уравнения свертки, связывающего времяпролетный спектр, аппаратную функцию и функцию распределения, разложением функции распределения по скоростям в ряд по малому параметру. Получаемые ряды, связывающие моменты времяпролетного спектра, аппаратной функции и функции распределения, обрываются при использовании гиперзвукового приближения. С точностью до членов второго порядка получены выражения для средней скорости и температуры. Метод позволяет оценивать погрешность, вносимую аппаратной функцией в определение параметров. Приведены примеры определения параметров молекулярного пучка из экспериментального времяпролетного спектра.

Молекулярный пучок, сформированный из сверхзвуковой струи, представляет собой конечную стадию сложного двумерного потока, в котором реализуются все режимы течения – от непрерывного до почти свободномолекулярного. Основной характеристикой молекулярного пучка является функция распределения частиц по скоростям, а макроскопические параметры пучка определяются ее моментами. Информацию о функции распределения (ФР)  $f(v)$  обычно получают из экспериментальных времяпролетных спектров. Метод измерения времен пролета частицами известного расстояния впервые был реализован в работах [1, 2] и в дальнейшем развит в [3–6]. В общем случае для восстановления ФР из времяпролетного спектра, который по-существу является сверткой ФР с аппаратной функцией, необходимо искать точное решение для свертки, используя, например, метод оптимальной фильтрации или метод регуляризации [7]. Ошибка восстановления ФР и ее моментов в данном случае сильно зависит от величины шума и параметра регуляризации. Причем наименьшую ошибку эти методы дают при очень широкой функции пропускания и это ограничивает применимость регуляризационных методов.

Другим подходом для определения функции распределения из времяпролетных спектров служит модельное приближение к ФР. В ряде случаев максвелловское распределение достаточно хорошо описывает распределение скоростей на оси струи [8]. Однако в дальней области расширения вид функции распределения отклоняется от максвелловского [9, 10] и в этом случае ФР аппроксимируют суммой двух или более максвелловских ФР с различными температурами и средними скоростями. Хотя однозначно вопрос о наилучшем модельном приближении к ФР не решен, модельное представление ФР являет-

ся распространенным методом обработки экспериментальных времяпролетных спектров. В ряде приложений метода молекулярного пучка информация о ФР является излишней и требуется только знание ее моментов, определяющих макропараметры молекулярного пучка: плотности, средней скорости, температуры, теплового потока. Поэтому был предложен метод непосредственного определения моментов из экспериментальных времяпролетных спектров в случае задания максвелловского распределения и типичных аппаратных функций [11]. Однако модельное представление ФР не позволяет оценивать точность определения параметров ФР из экспериментальных данных. Кроме того, имеется ряд случаев, когда ФР трудно описать модельными представлениями.

Целью данной работы является создание метода определения макропараметров молекулярного пучка из времяпролетных (ВП) спектров без аппроксимации функции распределения модельным приближением и без ее определения. Метод позволяет оценивать точность определения макропараметров молекулярного пучка. Метод применим для достаточно малого времени пропускания модулятора

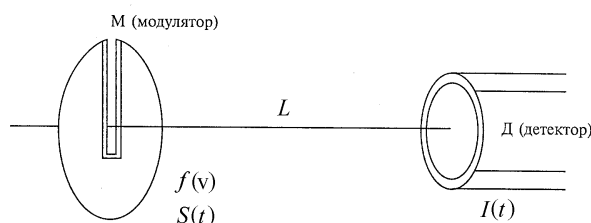


Схема времяпролетного эксперимента

по сравнению со средним временем пролета частиц до детектора и симметричной аппаратной функции. Отношение этих времен является малым параметром задачи.

Число частиц в детекторе (Д) (рисунок) в момент  $t$ , обладающих скоростями от  $v$  до  $v+dv$ , равно с точностью до постоянного множителя

$$dI = S(t - L/v) f(v) dv,$$

где  $L$  – расстояние пролета (база),  $f(v)$  – функция распределения по скоростям,  $S(t)$  – функция пропускания модулятора (аппаратная функция). Полное число частиц в детекторе в момент  $t$  равно

$$I(t) = \int_0^{\infty} S(t - L/v) f(v) dv.$$

После замены переменных  $\tau = L/v$ ,  $R(\tau) = (v^2/L)f(v)$  получим уравнение типа свертки

$$\begin{aligned} I(t) &= \int_0^{\infty} S(t - \tau) R(\tau) d\tau = \\ &= \int_0^{\infty} S(\tau') R(t - \tau') d\tau'. \end{aligned} \quad (1)$$

Величина  $\tau$  имеет смысл времени пролета из модулятора в детектор.  $R(\tau)$  – искомая функция, напрямую связанная с функцией распределения. Будем считать, что аппаратная функция отлична от нуля лишь на малом временном интервале (т.е. достаточно узкая щель в быстро вращающемся диске модулятора) и симметрична относительно своего максимума. Необходимая степень малости рабочего интервала модулятора  $\tau_0$  будет определена в дальнейшем. Разложим  $R(t - \tau')$  в ряд по степеням  $(\tau' - \tau_0/2)$ :

$$\begin{aligned} R(t - \tau') &= R(t - \tau_0) + \\ &+ \sum_n (-1)^n \frac{(\tau' - \tau_0/2)^n}{n!} R^{(n)}(t - \tau_0/2). \end{aligned}$$

Подставляя это разложение в (1) и учитывая симметрию  $S(t)$  относительно  $t = \tau_0/2$ , получим:

$$I(t) = R(t - \tau_0/2) + \sum_{n=2,4,\dots} \frac{\tau^n}{n!} R^{(n)}(t - \tau_0/2),$$

где

$$\frac{\tau^n}{n!} = \frac{\int_0^{\infty} S(\tau')(t' - \tau_0/2)^n d\tau'}{\int_0^{\infty} S(\tau') d\tau'} \quad \text{– моменты аппаратной функции.}$$

Произведя замену  $R_0(t) = I(t + \tau_0/2)$ , окончательно получаем

$$R_0(t) = R(t) + \sum_{n=2,4,\dots} \frac{\tau^n}{n!} R^{(n)}(t). \quad (2)$$

Таким образом, из (2) видно, что ВП-спектр  $R_0$  является искаженной входной функцией  $R$ , причем чем уже аппа-

ратная функция ( $\tau_0 \rightarrow 0$ ), тем меньше искажен входной сигнал. Используя уравнение (2), установим связь между моментами функций  $R_0$ ,  $R$  и  $S$ . Введем следующие обозначения:

$$\begin{aligned} [R]_k &= \int_0^{\infty} R(t) t^{-k} dt = \\ &= \int_0^{\infty} f(v) \frac{v^2}{L} \frac{v^k}{L^k} \frac{L dv}{v^2} = L^{-k} \int_0^{\infty} f(v) v^k dv = \frac{M_k}{L^k}; \end{aligned}$$

$$\frac{1}{t_1} = [R]_1 = L^{-1} \int_0^{\infty} f(v) v dv = \frac{u}{L} \quad (\text{среднее время пролета})$$

$$\frac{1}{(t_k)^k} = \int_0^{\infty} R(t) \left(\frac{1}{t} - \frac{1}{t_1}\right)^k dt =$$

$$= L^{-k} \int_0^{\infty} f(v) (v - u)^k dv = M_k;$$

$$[R_0]_k = \int_0^{\infty} R_0(t) t^{-k} dt;$$

$$\frac{1}{t_1^0} = [R_0]_1 = \frac{u_0}{L}$$

( $u_0$  – средняя скорость, определенная как момент спектра без решения обратной задачи).

$$\frac{1}{(t_k^0)^k} = \int_0^{\infty} R_0(t) \left(\frac{1}{t} - \frac{1}{t_1^0}\right)^k dt,$$

в частности,

$$\frac{1}{(t_2)^2} = \frac{kT/m}{L^2}.$$

Центральные и нецентральные моменты связаны между собой соотношениями

$$\begin{aligned} [R]_1 &= \frac{1}{t_1}; \quad [R]_2 = \frac{1}{(t_1)^2} + \frac{1}{(t_2)^2}; \\ [R]_3 &= \frac{1}{(t_1)^3} + \frac{3}{t_1(t_2)^2} + \frac{1}{(t_3)^3}; \\ [R]_4 &= \frac{1}{(t_1)^4} + \frac{6}{(t_1)^2(t_2)^2} + \frac{4}{t_1(t_3)^3} + \frac{1}{(t_4)^4}; \\ [R]_5 &= \frac{1}{(t_1)^5} + \frac{10}{(t_1)^3(t_2)^2} + \frac{10}{(t_1)^2(t_3)^2} + \frac{5}{t_1(t_4)^4} + \frac{1}{(t_5)^5}; \\ [R]_6 &= \frac{1}{(t_1)^6} + \frac{15}{(t_1)^4(t_2)^2} + \frac{20}{(t_1)^3(t_3)^3} + \dots \end{aligned} \quad (3)$$

Аналогичные соотношения выполняются и для моментов  $R_0$ .

Будем образовывать моменты уравнения (2) путем умножения на  $t^{-k}$  и интегрирования по времени

$$[R_0]_k = [R]_k + \sum_{n=2,4,\dots} \frac{\overline{\tau^n}}{n!} [R^{(n)}]_k.$$

При  $k=0$

$$[R^{(n)}]_0 = \int_0^\infty R^{(n)}(t) dt = R^{(n-1)}(t) \Big|_0^\infty = 0 \quad \text{для } n=1,$$

т.е.

$$[R_0]_0 = [R]_0.$$

При  $k=1$

$$\frac{1}{t_1^0} = \frac{1}{t_1} + \frac{\overline{\tau^2}}{2} [R^{(2)}]_1 + \frac{\overline{\tau^4}}{24} [R^{(4)}]_1 + \dots$$

$$[R^{(2)}]_1 = \int R^{(2)} t^{-1} dt = \int R^{(1)} t^{-2} dt = 2 \int R t^{-3} dt = 2 [R]_3$$

$$[R^{(4)}]_1 = \int R^{(4)} t^{-1} dt = \dots = 24 [R]_5.$$

Используя (3), получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{t_1^0} &= \frac{1}{t_1} + \frac{1}{t_1} \frac{\overline{\tau^2}}{(t_1)^2} \left[ 1 + \frac{3(t_1)^2}{(t_2)^2} + \frac{(t_1)^3}{(t_3)^3} \right] + \\ &+ \frac{1}{t_1} \frac{\overline{\tau^4}}{(t_1)^4} \left[ 1 + 6 \frac{(t_1)^2}{(t_2)^2} + \dots \right], \end{aligned} \quad (4)$$

при  $k=2$

$$\frac{1}{(t_1^0)^2} + \frac{1}{(t_2^0)^2} = \frac{1}{(t_1)^2} + \frac{1}{(t_2)^2} +$$

$$+ \frac{\overline{\tau^2}}{2} [R^{(2)}]_2 + \frac{\overline{\tau^4}}{24} [R^{(4)}]_2 + \dots$$

$$[R^{(2)}]_2 = \int R^{(2)} t^{-2} dt = 2 \int R^{(1)} t^{-3} dt =$$

$$= 6 \int R t^{-4} dt = 6 [R]_4$$

$$[R^{(4)}]_2 = \dots = 120 [R]_6.$$

Учитывая (3), из (4) получаем:

$$\begin{aligned} \frac{1}{(t_2^0)^2} &= \frac{1}{(t_2)^2} - \frac{1}{(t_1)^2} \left[ 2 \frac{\overline{\tau^2}}{(t_1)^2} + \frac{\overline{\tau^2}^2}{(t_1)^4} \right] + \\ &+ 3 \frac{1}{(t_1)^2} \frac{\overline{\tau^2}}{(t_1)^2} \left[ 1 + 6 \frac{(t_1)^2}{(t_2)^2} + \dots \right] + \\ &+ 5 \frac{1}{(t_1)^2} \frac{\overline{\tau^4}}{(t_1)^4} \left[ 1 + 15 \frac{(t_1)^2}{(t_2)^2} + \dots \right] + \dots \end{aligned} \quad (5)$$

Аналогичным образом можно получить любое количество членов в (4) и (5), а также выражения для моментов при  $k \geq 3$ . Для дальнейшего использования надо найти условия обрывания этих рядов с приемлемой точностью. Для этого использовали кинетические свойства свободной струи [12]. Моменты функции распределения образуют следующую иерархию:

$$M_1 \gg \sqrt{M_2} \sim \sqrt[4]{M_4} \sim \dots \gg \sqrt[3]{M_3} \sim \sqrt[5]{M_5} \sim \dots$$

Тогда определенные выше времена образуют иерархию

$$t_1 \ll t_2 \sim t_4 \sim \dots \ll t_3 \sim t_5 \sim \dots \quad (6)$$

Следует учесть, что аппаратная функция узка:

$$\dots < \sqrt[4]{\overline{\tau^4}} < \sqrt{\overline{\tau^2}} < \frac{\tau_0}{2} \ll t_1. \quad (7)$$

Воспользовавшись условиями (6) и (7), получаем с точностью до членов второго порядка малости

$$\begin{aligned} \frac{1}{t_1^0} &= \frac{1}{t_1} \left[ 1 + \frac{\overline{\tau^2}}{(t_1)^2} \right] \\ \frac{1}{(t_2^0)^2} &= \frac{1}{(t_2)^2} + \frac{1}{(t_1)^2} \frac{\overline{\tau^2}}{(t_1)^2}. \end{aligned}$$

Если считать, что отброшенные члены по порядку величины меньше, чем оставленные, то можно оценить точность предлагаемого приближения:

$$\left| \frac{\Delta u}{u} \right| \lesssim \left( \frac{\tau_0}{t_1} \right)^2 \quad \text{и}$$

$$\left| \frac{\Delta T}{T} \right| \lesssim \left( \frac{t_2 \phi_0}{t_1 \phi_1} \right)^2$$

Таким образом, погрешность, вносимая аппаратной функцией в измеряемую среднюю скорость, имеет порядок квадрата отношения ширины аппаратной функции к среднему времени пролету частиц от модулятора до де-

тектора. В то же время погрешность в определении температуры имеет порядок квадрата отношения ширины аппаратной функции к ширине распределения частиц по скоростям. Если первая из этих величин мала во всех времяпролетных экспериментах, то вторая может быть значительной (до десятков процентов). Если  $\tau_0 \sim t_1^2/t_2$ , т.е. ширина аппаратной и искомой функций сравнима, то мы имеем дело с несовершенным ВП экспериментом и данный метод обработки неприменим для получения температур, так как ряд (5) расходится. Для определения скоростей в этом случае можно пользоваться приближением (4). Уменьшить погрешность определения макропараметров пучка можно или уменьшая ширину аппаратной функции (уменьшив ширину щели модулятора или увеличив скорость вращения диска), или увеличивая время пролета за счет увеличения базы  $L$ .

Решить уравнение (4) можно при помощи итерационной процедуры, если переписать его в виде

$$t_1 = t_1^0 \left[ 1 + \frac{\Phi^2}{(t_1)^2} \right].$$

На первом шаге нужно положить в правой части  $t_1 = t_1^0$ . Затем подставить найденное приближенное значение  $t_1$

**Параметры молекулярного пучка смеси гелия и аргона, определенные непосредственно из времяпролетных спектров**

Масса (а.е.м.)	Давление в источнике $p$ (атм)	Средняя скорость $v$ (м/с)	Параллельная температура $T$ (К)	Интенсивность (отн. ед.)
4	1.0	1334(5)	14.0(0.8)	815(7)
4	1.4	1331(5)	11.2(0.6)	1233(11)
4	2.0	1326(2)	8.4(0.3)	2207(11)
4	2.8	1324(2)	7.0(0.2)	4413(29)
4	4.0	1325(2)	5.5(0.1)	6178(22)
4	5.0	1325(2)	4.8(0.1)	7472(60)
40	5.0	1283(1)	18.5(0.1)	22617(24)
40	4.0	1278(2)	18.9(0.3)	17373(42)
40	2.8	1271(1)	19.6(0.4)	12659(51)
40	2.0	1260(2)	22.0(0.2)	9770(15)
40	1.4	1246(2)	25.4(1.2)	6931(85)
40	1.0	1228(1)	28.7(1.0)	4998(9)

опять в правую часть. Обычно для удовлетворительной сходимости требуются одна-две итерации. После этого найти  $t_2$  при помощи уравнения (5) не представляет труда. Тогда выражения для скорости и температуры принимают вид:

$$u = L/t_1, T = \frac{m}{k_B} \frac{L^2}{(t_2)^2},$$

где  $k_B$  – постоянная Больцмана, а  $m$  – масса частицы.

В принципе предложенный метод позволяет определить погрешности, связанные с точной формой аппаратной функции. При этом выкладки аналогичны приведенным.

В качестве иллюстрации в таблице приведены параметры молекулярного пучка для смеси гелий–аргон с соотношением 15:1, полученные непосредственно из ВП-спектров. Давление в источнике струи изменялось в диапазоне 1–5 атм, температура камеры сопла составляла 300 К. ВП-спектры аргона и гелия в этом случае обладают определенной асимметрией и их достаточно трудно обработать с использованием модельной функции распределения, например максвелловским распределением. Наш метод позволяет получить параметры молекулярного пучка, такие как средняя скорость и параллельная температура, без задания модельной функции распределения и с учетом ошибок определения параметров.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (код проекта 96-03-33807).

**СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ**

1. Knauer F. // Z.Physik. 1949. **B126**. P. 319.
2. Becker E.W., Henkes W. // Z. Physik. 1956. **B146**. P. 320.
3. Хагена и Варма // Приборы для научных исследований. 1968. № 1. С. 49.
4. Янг. //Приборы для научных исследований. 1973. № 6. С. 45.
5. Воскобойников Ю.Е., Зарвин А.Е., Полтавец А.А., Томсон Я.Я., Шарафутдинов Р.Г. // ПМТФ. 1976. **99**. С. 32.
6. Hirschly V.H., Aldridge J.P. //Rev. Sci. Instr. 1971. **42**. P. 381.
7. Воскобойников Ю.Е., Преображенский А.И., Седельников Н.Г. Математическая обработка эксперимента в молекулярной газодинамике. М., 1984.
8. Willis D.R., Hamel B.B., Lin J.T. //Phys. Fluids. 1972. **15**. P. 573.
9. Edwards R.H., Cheng M.K. // Proc. 5th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics.N.Y., L., 1967. **1**. P. 819.
10. Brasdeylins G., Herey H., Toennies J.P., Winkelman K. //Proc. 10th Int. Symp. on Rarefied Gas Dynamics. N.Y., 1977. **1**. P. 1047.
11. Элкелей, Нам // Приборы для научных исследований. 1969. № 3. С. 43.
12. Thomas D.R. //Carleton Mathematical Series. 1970. № 21.