

TRAJETÓRIA DE FOTOÍONS SUBMETIDOS A CAMPOS ELETROSTÁTICOS EM EXPERIÊNCIAS DE ENRIQUECIMENTO DE URÂNIO: MODELO NUMÉRICO

N.A.S. Rodrigues^{1*}; F.A. Goia²

¹ Instituto de Estudos Avançados – CTA – São José dos Campos - SP

² Universidade Braz Cubas – Mogi das Cruzes – SP

Recebido: 30 de julho, 2003; Revisado: 13 de julho de 2004

Palavras chave: Separação isotópica via laser e vapor atômico, coleta de íons, enriquecimento de urânio.

RESUMO

É descrita uma análise numérica bi-dimensional da trajetória de fotoíons de U submetidos a campos eletrostáticos, visando-se o projeto de coletores de U enriquecido, no processo de separação isotópica via lasers e vapor atômico. Para uma dada configuração de coletor, é calculado o potencial elétrico resolvendo-se a equação de Laplace. O campo elétrico é obtido calculando-se o gradiente do potencial e a trajetória das partículas é calculada resolvendo-se a equação de movimento de íons na presença do campo elétrico obtido anteriormente. Várias configurações são estudadas concluindo-se que a mais adequada para o nosso arranjo experimental consiste de um par de eletrodos polarizados, próximos da entrada do jato de vapor na câmara de coleta, com o catodo (coletor) inclinado de modo a se evitar a deposição de material não enriquecido devido à expansão do jato de vapor metálico. Todos os cálculos foram realizados utilizando-se do método de diferenças finitas, implementado no aplicativo MathCAD 2001.

ABSTRACT

A 2-D numerical analysis of the photoions trajectory, when they are submitted to an electrostatic field, is presented. The aim of this work is the design of enriched material collectors in AVLIS experiments. For a given collector configuration, the Laplace equation is solved in order to obtain the electric potential spatial distribution; the electric field is then calculated by taking the gradient of the electric potential and finally the movement equation is solved, resulting in the ions pathway. Several electrodes configurations were studied and it was concluded that, for our experimental conditions, the best one is made of a pair of flat electrodes placed close to the grounded base aperture, with the cathode tilted in order to avoid non-enriched material deposition. All calculations were performed by using finite difference method, implemented in the MathCAD 2001 application.

1. INTRODUÇÃO

No processo de separação isotópica via laser e vapor atômico, um jato de vapor de urânio é formado pelo aquecimento

de alvos sólidos por feixes de elétrons. Feixes de lasers convenientemente escolhidos interagem com este vapor, de modo a fotoionizar seletivamente o isótopo ²³⁵U. Estes íons são então coletados pela aplicação de um campo elétrico, que pode ser constante (campo eletrostático), pulsado ou RF [1,2]. No caso do projeto desenvolvido no IEAV, o vapor produzido em uma câmara de vácuo passa por uma fenda retangular em uma base aterrada, interage com 3 feixes de laser colineares em uma segunda câmara de vácuo e os íons produzidos são coletados no catodo de eletrodos polarizados, como diagramado na Fig. 1. O vapor de U metálico é produzido em uma câmara de vácuo à esquerda da base aterrada (não mostrada na figura), passa pela fenda e interage com os feixes de laser. Os íons são coletados no catodo. No dimensionamento dos eletrodos usados para a coleta de urânio enriquecido, basicamente são quatro os aspectos que devem ser levados em consideração:

- 1- o campo elétrico gerado pelo conjunto “eletrodos + base aterrada + câmara de vácuo” deve ser tal que os íons sejam direcionados para o catodo;
- 2- o catodo não pode ser atingido diretamente pelo vapor de U que vem da fenda, pois deseja-se coletar somente material enriquecido;
- 3- é desejável que o potencial aplicado entre eletrodos seja o menor possível, para se evitar a retirada de material do catodo por pulverização catódica (íons com muita energia ao colidirem com o catodo podem arrancar material de sua superfície) e
- 4- é desejável manter os íons o menor tempo possível na região onde há átomos neutros para se minimizar o fenômeno de troca de cargas.

Neste trabalho é apresentado um modelo numérico que descreve a trajetória de íons submetidos a campos eletrostáticos e são apresentados os resultados de cálculos realizados, com o intuito de dimensionar coletores para utilização em experiências de separação isotópica via laser e vapor atômico.

2. O MODELO

Foi considerado um modelo bi-dimensional, com um domínio quadrado de 200 mm de lado, contendo a região onde ocorre a fotoionização e coleta, como ilustrado na Fig. 1.

* nicolau@ieav.cta.br

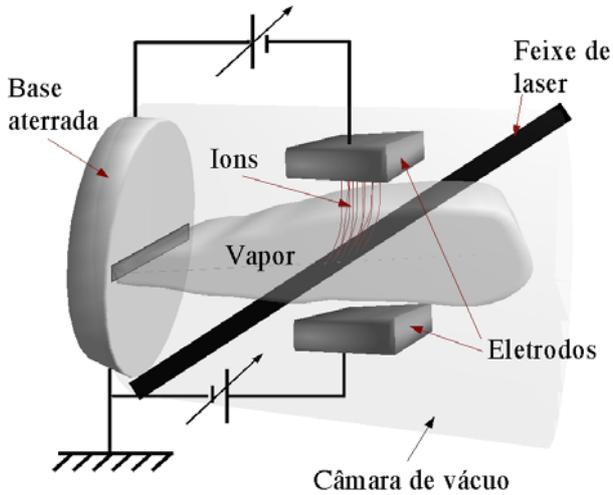


Figura 1 - Diagrama da região de coleta no experimento de separação isotópica via laser e vapor metálico.

Para uma dada configuração de eletrodos (tamanho, posição e potencial aplicado) é inicialmente calculado o potencial elétrico resolvendo-se a equação de Laplace em duas dimensões, em coordenadas cartesianas x e y [3],

$$\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 U}{\partial y^2} = 0. \quad (1)$$

Como primeira aproximação, foi considerado que a densidade de cargas geradas é pequena e não perturba consideravelmente a distribuição de potencial.

O campo elétrico é calculado por

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}U. \quad (2)$$

É suposto que no instante $t = 0$ as partículas são geradas por fotoionização, na posição (x_0, y_0) , com velocidades (v_{x0}, v_{y0}) , imersas no campo elétrico calculado resolvendo-se a Eq. 3, e a trajetória das partículas é então calculada resolvendo a equação de movimento

$$\frac{d\vec{r}}{dt^2} = \frac{q}{m} \vec{E}. \quad (3)$$

O domínio foi discretizado em 200 nós \times 200 nós, igualmente espaçados e a Eq. 1 foi escrita na forma de equações de diferença como

$$\frac{U_{i+1,j} - 2U_{i,j} + U_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \frac{U_{i,j+1} - 2U_{i,j} + U_{i,j-1}}{\Delta y^2} = 0 \quad (4)$$

onde i e j são contadores dos nós nas direções x e y , respectivamente, e, como $\Delta x = \Delta y = h$, pode-se separar o termo $U_{i,j}$ e resolver a Eq. 4 pelo método iterativo de Liebmann [4], ou

$$U_{i,j}^{k+1} = \frac{U_{i+1,j}^k + U_{i-1,j}^k + U_{i,j+1}^k + U_{i,j-1}^k}{4}, \quad (5)$$

tendo como condições de contorno $U = 0$ para os limites do domínio (paredes da câmara de vácuo) e os potenciais dos eletrodos. Neste trabalho, a tolerância para interrupção das iterações foi de 0,1%.

A expressão dada pela Eq. 2 foi também calculada usando-se diferenças finitas, com

$$\begin{aligned} \vec{E} &= Ex\hat{i} + Ey\hat{j} = -\frac{\partial U}{\partial x}\hat{i} - \frac{\partial U}{\partial y}\hat{j} = \\ &= -\frac{U_{i+1,j} - U_{i-1,j}}{2h}\hat{i} - \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j-1}}{2h}\hat{j} \end{aligned} \quad (6)$$

para os nós no interior do domínio. No contorno, as derivadas foram calculadas com menor grau de precisão, ou

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial x} &= \frac{U_{i+1,j} - U_{i,j}}{h} \text{ ou } \frac{U_{i,j} - U_{i-1,j}}{h} \\ \frac{\partial U}{\partial y} &= \frac{U_{i,j+1} - U_{i,j}}{h} \text{ ou } \frac{U_{i,j} - U_{i,j-1}}{h} \end{aligned} \quad (7)$$

Para o cálculo das trajetórias dos íons foi também utilizado o método das diferenças finitas, neste caso, o método de Euler [4], para solução de equações diferenciais ordinárias. Assim,

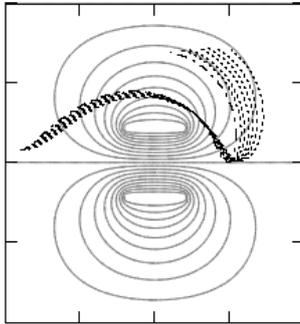
$$\begin{aligned} vx_{k+1} &= vx_k + \frac{q}{m} Ex(x_k, y_k) dt \\ x_{k+1} &= x_k + vx_k dt \\ vy_{k+1} &= vy_k + \frac{q}{m} Ey(x_k, y_k) dt \\ y_{k+1} &= y_k + vy_k dt \end{aligned} \quad (8)$$

onde vx e vy são as velocidades nas direções x e y , respectivamente e dt é o incremento no tempo. Neste trabalho as Eqs. 8 foram resolvidas várias vezes, para valores cada vez menores de dt , até que as diferenças em resultados sucessivos fossem menores que 0,1%.

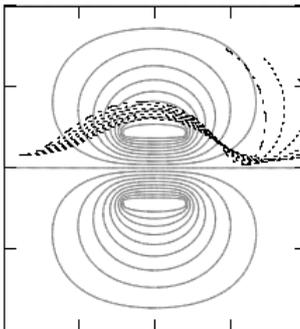
Os átomos neutros de U que formam o feixe de vapor têm uma distribuição de velocidade Maxwelliana com velocidade mais provável da ordem de 500 m/s ($T \sim 2000$ K). Para levar em conta esta distribuição de velocidades foram calculadas as trajetórias para íons com velocidades iniciais, variando de 100 em 100 m/s, de 300 m/s até 1000 m/s. Desta forma, calculando-se a trajetória dos íons com as diferentes velocidades iniciais foi estimado um “envelope de trajetória” que possibilita analisar qualitativamente se uma dada configuração permite a coleta dos fotoíons formados na interação dos feixes de laser com o vapor de U atômico.

O critério para verificar se uma dada configuração é adequada ou não para a coleta dos fotoíons foi simplesmente

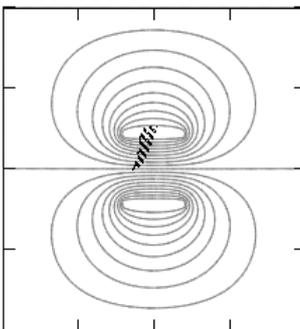
verificar se as trajetórias calculadas para todas as velocidades interceptam a região dentro da câmara que corresponde ao catodo.



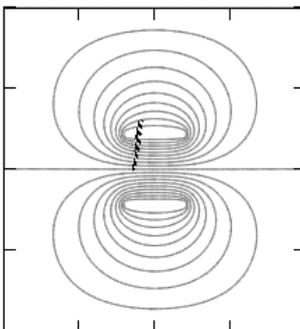
a-) $x_0 = 10 \text{ mm}$, $y_0 = 108 \text{ mm}$, $+100 \text{ V}/-100 \text{ V}$.



b-) $x_0 = 10 \text{ mm}$, $y_0 = 108 \text{ mm}$, $+10 \text{ V}/-10 \text{ V}$.



c-) $x_0 = 85 \text{ mm}$, $y_0 = 100 \text{ mm}$, $+10 \text{ V}/-10 \text{ V}$.

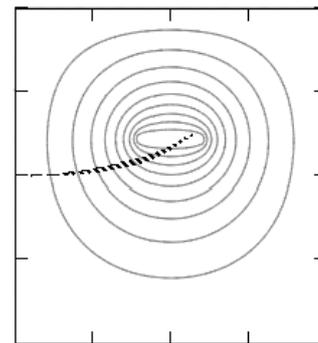


d-) $x_0 = 85 \text{ mm}$, $y_0 = 100 \text{ mm}$, $+100 \text{ V}/-100 \text{ V}$.

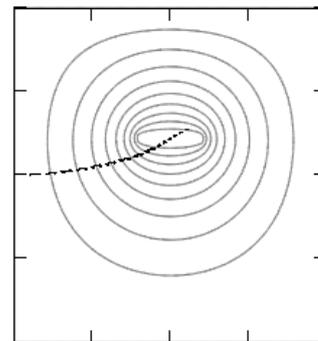
Figura 2 - Trajetória dos íons de U para eletrodos paralelos.

3. RESULTADOS

Basicamente, foram comparadas as seguintes configurações para os eletrodos: a-) eletrodos distantes ou próximos da carcaça aterrada; b-) eletrodos paralelos ou com o catodo inclinado de 45° com relação ao jato de vapor (para diminuir deposição de vapor neutro sobre o coletor) e c-) par de eletrodos (polarizados com $+V$ e $-V$) ou somente o catodo (tomando como a anodo a carcaça da câmara de vácuo). Foram estudadas também a posição do feixe de lasers (posição em que são gerados os íons) em relação aos eletrodos e a variação da tensão de polarização.



3-a-) $X_0 = 10 \text{ mm}$, $Y_0 = 100 \text{ mm}$.
Tensão de polarização: -10 V .



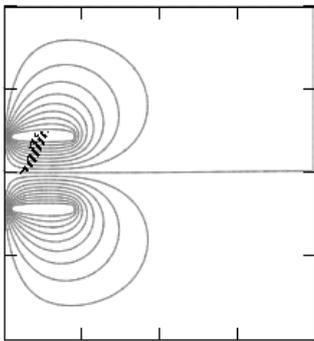
3-b-) $X_0 = 10 \text{ mm}$, $Y_0 = 100 \text{ mm}$.
Tensão de polarização: -100 V .

Figura 3 - Trajetória dos íons de U um único eletrodo polarizado negativamente (remoção do eletrodo positivo da figura 1).

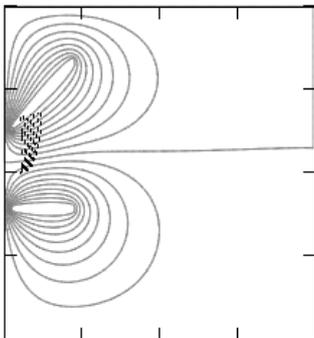
Na Fig. 2, são mostrados os resultados do cálculo para um par de eletrodos (40 mm de largura, separados de 40 mm) colocados no centro da câmara de vácuo, com polarização simétrica. As linhas escuras fechadas, em torno dos eletrodos, indicam as superfícies equipotenciais. Os traços pontilhados correspondem às trajetórias dos vários íons com velocidades iniciais variando de 300 m/s a 1000 m/s e o conjunto de trajetórias indica o envelope dentro do qual se propagam os íons. Como pode ser claramente verificado, na Fig. 2-a, a configuração em que os íons são gerados distantes dos eletrodos não é adequada para a coleta do material ionizado. Nesta configuração, as trajetórias são tais

que os íons circundam o catodo em vez de serem atraídos diretamente para eles. O aumento da tensão de polarização, Fig. 2-b, muda um pouco as trajetórias mas não altera significativamente o resultado final: não há coleta efetiva dos íons. No entanto, quando os íons são gerados na região entre os eletrodos, Fig. 2-c, o envelope de trajetória indica a coleta de todos os íons, mesmo para tensão de polarização baixa. O aumento deste parâmetro, Fig. 2-d, provoca uma “focalização” do envelope de trajetórias, fazendo com que o material seja coletado numa região menor do catodo.

O caso em que somente um eletrodo polarizado negativamente é colocado na região central da câmara de vácuo é mostrado na Fig. 3. Praticamente independentemente da polarização, todos os íons são atraídos para o catodo, sendo esta uma configuração adequada para a coleta dos íons, porém com o inconveniente de expor o coletor ao jato de vapor neutro.



a-) Eletrodos paralelos, tensão de polarização + 10 V / -10V.



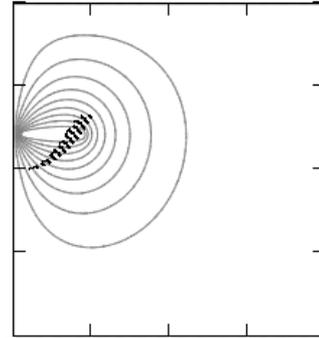
b-) Catodo inclinado a 45°, tensão de polarização +10 V / -10 V.

Figura 4 - Trajetória dos íons de U para eletrodos a 5 mm da base aterrada, $x_0 = 10$ mm, $y_0 = 100$ mm. Tensão de polarização: -10 V.

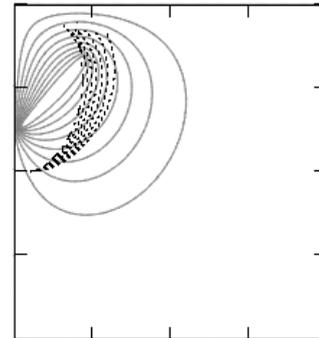
A configuração de um único eletrodo distante da origem dos íons é adequada para, por exemplo, a remoção de íons térmicos [5] do jato de vapor, mas não é adequada para a coleta de material enriquecido, devido à contaminação com vapor neutro não enriquecido.

A Fig. 4 mostra os resultados para o caso de um par de eletrodos próximos da base aterrada, com a fonte de íons entre os eletrodos. À semelhança do caso anterior, os íons são coletados mesmo para baixos valores de polarização. O au-

mento da tensão de polarização provoca uma focalização do feixe de íons atraídos para o catodo. A configuração com o catodo inclinado foi considerada a mais adequada para a coleta de material enriquecido, pois diminui a deposição de vapor neutro sobre a superfície do coletor.



a-) Catodo paralelo ao jato de vapor.



b-) Catodo inclinado a 45° com relação ao jato de vapor

Figura 5 - Trajetória dos íons de U para catodo a 5 mm da base aterrada, $x_0 = 10$ mm, $y_0 = 100$ mm. Tensão de polarização: -10 V.

A Fig. 5 mostra a situação onde somente o catodo é colocado próximo da base aterrada. Ao contrário do caso em que um único eletrodo é colocado distante da base aterrada, a coleta dos íons não ocorre de modo adequado, quer seja para o catodo paralelo ao jato de vapor, quer seja para o catodo inclinado com relação ao jato. Uma parte do material ionizado é coletada e outra parte é perdida. O aumento da tensão de polarização (dentro dos limites estudados), embora provoque a focalização do feixe de íons, não aumenta consideravelmente a quantidade de material que colide com o catodo.

4. CONCLUSÃO

Neste trabalho é apresentado um modelo numérico bidimensional que permite avaliar diferentes geometrias de eletrodos na coleta de material fotoionizado em experiências de separação isotópica via laser. Inicialmente é calculado o potencial elétrico resolvendo-se, pelo método de diferenças finitas, a equação de Laplace. São utilizadas como

condições de contorno a geometria de eletrodos e as paredes aterradas da câmara de vácuo. Do gradiente do potencial é obtido o campo elétrico e este, por último, é utilizado para calcular a trajetória de átomos de urânio que são ionizados em posições preestabelecidas dentro da câmara de vácuo. Várias configurações de eletrodos foram testadas, assim como vários potenciais de polarização e diferentes posições para a interação entre o vapor neutro e os feixes de laser.

Os resultados deste modelo permitem concluir que, das configurações estudadas, a mais adequada para a coleta de fotoíons em experimentos de separação isotópica, em nosso arranjo experimental, é a formada por um par de eletrodos próximos à entrada do jato de vapor neutro (fenda na base aterrada), com o catodo inclinado para reduzir a deposição de vapor neutro, e com a fonte de ionização (feixes de lasers) localizada entre os eletrodos. Nesta configuração todas as trajetórias calculadas interceptam o catodo, mesmo com baixas tensões de polarização (o que reduz a remoção de material do catodo por *sputtering*), e o catodo fica protegido da deposição de material neutro proveniente da fenda na base aterrada.

Cabe ressaltar que foram realizados cálculos para eletrodos

planos e para eletrodos paralelos ou com o catodo a 45°, mas que esta é uma limitação do nosso arranjo experimental. O modelo pode ser aplicado em qualquer geometria e com qualquer distribuição de tensão de polarização.

5. REFERÊNCIAS

1. SCHWAB, C.; DAMIÃO, A.J.; SILVEIRA, C.A.B.; NERI, J.W.; DESTRO, M.G.; RODRIGUES, N.A.S.; RIVA, R. Prog. Nuc. En. 33, 217 (1998)
2. SHIBATA, T.; OGURA, K. *Ion collection from resonance-photoionized plasma by applying radio-frequency voltage*, em Proceedings of the 5th Workshop on Separation Phenomena in Liquids and Gases, ed. N.A.S. Rodrigues, C. Schwab e H.G. Wood, pg. 254-262, Foz do Iguaçu (1996).
3. JACKSON, J.D. *Classical Electrodynamics*, 2a. Ed., John Willey and Sons, Nova Iorque (1975).
4. KOPCHENOVA, N.V.; MARON, I.A. *Computational Mathematics*, MIR Publishers, Moscou (1975).
5. SCHILLER, S.; HEISIG, U.; PANZER, S. *Electron Beam Technology*, John Willey and sons, Nova Iorque (1982).