

УДК 519.6+536.6

НЕСТАЦИОНАРНЫЙ ПЕРЕНОС ЧАСТИЦ В ЦЕЛЕВЫХ СИСТЕМАХ

© Л.В. Плетнев

Ключевые слова: моделирование; нестационарный перенос; Монте-Карло.

Получены временные плотности распределений вылетающих частиц из систем щелевого типа в зависимости от времени адсорбции частиц на стенках систем и интервала вылета между частицами с поверхности конденсированной фазы методом Монте-Карло.

ВВЕДЕНИЕ

В вакуумных технологиях стенки систем оказывают существенное влияние на происходящие в них процессы. Во всех режимах течения описание взаимодействия газ – твердое тело представляет большую проблему, но в свободномолекулярном режиме это становится определяющим, т. к. движение атомов и молекул можно рассматривать как движение точечных частиц. Рассмотрение стационарного переноса не дает полной картины потока частиц в открытых системах [1–3]. Необходимым дополнением является рассмотрение переноса частиц в системах во времени.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В данной работе рассматривается задача нестационарного переноса газа частиц, испарившихся с поверхности конденсированной фазы на дне системы, в щелевых системах в свободномолекулярном режиме течения методом Монте-Карло прямого моделирования. Для получения хороших количественных оценок моделировался исход 10000000 частиц. Рассматривались различные механизмы источников вылета частиц с поверхности конденсированной фазы и взаимодействия частиц со стенками систем: различными интервалами вылетов между частицами с поверхности конденсированной фазы d и различными временами адсорбции частиц на стенках систем τ . Все компьютерные эксперименты проводились для наносистем с высотой и шириной стенок, равными 10^{-8} м, температурой системы $T = 300$ К и массами частиц, равными 40 а.е.м.

Время нахождения частицы в системе определялось по ее вылету из системы – преодолению условной плоскости, не препятствующей вылету частиц из системы, и расположенной на уровне верхнего края системы. Определялись временные плотности распределений потоков частиц, вылетающих из систем p .

Положение частицы на поверхности разыгрывалось с помощью датчика равномерно распределенных случайных величин. Компоненты скорости частиц разыгрывались на основе закона косинуса [4, 5]. При попадании на стенку системы компоненты скорости частицы разыгрывались снова. В результате частица могла, после нескольких столкновений со стенками системы,

вылететь из нее или попасть обратно в конденсированную фазу.

Особенность проведения компьютерных экспериментов по сравнению с реальными экспериментами заключается в том, что можно рассматривать по отдельности и исключать из рассмотрения различные физические явления. Например, можно проводить компьютерные эксперименты со временем адсорбции частиц на стенках равным нулю, что в реальном физическом эксперименте сделать невозможно.

При движении газа частиц в свободномолекулярном режиме основными факторами, влияющими на потоки частиц, будут два. Первый – интенсивность испарения, т. е. интервал времени вылета между двумя частицами с поверхности конденсированной фазы. Поскольку в компьютерных экспериментах разыгрывается большое число частиц, то можно считать интервал времени между вылетом двух частиц d постоянной величиной. В случае воздействия лазерного излучения на поверхность конденсированной фазы частицы можно считать вылетевшими одновременно.

Вторым фактором является взаимодействие частиц со стенками систем. Стенки систем оказывают влияние на формирование потока частиц не только за счет геометрического фактора, как в случае стационарных потоков, но и вследствие того, что частицы взаимодействуют с материалом стенок систем, т. е. адсорбируются на них. На поверхности твердого тела существует потенциальный барьер, обуславливающий среднее время адсорбции частиц на стенках систем τ , которое было постоянной величиной в компьютерном эксперименте.

РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Временные плотности распределений частиц, вылетающих из систем, в зависимости от интервала вылета между частицами d приведены на рис. 1 ($\tau = 0$). Временные плотности распределений для частиц, вылетающих с поверхности конденсированной фазы одновременно и с интервалом времени между вылетом частиц $d = 10^{-18}$ с, практически совпадают, т. к. время вылета последней частицы с поверхности конденсированной фазы равно 10^{-11} с, что совпадает со временем движения частиц в такой системе. С увеличением интервала вылета между частицами с поверхности кон-

денсированной фазы вид кривых распределений меняется, плотности распределений становятся асимметричными. Плотности распределений слева от максимума более пологие, а справа резко обрываются, т. к. вылет частиц из системы определяется интервалом вылета частиц d с поверхности конденсированной фазы, а не временем движения частиц в системе.

На рис. 2 приведены результаты расчетов для мгновенного вылета частиц с поверхности конденсированной фазы и различных времен адсорбции частиц на стенках систем τ . Качественным отличием полученных распределений от распределений, рассмотренных ранее, является то, что приведенные на рис. 2 не являются отдельными пиками.

Для нулевого времени адсорбции частиц на стенках систем справа от максимума можно заметить вклад в распределение от двух, трех и т. д. чисел столкновений частиц со стенками систем. Для времени адсорбции частиц на стенках систем $\tau = 10^{-10}$ с можно наблюдать разделение потока частиц на три потока. Первый связан с вылетом частиц из системы без столкновений со стенками системы. Далее возникает, незначительно перекрываясь с первым потоком, поток частиц, испытавших одно столкновение со стенками системы. Этот поток начинается практически со времени, равного времени адсорбции частиц на стенках систем τ . При этом еще вылетают частицы, не столкнувшиеся со стенками системы. Этот поток имеет острый пик. Это распределение накладывается на распределение частиц, вылетевших из системы после двух столкновений со стенками системы. Последнее распределение начинается примерно на $2 \cdot \tau$ секунд позже начала процесса вылета частиц с поверхности конденсированной фазы.

С увеличением времени адсорбции частиц на стенках системы на два порядка второй и третий потоки разделяются более четко. Распределение частиц, вылетевших с поверхности конденсированной фазы и вылетевших из системы без столкновений со стенками, такое же, как и в предыдущих случаях, но пики распределений становятся уже.

Временные плотности распределений частиц для различных времен адсорбции частиц на стенках и интервала вылета частиц с поверхности конденсированной фазы через $d = 10^{-15}$ с приведены на рис. 3. Слева от максимума распределение определяется интервалом

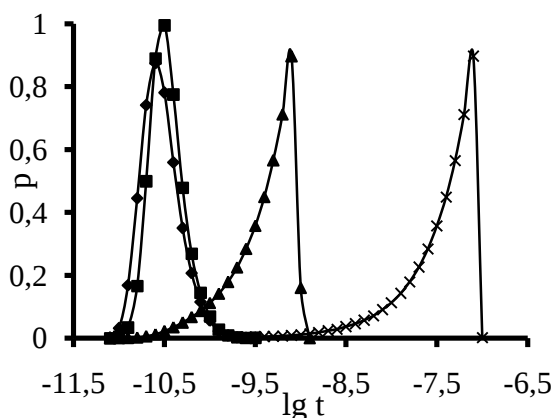


Рис. 1. Временные плотности распределений частиц p в зависимости от интервала времени между вылетами частиц: $\diamond - d = 0$ с, $\blacksquare - d = 10^{-18}$ с, $\blacktriangle - d = 10^{-16}$ с, $\times - d = 10^{-14}$ с

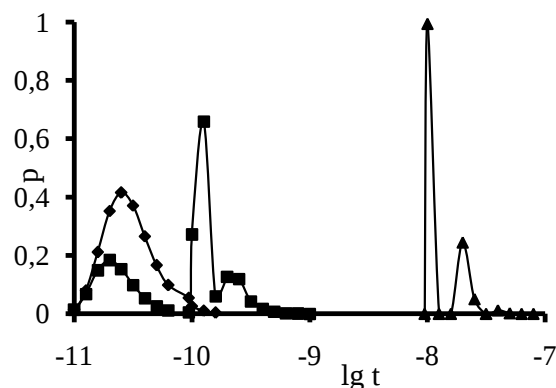


Рис. 2. Временные плотности распределений частиц p в зависимости от времени адсорбции частиц на стенках систем: $d = 0$ с, $\diamond - \tau = 0$ с, $\blacksquare - \tau = 10^{-10}$ с, $\blacktriangle - \tau = 10^{-9}$ с, $\times - \tau = 10^{-8}$ с

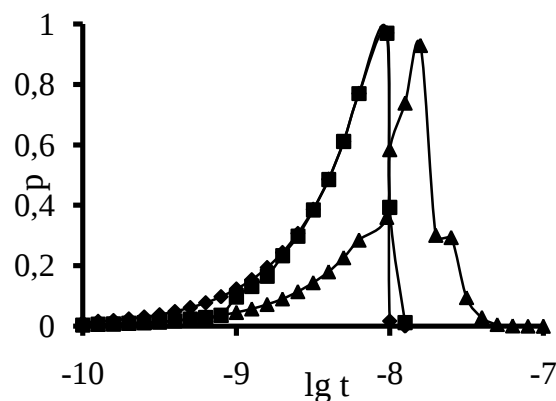


Рис. 3. Временные плотности распределений частиц p в зависимости от времени адсорбции частиц на стенках систем: $d = 10^{-15}$ с, $\diamond - \tau = 0$ с, $\blacksquare - \tau = 10^{-9}$ с, $\blacktriangle - \tau = 10^{-8}$ с, $\times - \tau = 10^{-7}$ с

времени вылета частиц с поверхности конденсированной фазы, а справа – адсорбцией частиц на стенках систем. С увеличением времени адсорбции плотности распределений распадаются на отдельные пики. Первый пик обусловлен влиянием интервала вылета между частицами, остальные обуславливаются влиянием взаимодействия частиц со стенками систем – временем адсорбции частиц на стенках.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведения компьютерных экспериментов для систем больших размеров были получены аналогичные временные плотности распределений потоков частиц, но для больших времен адсорбции и интервалов вылета частиц с поверхности конденсированной фазы. Подобрал соответствующий материал стенок и температуру системы (время адсорбции частиц на стенках системы), можно разделять потоки частиц во времени и анализировать их характеристики. Проведенные компьютерные эксперименты позволяют более корректно ставить реальные физические эксперименты для исследования фундаментальных аспектов взаимодействия газ – твердое тело и управления этими процессами для разделения веществ.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Плетнев Л.В.* Моделирование стационарного процесса переноса частиц в наносистемах методом Монте-Карло // Вестник Нижегородского университета. Серия Математическое моделирование и оптимальное управление. Н. Новгород, 2005. Вып. 1 (28). С. 194-199.
2. *Pletnev L.V., Gvozdev M.A., Samartsau K.S.* Computer Modeling of Particles Transport Stationary Process in Open Cylindrical Nanosystems by Monte Carlo method // Monte Carlo Methods and Applications. 2009. V. 6. № 2. P. 191-203.
3. *Плетнев Л.В.* Компьютерное моделирование стационарного процесса переноса в открытых щелевых системах // Труды института Системного анализа РАН. Динамика неоднородных систем. М., 2010. Т. 50 (1). С. 91-96.
4. *Берд Г.* Молекулярная газовая динамика. М., 1981. С. 320.
5. *Pletnev L.V.* Monte Carlo Simulation of Evaporation Process into the Vacuum // Monte Carlo Methods and Applications. 2000. V. 6. № 3. P. 191-203.

Поступила в редакцию 30 мая 2011 г.

Pletnev L.V. NON STATIONARY PARTICLES TRANSFER IN SPLIT SYSTEMS

Temporary density distributions of particles that escaped from systems of split type, depending on the time of particles adsorption on the walls of the systems and the interval between the escaping of particles from the surface of the condensed phase by Monte Carlo method have been obtained.

Key words: modeling; non stationary transfer; Monte Carlo.