

6. Singh, K.A. Year Report of the Institute of Nanotechnology, UK, NANOFORUM.org (2007).

7. Наноиндустрия. – 2009. – № 4. – С. 76.

8. Zenkevich, E., C. von Borczyskowski. Photoinduced relaxation processes in self-assembled nanostructures. Book “Multiporphyrin Arrays: Fundamentals and Applications”, Pan Stanford Publishing: Singapore, 2011, chapter 5. – P. 181-252.

УДК 621.52 + 167/168

Иванов И.А.

ПРОБЛЕМЫ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДВИЖУЩИХСЯ ГАЗОВЫХ СРЕД

БНТУ, г. Минск

In given article it was put aim to analyse changes of approaches to construction of mathematical models of the description of movement of gas environments at transition from model of movement of the incompressible continuous environment to a current of strongly discharged gases.

Математическое моделирование технических объектов является способом исследования их физического содержания, описываемого в терминах математики. Данный способ моделирования получил в настоящее время сильный импульс развития благодаря совершенствованию вычислительной техники и программного обеспечения. Важным этапом моделирования является разработка математической модели процесса (объекта), что требует абстрагирования от конкретной природы изучаемого явления. Абстрактность математической модели порождает определенные трудности ее применения к описанию конкретного объекта или процесса. На этом этапе моделирования важным является ясное представление о физической сути моделируемых процессов (объектов) и правильный выбор адекватного математического аппарата, позволяющего

описать количественно и качественно связи исследуемых явлений.

Учет вида конкретной природы взаимодействий в системе позволяет любой реальной объект представить в виде системы функционалов: $F_i(X, Y, Z, t) = 0$, где $X = [x_1, x_2, x_3, \dots, x_N]^t$ – вектор входных контролируемых переменных, $Y = [y_1, y_2, y_3, \dots, y_R]^t$ – вектор выходных параметров, $Z = [z_1, z_2, z_3, \dots, z_K]^t$ – вектор внешних случайных воздействий, t – время, N – число контролируемых переменных, R – число измеряемых выходных параметров, K – число учитываемых случайных воздействий. Однако форма записи математической модели в идее системы функционалов в значительной степени определяется природой исследуемых явлений.

В данной статье ставилась цель проанализировать изменения подходов к построению математических моделей описания движения газовых сред при переходе от модели движения несжимаемой сплошной среды до течения сильно разряженных газов.

Рассматривая движение жидкостей или неразряженных газов первое, что бросается в глаза – это отсутствие жестких связей между частицами. Каждая частичка газа или жидкости находится в свободном движении (имеет шесть степеней свободы). Описание такой системы как целого на основе дискретной модели твердого тела невозможна, так как требует учета движения каждой из частичек.

Попытка решить систему уравнений с большим числом неизвестных наталкивается на две проблемы. Первая связана с обеспечением устойчивости процесса вычислений. Вторая, обусловлена тем, что мы никогда не сможем иметь информацию о точных положениях и скоростях движения частиц потока в некоторый фиксированный момент времени, следовательно, не можем прогнозировать движение и столкновение конкретной выбранной частицы. В этом случае единственно приемлемым физическим подходом к описанию движения

газовых сред является модель сплошной среды. В этом случае, свойства среды (или её элементарного объёма) рассматривают как усредненные по пространству.

Сравнивая между собой любые два объема движущейся сплошной среды можно сделать следующие выводы: свойства объемов различны. Одинаковость их свойств – это частный случай, который на практике встречается редко; свойства самих объемов есть функция времени t и их положения в пространстве (функция координат x, y, z); в процессе движения существует обмен массой и энергией между соседними объемами.

Для достаточно плотных сред среднее расстояние между соседними частицами невелико, а число столкновений в единицу времени при реальной температуре весьма большое. Следовательно характерные масштабы осреднения по пространству (λ) и по времени (τ) могут быть выбраны чрезвычайно малыми в сравнении с пространственно-временными масштабами процесса в целом. В этом случае производные по времени и по координатам в достаточной степени адекватно отражают свойства реальной движущейся среды.

Основными уравнениями, описывающими такое движение, являются: *дифференциальное уравнение неразрывности* – уравнение баланса массы в элементарном объеме сплошной среды. Левая часть уравнения неразрывности показывает изменение плотности элементарного объема среды в момент времени t . Правая часть описывает изменение плотности этого объема при движении его в пространстве.

К уравнению неразрывности необходимо дополнительно записать *дифференциальное уравнение сохранения импульса*, которое позволяет связать изменение поля скоростей с плотностью потока, изменением давления в потоке и плотностью распределения сил, действующих на элементарный объем $f = f(r, t)$.

Режимы течения газов в вакуумном трубопроводе определяются числом Кнудсена (Kn), которое задаётся как отношение длины свободного пробега частиц газа к характерным размерам сосуда, в котором совершается это движение. При $Kn < 0,01$ – вязкостной режим течения газа, при $Kn > 0,33$ – молекулярный режим течения, при $0,01 < Kn < 0,33$ – переходный.

Молекулярный режим течения газов характеризуется тем, что частицы газа двигаются без столкновения в технологическом объёме. Изменение их скорости и направления движения происходит только при их столкновении со стенками вакуумной камеры. Все траектории молекул являются прямыми линиями, без взаимодействия молекул друг с другом внутри вакуумной камеры. Какие ограничения это накладывает на процесс описания движения газов в молекулярном режиме?

1. Нельзя ввести строго понятие градиента физических величин. При столкновении молекулы со стенкой параметры её движения меняются скачком.

2. Нет средних параметров потока, определяемых в единице объёма вакуумной камеры.

Для описания таких газовых потоков возможны различные подходы. Рассмотрим наиболее широко используемые в настоящее время – решение уравнения Больцмана и Метод Монте-Карло пробной частицы.

Кинетическое уравнение Больцмана (1872 год) описывает распределение молекул газа по скоростям v и координатам r , в зависимости от времени t – функция распределения $f(v, r, t)$. Задача, которую решают с помощью данного уравнения – это определение среднего числа частиц со скоростями в интервале от v до $v+\Delta v$ и координатами в интервале от r до $r+\Delta r$. Данное уравнение связывает скорость изменения функции распределения f от времени, в результате перемещения частиц в пространстве и в результате действия на частицы газа внешних сил F со скоростью изменения функции распределения за счет столкновений частиц.

Данный метод является одним из наиболее строгих и общих подходов к анализу течений сильно разряженных газов в вакуумных системах. Методы решения данного уравнения опираются на численные методы анализа.

Метод Монте-Карло (ММК) пробной частицы или метод статистических испытаний (1949 год) является методом численного решения задачи движения частиц путем моделирования некоторой характерной случайной функции.

При расчете вакуумных систем ММК реализуют путем моделирования движения отдельных молекул в свободно молекулярных условиях течения газа с последующей статистической оценкой результатов этого моделирования. Так как молекулы не сталкиваются друг с другом, то они запускаются в систему по очереди. Начальное распределение частиц задается случайным образом. Учет и накопление параметров полета ведется по каждой частице, и после окончания запуска всех частиц проводится анализ и статистическая оценка накопленных данных. Метод применим только для анализа молекулярного течения газов ($Kn > 3..5$) так как полностью адекватен физической природе молекулярного переноса.

Таким образом, различия в свойствах исследуемых объектов требует использования различного математического аппарата для моделирования движения этих объектов. Например, динамическое поведение сплошной среды описывается системой дифференциальных уравнений в частных производных, то время как в молекулярном режиме течения более адекватным является использование статистических подходов к описанию движения газовых сред.

ЛИТЕРАТУРА

1. Иванов, И.А. Анализ математических подходов к описанию движения сильно разряженных газов / И.А. Иванов // *Машиностроение и техносфера XXI века.* – Донецк: ДонНТУ, 2009. – Т. 1. – С. 276-279.

2. Иванов, И.А. Моделирование газовых потоков / И.А. Иванов // Мат. 7-ой Междунар. н.-т.конф. «Наука – образованию, производству, экономике». – Минск: БНТУ, 2009. – Г. 3. – С. 297.

УДК 621.793

Иващенко С.А., Койда С.Г.

ИССЛЕДОВАНИЕ НАПРЯЖЕНИЙ В ВАКУУМНО-ПЛАЗМЕННЫХ ПОКРЫТИЯХ

БНТУ, г. Минск

Напряжения, возникающие при осаждении тонкопленочных покрытий, оказывают существенное влияние на эксплуатационные свойства системы подложка-покрытие. В ряде случаев внутренние напряжения могут привести к растрескиванию и отслаиванию покрытий, ухудшению их антифрикционных, коррозионных, декоративных и некоторых других свойств.

Вакуумно-плазменные покрытия, получаемые методом КИБ, в силу ряда факторов (значительные микроискажения кристаллической решетки, морфологическая неоднородность покрытия, значительный приток тепла на подложку в процессе осаждения покрытий и т.д.) характеризуются высокими внутренними напряжениями. Отсюда вытекает необходимость изучения процесса формирования напряжений в системе подложка-покрытие, что, в конечном счете, даст возможность регулировать величину и знак внутренних напряжений.

Были проведены исследования процесса формирования внутренних напряжений в вакуумно-плазменных покрытиях из нитрида титана и углеродной алмазоподобной пленки (УАП), полученных методом КИБ. Исследования проводились как на стадии подготовки подложки (ионная бомбардировка), так и на стадии конденсации покрытия. Толщина наносимых покрытий составляла 1..5 мкм.