

РАСПРЕДЕЛЕНИЯ БИНАРНЫХ СТОЛКНОВЕНИЙ АТОМОВ ПРИ ВЫЛЕТЕ С ПОВЕРХНОСТИ КОНДЕНСИРОВАННОЙ ФАЗЫ

Л.В. Плетнев

*Кафедра «Высшая математика»,
ГУ ВПО «Белорусско-Российский университет», г. Могилев, Республика Беларусь;
pletnev@tut.by*

Представлена членом редколлегии профессором В.И. Коноваловым

Ключевые слова и фразы: вылет частиц; моделирование; распределения столкновений.

Аннотация: Получены распределения и плотности распределений бинарных столкновений атомов во времени и пространстве после вылета с ограниченного участка поверхности конденсированной фазы в вакуум. Распределения получены для сферических атомов, одновременно вылетающих с поверхности конденсированной фазы. Использовался метод прямого моделирования Монте-Карло.

Образование слоя Кнудсена при испарении конденсированной фазы в вакуум представляет интерес как с теоретической, так и с практической точек зрения. Исследование структуры слоя Кнудсена представляет важную задачу для понимания механизма взаимодействия газ – твердое тело и его влияния на перенос газа в объеме. На границе слоя Кнудсена существуют скачки величин: температуры, концентрации и т.д.

Применение уравнения Больцмана для изучения данного явления не представляется возможным, так как оно получено для равновесных явлений в газовой фазе, а в слое Кнудсена велики флуктуации плотности частиц. Кроме того, плотности распределений скоростей частиц, преодолевших потенциальный барьер на поверхности конденсированной фазы, отличаются от равновесного распределения [1–3]. В связи с этим возникает вопрос о том, как вылетевшие с поверхности конденсированной фазы атомы сталкиваются в вакууме, представляет интерес о распределении этих столкновений в пространстве и времени, что связано с вопросом об образовании слоя Кнудсена при испарении и управлении процессами переноса.

Решение данной проблемы может быть получено с помощью метода Монте-Карло или молекулярной динамики. Для решения данной задачи предложена модель первых бинарных столкновений атомов, представляющих собой жесткие сферы диаметром $3 \cdot 10^{-10}$ м и вылетающих с поверхности моноатомной конденсированной фазы, имеющей размер квадрата со стороной $3 \cdot 10^{-9}$ м. В основу модели положена система дифференциальных уравнений движения частиц и условие столкновения жестких сфер.

Алгоритм розыгрыша столкновений атомов был следующий. Положения двух частиц на поверхности области испарения конденсированной фазы разыгрывались с помощью датчика равномерно распределенных случайных величин. Первоначальные положения центров частиц совпадали с плоскостью $z = 0$. Расстояние между центрами частиц на поверхности конденсированной фазы определялось как величина a_{12} . Компоненты скоростей частиц на поверхности конденсирован-

ной фазы разыгрывались с помощью датчика нормально распределенных случайных величин, то есть предполагалось бoльцмановское распределение скоростей атомов на поверхности конденсированной фазы. После розыгрыша одной пары атомов разыгрывалась следующая пара. В каждом компьютерном эксперименте разыгрывалось 10 000 000 событий, в которых происходили столкновения атомов, что обеспечивало точность полученных результатов до нескольких процентов.

В статье представлены результаты компьютерного моделирования по определению распределений и плотностей распределений столкновений двух атомов, одновременно вылетающих с поверхности в пространстве и во времени в зависимости от температуры поверхности конденсированной фазы. На рисунке 1 представлены зависимости плотностей распределений времен столкновений атомов. Нормировка проводилась делением всех плотностей распределений на максимальное значение. Зависимости плотностей распределений имеют один пик, максимум каждого из которых совпадает со средним значением среднего времени столкновения. Положения максимумов плотностей распределений времен столкновений обратно пропорциональны корню квадратному из отношения температур поверхностей. Такое положение кривых распределений обусловлено тем, что атомы, вылетающие с поверхности, имеющей меньшую температуру, имеют меньшие скорости по сравнению с атомами, вылетающими с поверхности, имеющей большую температуру. Распределения плотностей столкновений атомов имеют достаточно большой разброс относительно максимума распределения.

Наибольший интерес представляют данные о распределении столкновений атомов в вакууме над поверхностью конденсированной фазы, то есть образования слоя Кнудсена при испарении. Компьютерные эксперименты позволили получить плотности распределения пробегов атомов до столкновения по нормали к поверхности конденсированной фазы (рис. 2). Зависимости распределений пробегов атомов перпендикулярно к поверхности имеют одинаковый вид и не зависят от температуры поверхности конденсированной фазы. Если рассмотреть две пары сталкивающихся атомов, имеющих одинаковые условия вылета, но скорости, например, в два раза меньшие, то и двигаться эти атомы будут в два раза дольше, но точка столкновения будет той же самой.

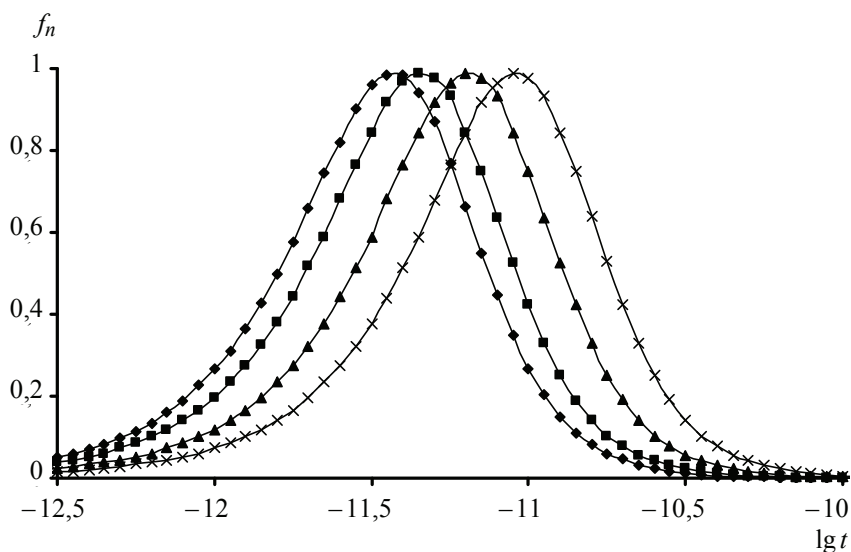


Рис. 1. Плотности распределений времен столкновений первых атомов при различной температуре, K:

◆ – 300; ■ – 200; ▲ – 100; × – 50

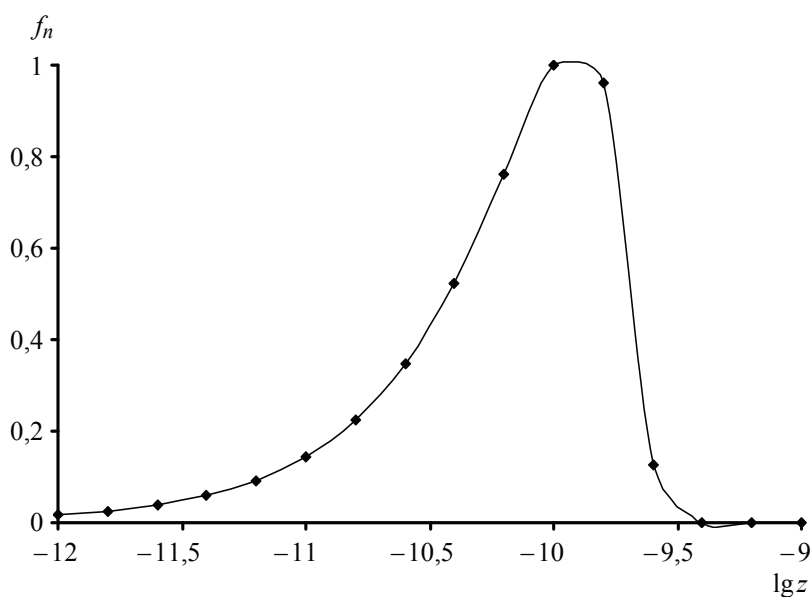


Рис. 2. Плотности распределений пробегов атомов перпендикулярно к конденсированной фазе

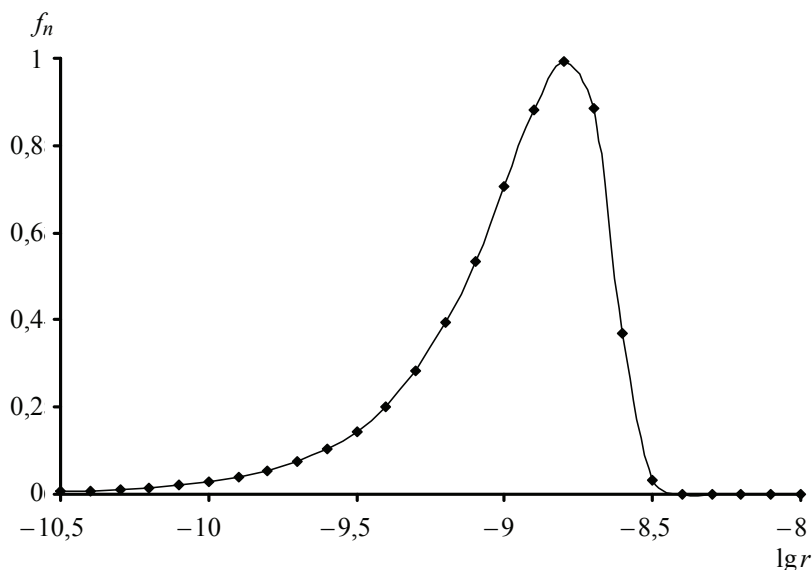


Рис. 3. Плотности распределений пробегов атомов в газовой фазе

Другой важной величиной, определявшейся в компьютерных экспериментах, было полное расстояние, которое атомы пролетают от точки вылета с поверхности до точки столкновения (рис. 3). Асимметрия в распределениях становится более существенной, что привело к тому, что максимумы распределений не совпадают со средними значениями. Так, средние значения \bar{z} и \bar{r} равны 1,06 и 13,9 Å соответственно.

Необходимо отметить, что среднее значение величины \bar{r} в несколько раз больше среднего значения величины \bar{z} . Это можно объяснить тем, что атомы сталкиваются над поверхностью конденсированной фазы, вылетая с нее под

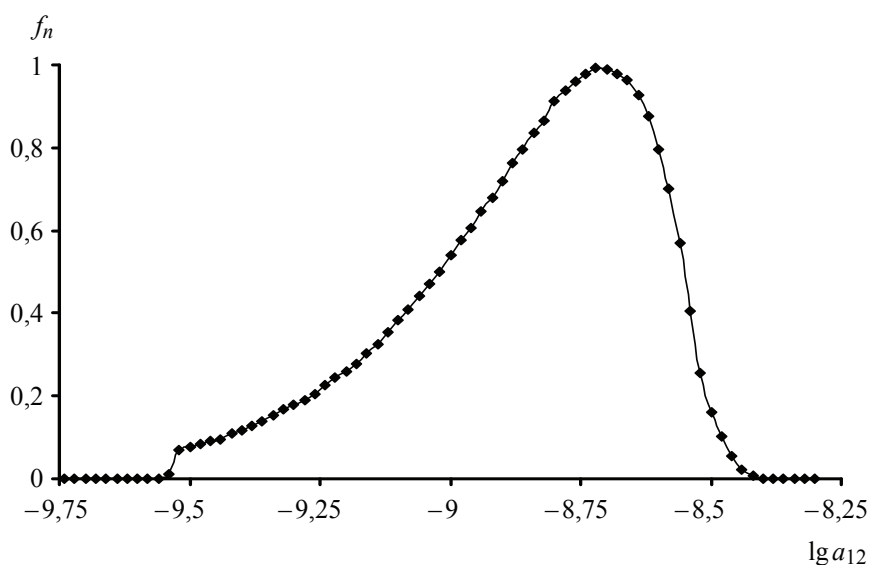


Рис. 4. Плотности распределения расстояний между атомами на поверхности конденсированной фазы

малыми углами, то есть их компоненты v_x и v_y много больше компоненты v_z . Атомы пролетают во много раз большее расстояние вдоль плоскости поверхности, чем перпендикулярно к ней. Основные столкновения атомов происходят над областью квадрата испарения конденсированной фазы.

Особенность предложенной модели компьютерного моделирования процесса столкновения атомов заключается в том, что можно определять такие величины, которые в реальных экспериментах измерить нельзя. На рисунке 4 представлены результаты по определению плотности распределения расстояний между атомами, которые вылетели с поверхности конденсированной фазы и столкнулись в газовой фазе. Данное распределение не зависит от температуры конденсированной фазы. Среднее значение расстояния между центрами атомов на поверхности конденсированной фазы равнялось 16 \AA .

Анализ результатов проведенных компьютерных экспериментов показал, что даже для модели бинарных столкновений сферических атомов нельзя говорить о простой структуре слоя Кнудсена при испарении монокристаллической конденсированной фазы. Плотности распределений атомов имеют сложный вид, отличный от равномерного или экспоненциального распределений.

Список литературы

1. Берд, Г. Молекулярная газовая динамика : пер. с англ. / Г. Берд. – М. : Мир, 1981. – 319 с.
2. Pletnev, L.V. Monte Carlo Simulation of Evaporation Process into the Vacuum / L.V. Pletnev // Int. J. Monte Carlo Methods and Applications. – 2000. – Vol. 6, No. 3. – P. 191–203.
3. Pletnev, L.V. The Knudsen Layer by the Evaporation of the Monatomic Condensed Phase / L.V. Pletnev, N.I. Gamayunov, V.M. Zamyatin // Int. Conf. on Theoretical Physics, Paris, France, July 22–27 2002 / Book of Abs. – Paris, 2002. – P. 235.
4. Pletnev, L.V. Simulation of Evaporation of a Monatomic Condensed Phase into a Knudsen Layer by Monte Carlo and Molecular Dynamics Methods. // Int. Symp. On Rarefied Gas Dynamics – 24, Bari, Italy, July 10–16 2004 / Book of Abs. – Bari, 2004. – P. 63.

Distributions of Binary Atom Collisions During Escaping from Condensed Phase Surface

L.V. Pletnev

*Department «Higher Mathematics»,
Belarusian-Russian University, Mogilev, Republic of Belarus;
pletnev@tut.by*

Key words and phrases: distributions of collisions; modeling; particles escaping.

Abstract: The distributions and density distributions of binary collisions between atoms in space and time after escaping from a limited area on the surface of the condensed phase into vacuum are obtained. Distributions for spherical atoms simultaneously escaping from the surface of the condensed phase are produced. The direct simulation Monte Carlo method of is applied.

Verteilungen der Binarkollisionen der Atomen bei dem Ausflug von der Oberfläche der kondensierten Phase

Zusammenfassung: Es sind die Verteilungen und die Dichte der Verteilungen der Binarkollisionen der Atome in der Zeit und im Raum nach dem Ausflug von der begrenzten Fläche der Oberfläche der kondensierten Phase ins Vakuum erhalten. Die Verteilungen sind für die sphärischen Atome, die gleichzeitig von der Oberfläche der sphärischen Phase ausfliegen, erhalten. Es wurde die Monte Carlo-Methode der direkten Modellierung benutzt.

Répartitions des collisions binaires des atomes durant la sortie de la surface de la phase de condensation

Résumé: Sont reçues les répartitions et les densités des répartitions des collisions binaires des atomes dans le temps et dans l'espace après la sortie d'une partie limitée de la surface de la phase de condensation dans le vide. Les répartitions sont reçues pour les atomes spécifiques sortant simultanément de la surface de la phase de condensation. A été utilisée la méthode du modélage de Monte Carlo.

Автор: *Плетнев Леонид Владимирович* – кандидат физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой «Высшая математика», ГУ ВПО «Белорусско-Российский университет», г. Могилев, Республика Беларусь.

Рецензент: *Хомченко Александр Васильевич* – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой «Физика», ГУ ВПО «Белорусско-Российский университет», г. Могилев, Республика Беларусь.
