

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОСАЖДЕНИЯ ЧАСТИЦ НА ПОВЕРХНОСТИ ПОДЛОЖКИ МЕТОДОМ РЕШЕТОЧНЫХ УРАВНЕНИЙ БОЛЬЦМАНА

Э.Р. Сайфуллин¹, А.Г. Князева^{2,3}

Научный руководитель: профессор, д. ф.-м. н. А.Г. Князева

¹Национальный исследовательский Томский государственный университет

²Национальный исследовательский Томский политехнический университет

³Институт физики прочности и материаловедения СО РАН

E-mail: ser_web@mail.ru

В настоящее время одним из наиболее эффективных путей повышения характеристик изделий является нанесение покрытий, значительно увеличивающие такие показатели как прочность, жаростойкость, устойчивость к коррозии, химически агрессивным средам и многие другие. Однако при нанесении покрытий не удаётся точно предсказать распределение плотности наносимого вещества на поверхности подложки, что в свою очередь приводит к несоответствию ожидаемых и получаемых свойств покрытия. Вследствие чего возникает потребность в определении факторов, влияющих на неоднородное распределение частиц мишени на подложке. Цель настоящей работы состоит в численном моделировании процесса осаждения частиц на поверхности изделия и анализе полученных результатов.

Суть метода заключается в представлении непрерывной сплошной среды в виде эквивалентной дискретной модели. В рассматриваемой области задаётся пространственная решетка в узлах которой содержится вещество, описываемое одночастичной функцией распределения f_k . Решетка должна обладать свойством симметричности. В данной работе используются решётка D2Q9, где первое число указывает на размерность пространства, а второе на количество возможных векторов скоростей псевдочастиц $\mathbf{c}_k$.

Эволюция системы под действием объёмных сил описывается решеточным уравнением Больцмана:

$$f_k(\mathbf{x} + \mathbf{e}_k, t + \Delta t) = f_k(\mathbf{x}, t) + \Omega_k(f_k(\mathbf{x}, t)) + \Delta f_k, \quad (1)$$

где f_k – функция распределения, характеризующая плотность вещества в узле решетки, Ω_k – оператор столкновений, обозначающий степень заселенности в столкновениях, Δf_k – изменение функции распределения, происходящее под действием объёмных сил.

Как уже было отмечено в работе [1] оператор столкновений определяется в виде $\Omega_k = (N_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}) - N_k) / \tau$, где $\tau = t / \Delta t$ – безразмерное время релаксации. Для определения равновесных функций распределения используют распределения Максвелла – Больцмана в ряд по скорости $\mathbf{u}$:

$$f_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}) = \rho w_k \left(1 + \frac{\mathbf{c}_k \mathbf{u}}{\theta} + \frac{(\mathbf{c}_k \mathbf{u})^2}{2\theta^2} - \frac{\mathbf{u}^2}{2\theta} \right) \quad (2)$$

Значения коэффициентов w_k и кинетической температуры псевдочастиц θ приведены в [2]. Последнее слагаемое правой части уравнения (1) определяется методом точной разности (Exact Difference Method, EDM) [3]

$$\Delta f_k(\mathbf{x}_k, t) = f_k^{eq}(\rho, \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}) - f_k^{eq}(\rho, \mathbf{u}) \quad (3)$$

Плотность вещества и скорость в узле вычисляются по формулам: $\rho = \sum_k f_k$, $\rho \mathbf{u} = \sum_k \mathbf{c}_k f_k$.

На рисунках 1 и 2 представлены результаты численного моделирования процесса осаждения распылённого вещества на поверхности изделия. В левой части области камеры задан поток напыляемого вещества, на правой части расположена подложка. По краям области камеры заданы твёрдые стенки. С течением времени происходит осаждение частиц под действием сил межмолекулярного взаимодействия. Рисунок 1 характеризует распределение плотности, а на рисунке 2 изображено распределение средней скорости частиц в заданные промежутки времени. Область на подложке, окрашенная в белый цвет (рис. 2), соответствует нулю средней скорости распределения. Равенство областей красного (рис. 1) и белого (рис. 2) цветов при $t=10000$ подтверждает справедливость распределения плотности.

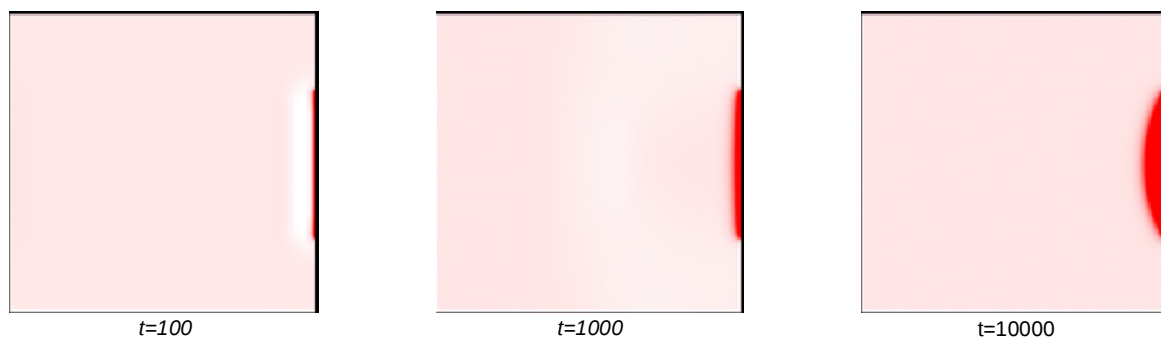


Рис. 1. Эволюция осаждения покрытия. Сетка: 200x200. Шкала плотности: белый цвет ($\rho = 0$) и красный цвет ($\rho = \rho_{\max}$). $\tilde{\rho} = 1,5$; $\tilde{T} = 0,8$; $\tau = 0,9$

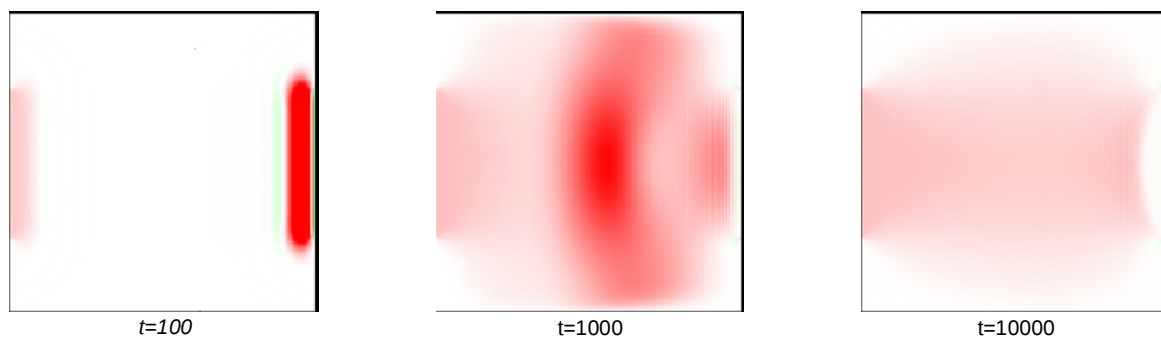


Рис. 2. Распределение скорости движения частиц. Сетка: 200x200. Шкала распределения средней скорости: зелёный цвет ($v = -v_{\max}$), белый цвет ($v = 0$) и красный цвет ($v = v_{\max}$)

Список литературы

1. Bhatnagar P.L., Gross. E.P., Krook M.K. A model for collision process in gases. I. Small amplitude process in charged and neutral one-component system // Phys. Rev. – 1954, – Vol. 94, No. 3. – P. 511–525.
2. Сайфуллин Э.Р., Князева А.Г., Куперштох А.Л. Применение метода решеточных уравнений Больцмана для моделирования процесса осаждения частиц // Материалы XXIV Всероссийской школы-конференции молодых учёных и студентов «Математическое моделирование в естественных науках». – Пермь : Изд-во Пермского национального исследовательского политехнического университета. – 2015. – С. 389–393
3. Li Q., He Y.L., Wang Y., Tao W.Q. Coupled double-distribution-function lattice Boltzmann method for the compressible Navier–Stokes equations // Phys. Rev. E. – 2007. – Vol. 76, No. 5(056705). – P. 1–19.