

УДК 532:593, 534.222.24

## **Исследование газодинамических потоков гелия в наноканалах и влияния учета столкновений атомов\***

**Д.С. ОЖГИБЕСОВ, И.Ф. ГОЛОВНЕВ, В.М. ФОМИН**

В представленной работе проведены исследования газодинамических потоков гелия в наноканалах цилиндрической формы. Рассмотрен случай истечения газа из резервуара в вакуум. Для моделирования резервуара использовалась стохастическая пучковая модель. Взаимодействие атомов гелия между собой описывалось потенциалом Леннарда-Джонса, а для описания взаимодействия атомов со стенками канала использовалась модель зеркального отражения. Проведено сравнение с результатами молекулярно-кинетической теории.

**Ключевые слова:** гелий; поток; наноканал; ценосфера; метод молекулярной динамики.

### **ВВЕДЕНИЕ**

В настоящее время гелий является стратегическим сырьем, на основе которого будет создаваться будущая энергетика. Однако его добыча является сложным и трудоемким процессом. Это связано с тем, что в процентном соотношении гелия в атмосфере и природном газе очень мало. Основным способом его добычи на сегодняшний день является криогенный способ, основанный еще в 20-х годах прошлого столетия. Основа этого метода заключается в охлаждении большого количества природного газа. Но недавно предложен другой способ добычи гелия – с помощью ценосфер. Ценосферы являются полыми сферами с наноканалами и обладают селективным свойством. В связи с этим возникла необходимость провести исследование газодинамического течения гелия в наноканалах.

В представленной работе исследовались газодинамические потоки гелия с помощью так называемой «базовой модели». Под этим понятием подразумеваются следующие положения: а) моделировалось истечение гелия из резервуара в вакуум, причем для резервуара использовалась стохастическая пучковая модель; б) взаимодействие атомов гелия между собой описывалось потенциалом Леннарда-Джонса; в) взаимодействие атомов гелия со стенкой канала описывалось отталкивательной ветвью потенциала Леннарда-Джонса т. е. рассматривалось зеркальное отражение атомов от стенок наноканала.

В предыдущих работах [1, 2] на основе прямого сравнения результатов, полученных в рамках метода молекулярной динамики и уравнения Больцмана, было показано, что в интервале размеров каналов, представляющих интерес для поставленной проблемы, необходимо применять метод молекулярной динамики.

### **1. ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ**

Для решения этой задачи рассматривалась следующая физическая система. В наноканал цилиндрической формы (рис. 1) с заданными радиусом и длиной сверху вбрасывались атомы гелия из емкости с заданными параметрами газа. При этом предполагалось, что газ в емкости находится в термодинамическом равновесном состоянии.

---

\* Статья получена 5 февраля 2013 г.

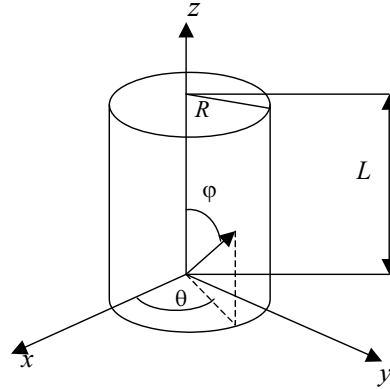


Рис. 1. Изображение модели наноканала

В работе исследовалось истечение газа в вакуум. Температура газа во всех расчетах предполагалась равной 300 К. Исследования проводились в интервалах параметров: давление – от 0.1 до 5 атмосфер, длина каналов – от 100 Å до 10 м, радиусы канала – от 20 до 500 Å. (Особое внимание уделено каналам с радиусом 110 Å, так как это размеры каналов в мембранах, выпускаемых промышленностью в настоящее время). При моделировании взаимодействия атомов гелия между собой использовался потенциал Леннарда-Джонса. Расчеты проведены для модели абсолютно упругих стенок канала, т. е. энергообмен между газом и стенками канала отсутствовал. При этом взаимодействие атомов гелия со стенкой описывалось отталкивательной ветвью потенциала Леннарда-Джонса.

Процесс затекания молекул в канал через входное сечение моделировался с помощью метода Монте-Карло с использованием известного распределения молекул по скоростям в пучке:

$$dW_j = dW(V) \cdot dW(\theta) \cdot dW(\varphi),$$

$$W(V) = \frac{1}{2} \left( \frac{m}{kT} \right)^{2V} \int_0^V e^{-\frac{m\xi^2}{2kT}} \xi^3 d\xi = \frac{1}{4} \left( \frac{m}{kT} \right)^{2V} \int_0^V e^{-\frac{m\xi^2}{2kT}} \xi^2 d\xi^2 = 1 - e^{-\frac{mV^2}{2kT}} \left( \frac{mV^2}{kT} \right) + 1,$$

$$W(\theta) = 2 \int_0^\theta \sin(\xi) \cos(\xi) d\xi = \frac{1 - \cos(2\theta)}{2},$$

$$W(\varphi) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\varphi d\xi = \frac{\varphi}{2\pi}.$$

Для каждой молекулы разыгрывались отдельно модуль вектора скорости, и углы  $\theta, \varphi$ , определяющие направление вектора скорости в пространстве. Начальное положение молекул на входе в канал также находилось с помощью метода Монте-Карло. При этом предполагалось, что координаты молекулы описываются равномерным распределением. После нахождения начальных координат и скоростей молекулы на первом же расчетном шаге по времени учитывалось ее взаимодействие с другими молекулами, уже находящимися в канале, и со стенкой канала и далее использовался метод молекулярной динамики.

Время, через которое атомы гелия вбрасываются через входное сечение канала, вычисляется по формуле:

$$\tau_{in} = 1/J_{th}.$$

Здесь  $J_{th}$  – полный поток атомов, пересекающий входное сечение, который находится с помощью известного выражения, полученного в рамках молекулярно-кинетической теории:

$$J_{th} = \frac{n \langle v \rangle S}{4}, \quad (1)$$

где  $n$  – концентрация атомов в газовой фазе;  $\langle V \rangle$  – средняя Максвелловская скорость атомов в газовой фазе;  $S$  – площадь поверхности сечения.

Благодаря такому моделированию начальных данных температура и давление газа в емкости полностью определяют втекающий газодинамический поток  $J_{th}$  во входное сечение канала. После такого задания начальных данных решается система дифференциальных уравнений движения для всех атомов гелия, взаимодействующих между собой и со стенками канала, т. е. рассчитываются траектории атомов. После вылета атома за пределы некоторого фиксированного объема за сечениями канала, считается, что атом покинул канал.

Везде ниже сечение в резервуаре с более высоким давлением обозначено через «первое сечение», а в резервуаре с более низким давлением – «второе сечение». Соответственно, поток вытекающий через второе сечение с низким давлением называется прямым ( $J_+$ ), а из первого сечения (в область более высокого давления) – обратным ( $J_-$ ).

Для численного решения дифференциальных уравнений движения использовалась скоростная модификация алгоритма Верле. Шаг по времени составлял  $10^{-16}$  с.

## 2. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА

Для иллюстрации технологии проведения численных расчетов на рис. 1 представлена зависимость потоков от времени через первое и второе сечения для случая затекания гелия через одно сечение. Отчетливо видна область релаксации и выход потоков на постоянные асимптотические значения. Они определяются очевидным соотношением равенства входящего и суммы выходящих потоков  $J_- + J_+ = J_{th}$ . После этого численный расчет процесса затекания атомов гелия в канал прерывался.

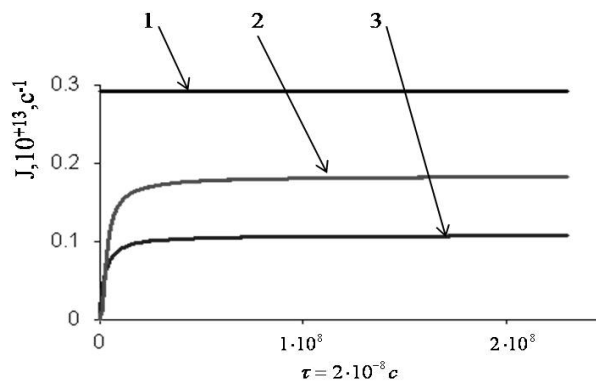


Рис. 2. Зависимость прямого и обратного потока от числа шагов по времени. 1 –  $J_{th}$ , 2 –  $J_+$ , 3 –  $J_-$ . Радиус канала  $R = 110 \text{ \AA}$ , а длина  $L = 2 \text{ \mu}$ . Параметры газа в резервуаре  $T_g = 300 \text{ K}$ ,  $P_g = 1 \text{ atm}$

На первом этапе было проведено исследование влияния геометрических размеров канала на величину вытекающего потока для случая затекания через одно сечение.

На рис. 3 показаны зависимости прямого и обратного потоков от радиуса канала. Видно, что при увеличении радиуса прямой поток ( $J_+$ ) возрастает быстрее обратного ( $J_-$ ).

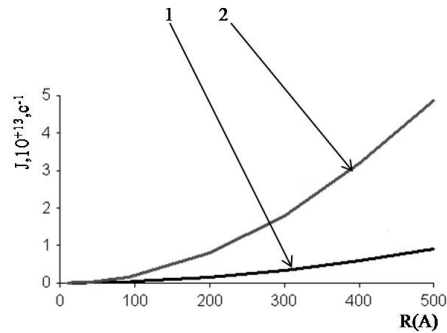


Рис. 3. Зависимость втекающего и вытекающего потоков от радиуса канала. 1 – обратный поток  $J_-$ , 2 – прямой поток  $J_+$ . Параметры газа в резервуаре  $T_g = 300$  К,  $P_g = 1$  атм. Размеры канала:  $R = 110$  Å,  $L = 2$  мкм

В качестве примера, на рис. 4 представлена зависимость потоков от длины канала для различных давлений в резервуаре. Видно, что при увеличении длины канала происходит уменьшение прямого потока ( $J_+$ ) и увеличение обратного потока ( $J_-$ ). Для более детального исследования этого явления расчеты проводились для каналов до 10 мкм включительно. При этом было обнаружено, что при определенных длинах канала и давлениях в резервуаре происходит так называемый эффект запираания: прямой и обратные потоки становятся одинаковыми и даются простым аналитическим соотношением  $J_- = J_+ = J_{th} / 2$ .

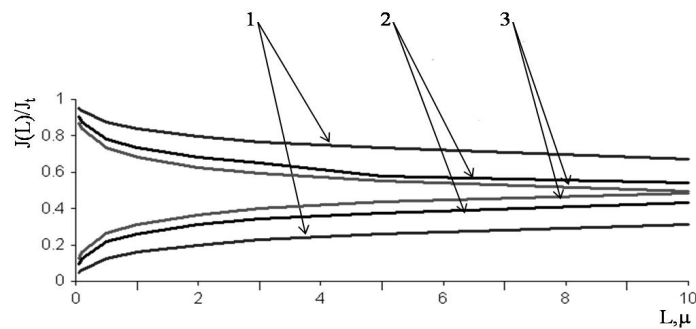


Рис. 4. Зависимость втекающего и вытекающего потоков от длины канала для различных давлений газа в резервуаре: 1 –  $P = 0.1$  атм, 2 –  $P = 0.5$  атм, 3 –  $P = 1$  атм

Численные расчеты показали, что при затекании газа через одно сечение потоки пропорциональны давлению в резервуаре. Особо следует отметить, что прямой поток растет с давлением быстрее обратного. Зависимость потоков от давления в резервуаре и длины канала в широком интервале изменения этих параметров представлена на рис. 5.

Для проверки применимости аналитических выражений теории разреженных газов к описанию потоков гелия в наноканалах было проведено сравнение результатов полученных в рамках метода молекулярной динамики с результатами молекулярно-кинетической теории (1) для случая истечения в вакуум (рис. 6).

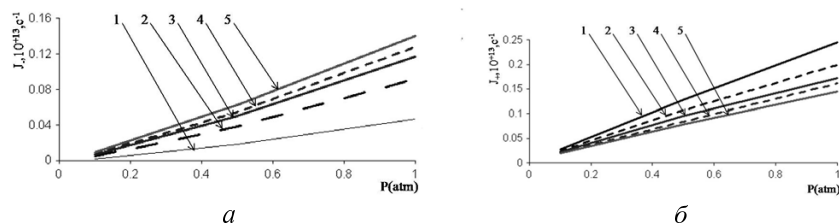


Рис. 5. Зависимость обратного потока (а) и вытекающего потока (б) от давления газа в резервуаре для различных длин канала. 1 –  $L = 0.1 \mu$ , 2 –  $L = 1 \mu$ , 3 –  $L = 3 \mu$ , 4 –  $L = 5 \mu$ , 5 –  $L = 10 \mu$ . Радиус канала  $R = 110 \text{ \AA}$ , температур газа  $T_g = 300 \text{ K}$

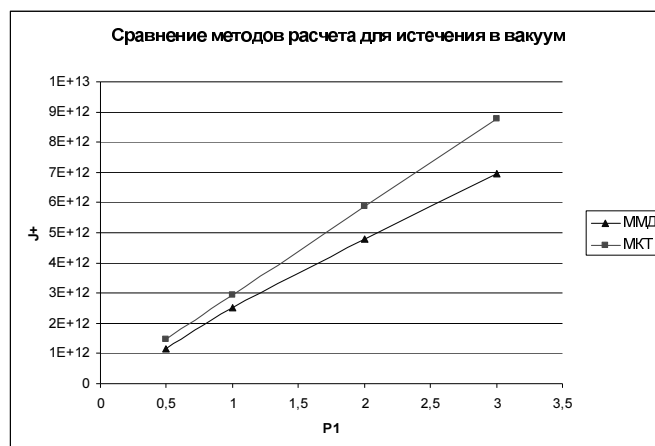


Рис. 6. Длина и радиус трубки для данного случая имеют следующие цифры  $L = 2 \mu$ ,  $R = 110 \text{ \AA}$ . Число Кнудсена варьировалось в интервале  $Kn = 83.64 - 13.94$

Как видно, учет взаимодействия атомов газа между собой, который обусловил появление обратного потока, привел к снижению потока газа примерно на 25-30 %. С увеличением длины каналов и уменьшением их радиуса разница в результатах увеличивается.

#### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, учет взаимодействия атомов гелия в газовой фазе в рамках метода молекулярной динамики приводит к уменьшению потока гелия на 25-30 %. Для достаточно длинных каналов обнаружен эффект «запирания» каналов, при котором канал может восприниматься как сосуд с двумя отверстиями, размеры которых удовлетворяют условиям применения модели свободных молекулярных потоков.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Головнев И.Ф. Molecular-dynamic study of a gas-dynamic flow in nanochannels / И.Ф. Головнев, М.С. Ожгибесов, В.М. Фомин // International Conference on the Methods of Aerophysical Research, 5 – 10 February, 2007, Novosibirsk, Russia, Proceedings. – Part V. – P. 57–61.
- [2] Головнев И.Ф. Modeling of the Gas Dynamic Process During the Deposition of Nanolayers on the Surface of Submicrometer Channels of Porous Solids / И.Ф. Головнев, В.М. Фомин, И.К. Игуменов, Б.М. Кучумов // EuroCVD 17 / CVD 17. – Part 1. Editors: M.T. Swihart, D. Barreca, R.A. Adomaitis, K. Worhoff. ESC Transactions. – 2009. – Vol. 25. – № 8. – P. 357–363.

*Озгибесов Дмитрий Сергеевич*, лаборант ИТПМ лаборатории № 4. Магистрант 2-го курса обучения в НГТУ. Основное направление научных исследований: численное моделирование движения атомов в наноканалах методом молекулярной динамики. E-mail: dozhgibesov@mail.ru

*Головнев Игорь Федорович*, кандидат физико-математических наук, действительный член Нью-Йоркской академии наук, старший научный сотрудник ИТПМ лаборатории № 4. Основное направление научных исследований: численное моделирование неравновесных явлений в твердых телах методом молекулярной динамики. E-mail: golovnev@itam.nsc.ru

*Фомин Василий Михайлович*, действительный член РАН (2006), директор ИТПМ СО РАН (с 1989 г.), доктор физико-математических наук (1984), профессор (1987), главный ученый секретарь СО РАН (с 1997 по 2008 г.), заместитель председателя СО РАН (с 2008 г.). Специалист в области математического моделирования задач механики сплошных сред и машиностроения. E-mail: fomin@itam.nsc.ru

**Ozhgibesov D.S., Golovnev I.F., Fomin V.M.**

*Study of helium flow in nanochannels and accounting impact collisions of atoms*

In the present study investigated the helium gas-dynamic flows in nanochannels cylindrical. The case of the gas flow from the reservoir into the vacuum. Used for reservoir modeling stochastic beam model. The interaction between helium atoms are described by the Lennard-Jones, and to describe the interaction of atoms with the walls of the channel model used mirroring. A comparison with the results of the molecular-kinetic theory.

**Key words:** helium, flow; nanochannel, cenospheres, the method of molecular dynamics.