

## Моделирование нестационарных течений многокомпонентного газа в газоразделительных устройствах с движущимися элементами

*А.Н. Якунчиков, В.В. Косьянчук*

*Москва, Механико-математический ф-т МГУ им. М.В.Ломоносова;*

*Москва, Институт механики МГУ им. М.В.Ломоносова;*

*Москва, Институт машиноведения им. А.А.Благонравова РАН*

*E-mail: art-ya@mail.ru*

*В работе изучаются нестационарные течения смеси газов в переходном режиме в области с подвижной границей. Интерес к данной задаче вызван поиском новых принципов газоразделения, которые можно реализовать на практике в виде микроэлектромеханической системы (MEMS). Для решения поставленной задачи использовался метод событийного молекулярно-динамического моделирования (EDMD), обобщенный авторами на случай, когда расчетная область имеет подвижные границы (моделирующие подвижные элементы устройства). Предложен и исследован новый принцип работы разделительного устройства, коэффициент разделения которого существенно выше, чем у диффузионного метода.*

***Simulation of non-stationary multicomponent gas flows in separation devices with moving elements. A.N. Yakunchikov, V.V. Kosyanchuk.*** *The paper studies non-stationary gas flow in a transitional regime in a region with a moving boundary. It is of interest due to the search for new principles of gas separation, which can be realized in practice as a micro-electromechanical system (MEMS). To solve the problem, we used the method of event-based molecular dynamic simulation (EDMD), which was generalized by the authors for the case when the computational domain has moving boundaries (simulating moving elements of the device). A new principle of operation of the separation device was proposed and investigated, its separation coefficient is significantly higher than that of the diffusion method.*

Физические методы разделения смеси газов на компоненты основаны на отличии молекулярных масс различных компонент. Самый простой способ состоит в пропускании смеси газов через мембрану, в каналах которой течение происходит в свободномолекулярном или переходном режиме. При этом условия газ с меньшей молекулярной массой движется в среднем быстрее через канал мембраны, чем газ с большей молекулярной массой. В результате на выходе из мембраны получается смесь, обогащенная легким компонентом. В настоящей работе исследуется возможность увеличения коэффициента разделения в таких системах за счет нестационарности течения. Предпосылкой к этому послужило следующее рассуждение. Рассмотрим канал, в котором в начальный момент газ отсутствует. На одном из торцов канала открывается задвижка и начинается истечение смеси газов из некоторого резервуара в рассматриваемый канал. Пусть режим течения в канале переходный или свободномолекулярный. Так как легкий газ движется в данных условиях в среднем быстрее, чем тяжелый, то в некоторый момент времени на определенном удалении от входного сечения канала будет находиться преимущественно легкий газ (т.к. тяжелый еще не успел преодолеть данное расстояние). Представим, что есть техническая возможность быстро перекрыть канал в этом месте, и часть смеси, которая успела преодолеть данное расстояние, направить в продуктовый резервуар, а ту часть, что не успела – вернуть в резервуар с исходной смесью. Тогда в данной идеализированной ситуации в продуктивном резервуаре окажется смесь, которая будет существенно более обогащена легким компонентом, чем та смесь, которая получается при стационарном истечении.

Для проверки приведенных выше рассуждений была поставлена задача, схема которой представлена на рис. 1. Система состоит из неподвижной части (статора) и пластины (ротора или бегунка), которая движется над статором с постоянной скоростью. Слева от статора находится резервуар с исходной смесью, справа – продуктивный резервуар, который откачан. В подвижной пластине сделано углубление высоты  $h$  (рис. 1). Сначала подвижная пластина

полностью закрывает резервуар с исходной смесью. Далее, когда в процессе движения пластины углубление оказывается над статором, резервуары становятся сообщающимися. Смесь может перетекать до тех пор, пока левая граница углубления не достигнет статора. При этом газ, не успевший попасть в продуктовый резервуар, будет оттеснен обратно в исходный резервуар.

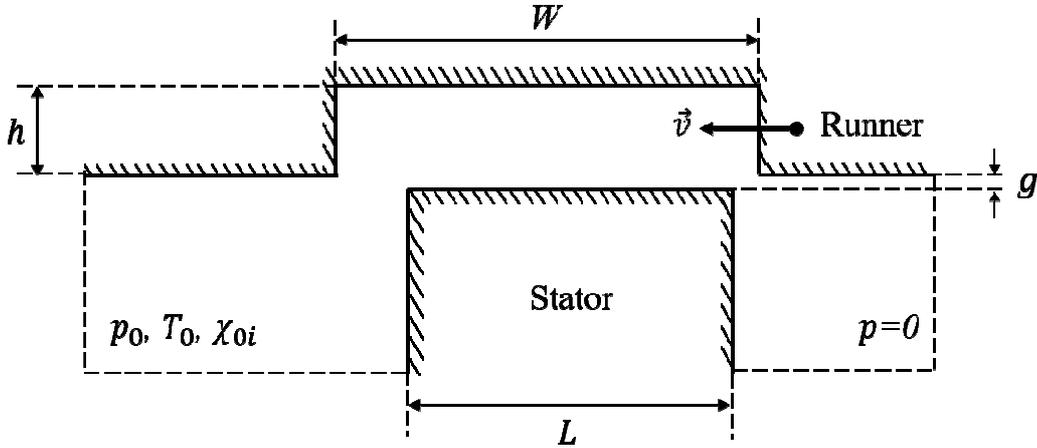


Рис.1. Геометрия изучаемой системы.

В качестве начального условия для описанной задачи использовалось решение вспомогательной стационарной задачи, схема которой изображена на рис. 2. И в основной, и во вспомогательной задаче резервуары слева и справа от статора моделируются областями конечных размеров. На открытых границах левого резервуара (изображены пунктиром на рисунках) ставились условия равновесия, соответствующие давлению, температуре и составу исходной смеси. На открытых границах правого резервуара ставилось нулевое давление.

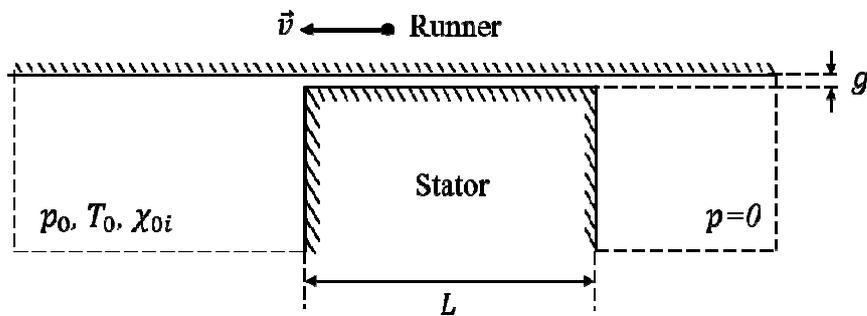


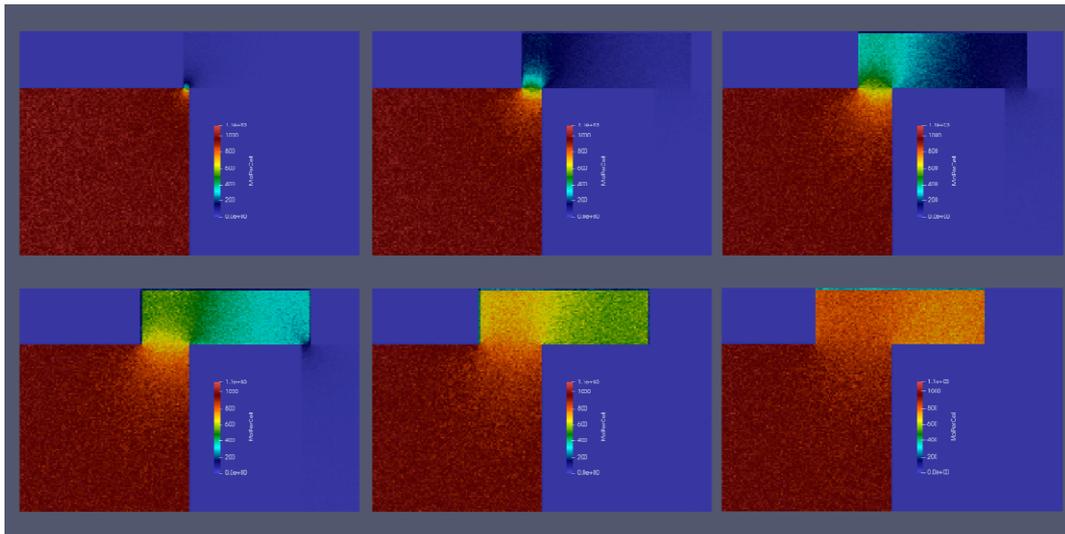
Рис. 2. Схема вспомогательной задачи, решение которой использовалось в качестве начального условия для основного расчета.

Задача исследовалась на примере смеси неона (Ne) и аргона (Ar), молярная концентрация которых в исходной смеси была  $\chi_{0i} = 0.5$ ,  $i = 1,2$ . Температура исходной смеси  $T_1 = 300K$ , число Кнудсена  $Kn = \lambda/h = 1$ . Геометрия и скорость движения верхней пластины варьировались:  $L/h = 1, 2, 4$ ,  $v\beta_1 = 0.01 - 0.2$ , где  $\beta_1 = \sqrt{m_1/2kT_w}$ ,  $m_1$  – масса молекулы легкого компонента (Ne). Влияние зазора  $g$  между статором и подвижной пластиной (см. рис. 1) пока не исследовалось, расчеты проведены для идеализированной геометрии  $g = 0$ .

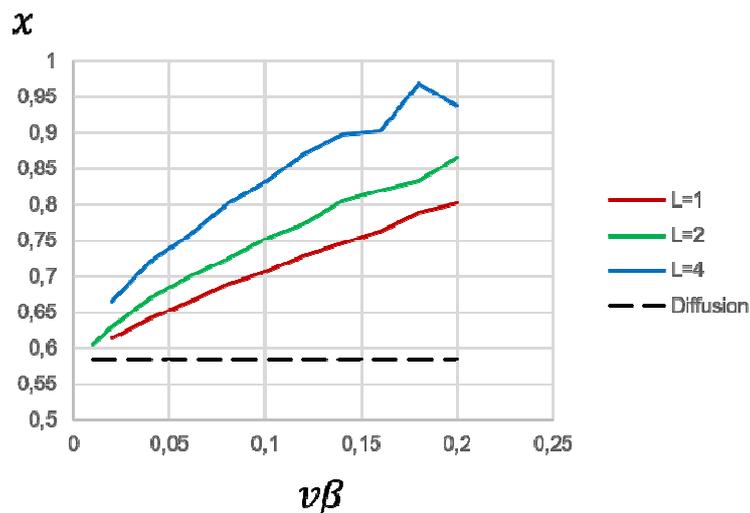
Расчеты проводились с помощью подхода событийного молекулярно-динамического моделирования (EDMD) [1]. Сильными сторонами разработанного метода является бессеточность, отсутствие стохастичности при моделировании межмолекулярных столкновений (по сравнению с методом прямого статистического моделирования Монте-Карло) и существенное снижение вычислительной нагрузки по сравнению с классическим молекулярно-динамическим моделированием. Рассматриваемая в настоящей работе задача имеет важную особенность – подвижные твердые поверхности. Это потребовало обобщения

разработанного авторами метода EDMD на случай движущейся границы. Расчеты каждой конфигурации проводились с помощью  $10^7$  моделирующих частиц и распараллеливались по одной задаче на ядро процессора.

На рис. 3 представлены характерные распределения числовой плотности в различные моменты времени для геометрии  $L/h = 2$  и скорости  $v\beta_1 = 0.04$ . Для анализа состава смеси, успевшей перетечь в правый резервуар, на входе в него была выставлена контрольная поверхность, потоки через которую суммировались. Результаты по всем рассчитанным конфигурациям представлены на рис. 4. Видно, что за счет нестационарности, можно существенно повысить молярную концентрацию легкого компонента по сравнению со стандартным диффузионным методом. Погрешности в определении состава для больших  $L/h$  и больших скоростей  $v\beta_1$  (левая часть кривой  $L/h = 4$ ) возникли из-за критически малого количества газа, успевающего протечь, через систему.



*Рис. 3. Распределение числовой плотности в моменты времени  $t_j = (0.1 + 0.25j)L/v$ ,  $j = 0, 1, \dots, 5$  (слева направо, сверху вниз).*



*Рис. 4. Молярная концентрация в продуктивном резервуаре в зависимости от скорости подвижной пластины для различных геометрий  $L/h = 1, 2, 4$ . Пунктиром нанесен максимальная концентрация легкого компонента, достижимая диффузионным методом для данной смеси.*

Необходимо отметить известный факт, что эффект разделения смеси возникает и в турбомолекулярном насосе (тяжелые газы откачиваются заметно лучше, чем легкие). С точки

зрения авторов, данный механизм достаточно близок к тому эффекту, который изучается в настоящей работе, но значительным отличием является скорость ротора. Как видно из рис. 4, эффект разделения в предложенном устройстве удается получить уже при скоростях пластины в несколько сотых от характерной тепловой скорости молекул. Такие скорости значительно легче достичь в микротехнике (по сравнению со скоростями, характерными для лопаток турбомолекулярных насосов).

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова [2] и вычислительных ресурсов МСЦ РАН. Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (грант № 17-71-10227).

#### Литература

1. A. Yakunchikov, V. Kosyanchuk, Application of event-driven molecular dynamics approach to rarefied gas dynamics problems, *Comput. Fluids*. 170 (2018) 121–127. doi:10.1016/j.compfluid.2018.05.002.
2. V. Sadovnichy, A. Tikhonravov, V. Voevodin, V. Opanasenko, “Lomonosov”: Supercomputing at Moscow State University, *Contemp. High Perform. Comput. From Petascale Towar. Exascale*. (2013) 283–307. doi:doi:10.1201/b14677-14.

## **Зависимость параметров импульсного блока питания от коэффициента заполнения импульсного сигнала и частоты импульсов**

*И.В. Михайлова, М.Ю. Акишин, Д.Д. Васильев, К.М. Моисеев  
Москва, МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2-я Бауманская ул., д. 5, стр. 1  
E-mail: [d.d.vasiliev@bmstu.ru](mailto:d.d.vasiliev@bmstu.ru)*

*В статье рассмотрены параметры импульсного блока питания, такие как скорость осаждения материала, средний ток, напряжение разряда, пиковый ток и мощность, в зависимости от коэффициента заполнения импульсного сигнала и частоты импульсов при импульсном магнетронном распылении.*

*Dependence of parameters of the pulsed power supply unit on the duty ratio of the pulse signal and the pulse frequency. I.V. Mihaylova, M.U. Akishin, D.D. Vasilev, K.M. Moiseev. Parameters of the pulsed power supply unit are reviewed: the deposition rate of the material, the average current, the discharge voltage, the peak current, the peak power according of the duty ratio of the pulse signal and the pulse frequency by pulsed magnetron sputtering.*

### **Введение**

Импульсные режимы магнетронного распыления применяются в технологии нанесения тонких пленок. Они имеют преимущества перед обработкой на постоянном токе. При импульсных режимах питания магнетронов снижается тепловая нагрузка на подложку и мишень. Это происходит вследствие увеличения скважности импульсов или нанесения многокомпонентного покрытия путём поочередного короткоимпульсного распыления нескольких мишеней для получения практически однородного состава покрытия. Импульс характеризуется коэффициентом заполнения импульсного сигнала и частотой.

Свойства покрытий зависят от скорости осаждения. В случае SSPD скорость влияет на разупорядоченность плёнки [1]. При импульсном магнетронном распылении можно увеличить скорость распыления без перегрева мишени или подложки, сохраняя постоянной среднюю мощность разряда, путем изменения значений коэффициента заполнения импульсного сигнала(D) и частоты импульсов(f) [2].