

УДК 6:539.1-022.532

Профессор Г.В. Абрамов, аспирант И.С. Толстова

(Воронеж. гос. ун-т инж. технол) кафедра информационных технологий моделирования и управления. тел. (473) 255-25-50

доцент А.Н. Гаврилов

(Воронеж. гос. ун-т инж. технол) кафедра информационных и управляющих систем. тел. (473)255-55-57

E-mail: irin2102ka@mail.ru

Professor G.V. Abramov, graduate I.S. Tolstova

(Voronezh state university of engineering technologies) Department of information technologies, modeling and control. phone. (473) 255-25-50

associate Professor A.N. Gavrilov

(Voronezh state university of engineering technologies) Department of information management systems. phone (473) 255-55-57

E-mail: irin2102ka@mail.ru

Формирование начального распределения компонентов плазмы на фазовой плоскости в методе крупных частиц при электродуговом синтезе УНС

Formation of the initial distribution of plasma components on the phase plane of large particles method in electric arc synthesis CNS

Реферат. В статье рассматриваются вопросы моделирования движения заряженных частиц многокомпонентной плазмы в электродуговом разряде с учетом парных столкновений в процессе синтеза углеродных наноструктур (УНС). Одним из распространенных методов получения качественных фуллеренов и нанотрубок является электродуговой синтез в атмосфере инертного газа (гелия). Определение необходимых условий и механизма образования углеродных кластеров в плазме, формирующих заданные УНС, позволит более эффективно и рационально управлять этим процессом. Особенностью задачи является то, что в плазме электродугового разряда и на поверхности катода происходит большое количество взаимодействий частиц. Из-за высоких температур и большой концентрации энергии в плазме детальное экспериментальное исследование провести сложно. С целью избегания проведения трудных и дорогостоящих физических экспериментов разрабатываются численные методы анализа плазменных процессов. В данной статье для решения системы уравнений Больцмана-Максвелла за основу авторами был взят метод крупных частиц, который позволяет сократить объем вычислений и снизить требования к вычислительным ресурсам. Авторы приводят общую расчетную схему метода крупных частиц, а также алгоритм распределения частиц многокомпонентной плазмы на фазовой плоскости в начальный момент времени. В заключении авторы утверждают, что полученные результаты в дальнейшем позволят определять зоны, удовлетворяющие энергетическим условиям вероятного формирования в плазме кластерных групп углерода, участвующих в синтез УНС.

Summary. The article deals with the modeling of charged particles in a multicomponent plasma of electric arc discharge with binary collisions in the synthesis of carbon nanostructures (CNS). One of the common methods of obtaining the quality of fullerenes and nanotubes is arc synthesis under inert gas (helium). The determination of the necessary conditions and the mechanism of formation of carbon clusters in the plasma forming set CNS will more effectively and efficiently manage this process. Feature of the problem is that in a plasma arc discharge is a large number of particle interactions and on the cathode surface. Due to the high temperatures and high energy concentration in plasma detailed experimental investigation difficult to carry out. With the aim of avoiding difficult and costly physical experiments developed numerical methods for the analysis of plasma processes. In this article to solve a system of equations of Maxwell - Boltzmann basis for the authors had taken the method of large particles, which reduces the amount of computation and reduce the demands on computing resources. The authors cites the general design scheme of the large particles, and the algorithm of particle distribution of a multicomponent plasma in the phase plane at the initial time. In conclusion, the author argues that the results in the future will define the zone satisfies the energy conditions, the probability of formation of a plasma cluster groups of carbon involved in the synthesis of the CNS.

Ключевые слова: электродуговой синтеза, углеродные наноструктуры, моделирование, интеграл столкновений, функция распределения

Keywords: arc synthesis, carbon nanostructures, modeling, collision integral, distribution function

© Абрамов Г.В., Толстова И.С., Гаврилов А.Н., 2014

Исследование процесса синтеза углеродных наноструктур (УНС), обладающих уникальными свойствами, является актуальным направлением развития современной науки. Практическое применение их в качестве небольших добавок (0,01 % - 5 %) в полимерные смолы уже позволяет получать различные полимерные наноконкомпозиты с комплексом новых (электропроводность, огнестойкость) или улучшенных свойств (увеличение запаса прочности, жесткости, повышение формоустойчивости, барьерных качеств) [1].

Рост современного промышленного производства УНС сдерживает низкая эффективность существующих технологий синтеза из-за недостаточной изученности механизмов образования кластерных групп формирующих УНС (фуллерены, нанотрубки, нановолокна) на основе взаимодействия атомов углерода [2].

Одной из перспективных технологий синтеза УНС высокого качества является метод термического распыления графита в низкотемпературной плазме в среде буферного газа [3]. Использование плазмы электродугового разряда характеризуется большим количеством различных эффектов взаимодействия частиц происходящих при фазовых и структурных превращениях углерода в многокомпонентной плазме и на поверхности катода. Все это, а также высокий порядок частиц в многокомпонентной плазме (~10E16-10E17), требующие значительные затраты машинного времени для численного расчета, определяет трудности моделирования данного процесса.

Одним из способов моделирования коллективных явлений в плазме является метод кинетического описания, использующего изменения функций распределения частиц до и после столкновений.

В основу разрабатываемой математической модели кинетики движения и взаимодействия частиц многокомпонентной плазмы в инертном газе, с учетом парных упругих и неупругих столкновений, положена система кинетических уравнений Больцмана для каждой компоненты плазмы с учетом интеграла столкновений, дополненная системой уравнений Максвелла [4, 5].

Решение системы уравнений Больцмана-Максвелла предполагает использование численных методов. За основу решения поставленных задач был взят метод «крупных частиц» (МКЧ), позволяющий значительно сократить объем вычислений и снизить требования к вычислительным ресурсам [6]. Главная идея МКЧ состоит в том, что фазовое пространство плазмы в начальный момент време-

ни разбивается на отдельные ячейки, в которых вместо реального числа частиц определенного вида в соответствии с начальной функцией распределения каждой компоненты $f(\vec{r}, \vec{\mathcal{Q}}, 0)$ рассматривается макрочастица, т.е. укрупненная частица с суммарным зарядом и массой всех частиц данного сорта, содержащихся в одной ячейке. После расчета траектории движения крупной частицы под действием электромагнитного поля, её нового положения в фазовом пространстве в последующий момент времени, на основе текущей функции распределения производится разнос заряда частицы по узлам фазового пространства, и процесс повторяется. Для этого используется СИС алгоритм МКЧ для трехмерного пространства (рисунок 1) [7].

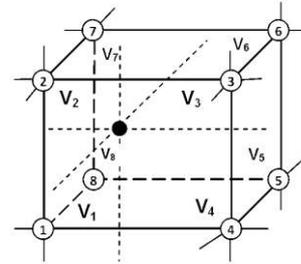


Рисунок 1. СИС алгоритм МКЧ

В трехмерном случае заряд разносится по узлам пропорционально объему V_i :

$$V = \sum_{i=1}^8 V_i, \quad q_d = q_i \frac{V_d}{V}; \quad d = \overline{1 \dots 8} \quad (1)$$

$$q_i = q_\alpha \cdot n_\alpha,$$

где q_d - разнесенный заряд макрочастицы в узле; q_i - заряд макрочастицы в ячейке.

Концентрация частиц сорта α в каждой ячейке:

$$n_\alpha = \int_V f_\alpha(\mathcal{Q}) d\mathcal{Q}, \quad (2)$$

где $\alpha = e, c, h$ (e - электрон, h - ион гелия, c - ион углерода).

Условия сходимости и адекватности решения используемого МКЧ [8] следующие:

- шаг интегрирования должен быть много меньше минимального характерного времени процессов в плазме (колебаний плазмы - Ленгмюровские волны):

$$\Delta t \leq 3.4 \frac{1}{\omega_p}, \quad \omega_p = 5.64 \cdot 10^4 \sqrt{n_e} \quad (3)$$

где ω_p - плазменная частота, n_e - концентрация электрона.

- шаг сетки должен быть меньше радиуса Дебая:

$$h \leq 0.2\lambda_D, \quad (4)$$

где λ_D - радиус Дебая.

Использование МКЧ позволяет сократить количество однотипных вычислений.

На рисунке 2 приведена общая расчетная схема метода крупных частиц.

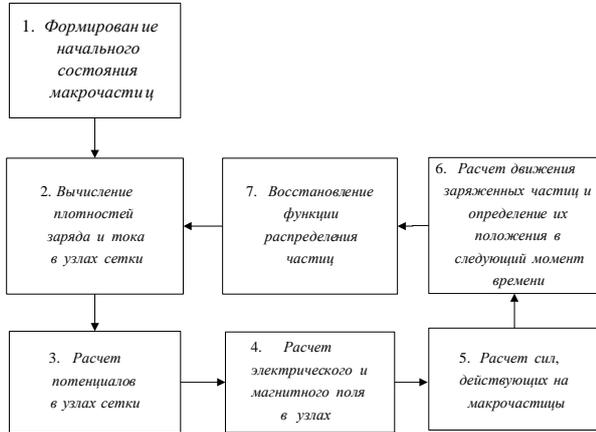


Рисунок 2. Расчетная схема метода крупных частиц

Важное место в использовании МКЧ для расчета синтеза наноструктур электродуговым методом занимает задача о начальном распределении компонентов плазмы.

Используемая расчетная сетка фазового пространства представлена на рисунке 3.

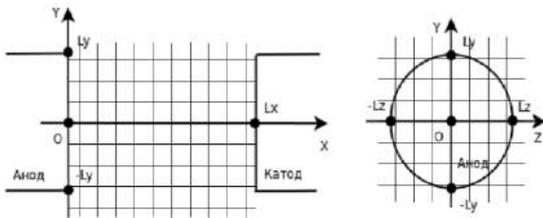


Рисунок 3. Расчетная сетка

Область решения имеет форму параллелепипеда. В ней вводится декартова система координат (x,y,z) . Вся область разбита на ячейки с размерами h_x, h_y, h_z вдоль соответствующих направлений:

$$\begin{aligned} h_x &= \frac{L_x}{n+1}, \\ h_y &= \frac{L_y}{m+1}, \\ h_z &= \frac{L_z}{b+1} \end{aligned} \quad (5)$$

где L_x, L_y, L_z - размер расчетной области; n, m, b - количество задаваемых узлов.

Частицы, моделирующие плазму, располагаются внутри ячеек. Каждая частица имеет свою скорость, которая при движении изменяется под действием электрического поля и за счет взаимодействия с другими частицами.

На первом этапе производится распределение частиц в ячейках, моделирующих плазму. Координаты $x_j^\alpha(0), y_j^\alpha(0), z_j^\alpha(0)$ и скорости $v_j^\alpha(0)$ частиц задаются с использованием датчиков случайных чисел. Нижний индекс j указывает номер частицы, а $\alpha = e, c, h$. Значения $v_j^\alpha(0)$ формируют распределение, задаваемое максвелловской функцией $f(\vec{r}, \vec{v}, 0)$. На рисунке 4 представлено начальное распределение частиц в фазовом пространстве. В начальный момент времени считается, что электроны и атомы инертного газа - гелия занимают все межэлектродное пространство, а ионы углерода распределены на границе поверхности торца анода (ось ординат).

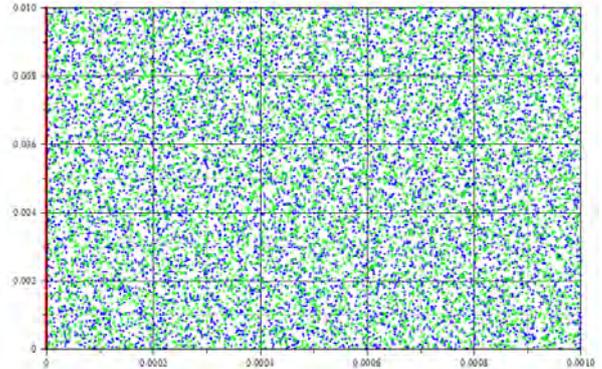


Рисунок 4. Начальное распределение компонентов плазмы

На следующем этапе в соответствии с начальной функцией распределения каждой компоненты плазмы считается число частиц сорта α в каждой ячейке. Для этого сначала необходимо определить ближайшие к частице узлы сетки или ячейку сетки, в которой находится частица. В случае прямоугольных ячеек расположение частицы находится в три операции (6-8):

$$i = \left[\frac{(x - x_0)}{h_x} \right] + 1, \quad (6)$$

$$k = \left[\frac{(y - y_0)}{h_y} \right] + 1, \quad (7)$$

$$l = \left[\frac{(z - z_0)}{h_z} \right] + 1, \quad (8)$$

где i, k, l - номер ячейки прямоугольной сетки, (x, y, z) координаты частицы, (x_0, y_0, z_0) - координаты начала сетки, h_x, h_y, h_z - шаг ячейки. Здесь операция в квадратных скобках [...] означает взятие целой части.

На следующем этапе суммируются заряды всех частиц данного сорта, содержащиеся в одной ячейке, суммарный заряд присваивается одной модельной (крупной) частице данного сорта.

Для определения координат центров крупных частиц в ячейках используются формулы нахождения центра масс. В системе материальных точек координаты центра масс определяются по формулам (9-11):

$$x_c = \frac{\sum_i m_i \cdot x_i}{\sum_i m_i}, \quad (9)$$

$$y_c = \frac{\sum_i m_i \cdot y_i}{\sum_i m_i}, \quad (10)$$

$$z_c = \frac{\sum_i m_i \cdot z_i}{\sum_i m_i}, \quad (11)$$

где $\sum_i m_i$ - суммарная масса системы; x_i , y_i и z_i - координаты i -й материальной точки; m_i - масса i -й материальной точки.

Исходя из суммарного объема, занимаемого частицами, определяются условные радиусы крупных частиц (12):

$$R_{кч} = \left(\frac{3 \cdot \chi \cdot \left[\frac{4}{3} \cdot \pi \cdot R_\alpha^3 \cdot N \right]}{4 \cdot \pi} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (12)$$

где R_α - радиус частиц; χ - коэффициент учитывающий задаваемую плотность частиц в макрочастице ($\chi \approx 6 \dots 10$); N - число частиц в крупной частице).

Количество эмиссионных электронов в единицу времени в межэлектродное пространство с торца катода:

$$n_{eK} = \frac{I \Delta t}{e}, \quad (13)$$

где I - сила тока дуги, $\Delta t = h_t$ - шаг интегрирования по времени, e - заряд электрона.

Количество эмиссионных электронов в единицу времени в ячейке:

$$n_e = \frac{n_{eK} \cdot L_y \cdot L_z}{\pi R_K^2}, \quad (14)$$

где R_K - радиус катода.

Количество эмиссионных ионов углерода в единицу времени при разрушении анода:

$$n_{CA} = \frac{g_A \Delta t}{m_C}, \quad (15)$$

где g_A - скорость выгорания анода по экспериментальным данным, m_C - масса атома углерода, Δt - шаг по времени интегрирования.

Количество эмиссионных ионов в единицу времени в ячейке при равномерном законе выгорания анода:

$$n_C = \frac{n_{CA} \cdot L_y \cdot L_z}{\pi R_A^2}, \quad (16)$$

где R_A - радиус анода.

Общее число атомов буферного газа K_G в межэлектродном пространстве:

$$K_G = \frac{PVM}{RTm_g}, \quad (17)$$

где P - давление газа в камере, V - объем межэлектродного пространства, R - газовая постоянная, T - температура, M - молярная масса буферного газа, m_g - масса одного атома буферного газа (гелия).

Общее число ионов буферного газа определяется из условия квазинейтральности плазмы:

$$N_G = N_e - N_C, \quad (18)$$

где N_e , N_C - общее количество электронов и атомов углерода в плазме.

На рисунке 5 представлено полученное начальное распределение крупных частиц атомов гелия и ионов углерода для давления в камере синтеза буферного газа при $P=100$ Торр и диаметре углеродного электрода $d=10E-3$ м.

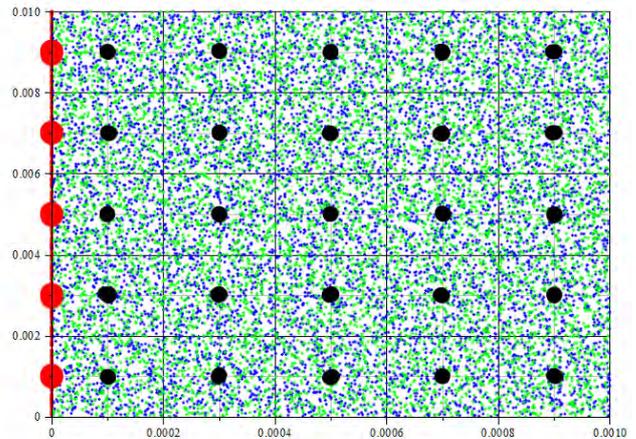


Рисунок 5. Распределение крупных частиц атомов углерода и гелия для $t=0$

Формирование начального распределения компонентов плазмы на фазовой плоскости определяет движение и условия взаимодействия частиц многокомпонентной плазмы в инертном газе, что позволяет определять зоны, удовлетворяющие энергетическим условиям вероятного формирования в плазме кластерных групп углерода со связями C-C, C=C или C=C-C, участвующих в синтез УНС.

ЛИТЕРАТУРА

- 1 Гаврилов А.Н., Пологно Е.А., Рязанов А.Н. Анализ методов синтеза и промышленное производство углеродных нанотрубок // ФЭС: Финансы. Экономика. Стратегия. 2010. № 6. С. 14-19.
- 2 Раков Э.Г. Состояние производства углеродных нанотрубок и нановолокон // Российские нанотехнологии. 2008. Т. 3. № 9-10. С. 89-94.
- 3 Гаврилов А.Н. Исследование структуры и стандартизация углеродных нанотрубок // Вестник ВГТА. 2009. №2(40). С. 94-99.
- 4 Абрамов Г.В., Гаврилов А.Н., Татаркин Е.С. Влияние газоплазменной струи в процессе электродугового испарения графитового электрода на формирование углеродных нанотрубок // Вестник ВГТА. 2010. № 2(44). С. 60-63.
- 5 Абрамов Г.В., Гаврилов А.Н. Математическое моделирование движения взаимодействующих частиц на основе функций распределения в плазме электродугового синтеза УНС // Вестник ВГУИТ. 2012. № 2(52). С. 71-75.
- 6 Белоцерковский О.М., Давыдов Ю.М. Метод крупных частиц в газовой динамике. Вычислительный эксперимент. М.: Наука, Физматгиз, 1982. 392 с.
- 7 Цветков И.В. Применение численных методов для моделирования процессов в плазме: учебное пособие. М: МИФИ, 2007. 84 с.
- 8 Хонки Р., Иствуд Д. Численное моделирование методом частиц: пер. с англ. М: Мир, 1987. 640 с.

REFERENCES

- 1 Gavrilov A.N., Pologno E.A., Riazanov A.N. The analysis of methods of synthesis and manufacturing carbon nanotubes. *FES: Finansy. Ekonomika. Strategiya*. [FES: Finance. Economy. Strategy.], 2010, no. 6, pp.14-19. (In Russ.).
- 2 Rakov E.G. State of production carbon nanotubes and nanofibers. *Rossiiskie nanotekhnologii* [Russian Nanotechnology], 2008, vol. 3, no. 9-10, pp. 89-94. (In Russ.).
- 3 Gavrilov A.N. Investigation of the structure and standardization of carbon nanotubes. *Vestnik VGTA*. [Bulletin of VSTA], 2009, no. 2(40), pp. 94-99. (In Russ.).
- 4 Abramov G.V., Gavrilov A.N., Tatarkin E.S. Effect gas flame jet during arc evaporation of graphite electrodes to form carbon nanotubes. *Vestnik VGTA*. [Bulletin of VSTA], 2010, no. 2(44), pp.60-63. (In Russ.).
- 5 Abramov G.V., Gavrilov A.N. Mathematical modeling of the motion of interacting particles on the basis of the distribution functions in the plasma arc synthesis CNS. *Vestnik VGUIIT*. [Bulletin of VSUET], 2012, no. 2(52), pp.71-75. (In Russ.).
- 6 Belotserkovskii O.M., Davydov Iu.M. Metod krupnykh chastits v gazovoi dinamike. Vychislitelnyi eksperiment [Method of large particles in the gas dynamics. Computer experiment]. Moscow, Nauka, Fizmatgiz Publ., 1982. 392 p. (In Russ.).
- 7 Tsvetkov I.V. Primenenie chislennykh metodov dlia modelirovaniia protsessov v plazme: uchebnoe posobie [Application of numerical methods for the simulation of plasma: a tutorial]. Moscow, MIFI Publ., 2007. 84 p. (In Russ.).
- 8 Honky R., Eastwood D. Numerical modeling of particle method. Moscow, World, 1987. 640p. (Russ. ed.: Xonki R., Istvud D. Chislennoe modelirovanie metodom chastic. Moscow, Mir Publ., 1987. 640 p.).