محاسبه ضرایب انطباق مومنتوم در برهمکنش گاز هگزافلورایداورانیم و سطح پلیمری با شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

یوسفی نسب، صادق *(۱)- صفدری، سید جابر(۱)- کریمی ثابت، جواد (۱)- ملاح، محمد حسن (۱)- امینی، الهام (۲)- نوروزی، علی(۲)- حسنوند، محسن (۱)

[1]سازمان انرژی اتمی ایران، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکده مواد و سوخت هسته ای

[2]سازمان انرژی اتمی ایران، شرکت فناوری های پیشرفته ایران

چکیده

در فرآیند برخورد مولکول های گاز با مولکول‌های سطح، نیروهای جاذبه و دافعه بین مولکولی موجب تغییر در موقعیت و سرعت مولکول‌های گاز بعد از نزدیکی مولکول‌ها به یکدیگر می‌شود. در یک برخورد، وابسته به مدت زمان برهمکنش بین مولکول‌های گاز و سطح، تبادل اطلاعات بین آن‌ها متفاوت خواهد بود. جنس مولکول‌های گاز و سطح، عدد نادسن، دمای مولکول‌های گاز، سرعت سطح و زاویه برخورد مولکول‌های گاز با آن از عوامل تاثیر گذار بر مقدار تبادل اطلاعات بین مولکول‌ها می‌باشد. ضرایب انطباق مومنتوم بین مولکول‌های گاز هگزافلوراید اورانیم و سطح پلیمری معیاری برای سنجش مقدار تبادل اطلاعات مربوط به ممنتوم می‌باشد. در این مقاله این ضرایب با استفاده از روش دینامیک‌مولکولی (MD) و در شرایط مختلف محاسبه می‌شوند.

کلمات کلیدی: ضرایب انطباق، MD، هگزافلوراید اورانیم، سطح پلیمری

۱-مقدمه

یکی از روش‌های حل معادله بولتزمن برای تحلیل دینامیک گازهای رقیق، استفاده از روش احتمالاتی DSMC می‌باشد که در صورت انتخاب تعداد شبکه و تعداد ذرات مناسب، یک حل از روش DSMC را می‌توان جوابی از حل معادله بولتزمن دانست[1] . یکی از مراحل بسیار مهم در روش DSMC تعیین شرط مرزی مناسب برای انعکاس مولکول‌های برخورد کرده با سطح می‌باشد. در بیشتر مسائل مهندسی شرط مرزی انتشاری با دقت نسبتاً خوبی مورد استفاده قرار می‌گیرد. انعکاس ذرات بر اساس دما و سرعت سطح مزیت این شرط مرزی می‌باشد ولی از طرفی انعکاس تصادفی آن‌ها از سطح غیرواقعی است. شرط مرزی دیگری که مورد استفاده قرار می‌گیرد شرط مرزی طیفی می‌باشد که در آن ذرات به صورت تصادفی از سطح منعکس نمی‌شوند ولی مولکول‌های برخوردی به سطح، دما و سرعتی متناسب با سطح به خود نمی‌گیرند. یک مدل مفید با دقت مناسب برای برهمکنش‌های گاز-سطح استفاده از مدل CLL می‌باشد که توسط سرسیگنانی و لمپیس پیشنهاد گردید و بعد از آن توسط لورد برای استفاده در روش DSMC توسعه داده شد [2, 3]. این مدل شامل دو پارامتر ضرایب تجمع برای انرژی نرمال و مومنتوم مماسی می‌باشد [4]. هدف از تمام بررسی‌ها استخراج

رابطه‌ای بین ضرایب تجمع و پارامترهای ورودی از قبیل دمای گاز و سطح، ساختار و زبری سطح، جنس گاز، عدد نادسن گاز و زاویه ورودی گاز می باشد[5] . بنابراین انتخاب مقدار صحیح ضریب تجمع یک مسئله حیاتی و بسیار مهمی می‌باشد که بسیاری از محققین با آن مواجه هستند [7]. هدف اصلی از این مقاله، محاسبه مقادیر ضرایب تجمع مومنتوم و انرژی با استفاده از روش شبیه سازی دینامیک مولکولی می‌باشد. در اوایل دهه ۱۹۹۰ شبیه‌سازی‌هایی انجام گرفت که در آن‌ها رفتار مولکول‌های گازی در برخورد با دیواره‌های فلزی به صورت سه بعدی مورد شبیه‌سازی قرار گرفت. رینهلد و همکارانش با استفاده از یک شبیه سازی دینامیک مولکولی اثر پراکندگی مولکول‌های Ar، N_2 و CO_2 بر روی سطوح Pt، Si و Hydroxylated silicon، را مورد بررسی قرار دادند و اثر تغییرات دمای سطح و زاویه ورودی مولکول‌های برخوردی به سطح را بر مقدار TMAC ارزیابی کردند [6]. بینگ-یانگ کائو به بررسی وابستگی TMAC به دمای سطح با استفاده از شبیه سازی‌های دینامیک مولکولی پرداختند و نشان دادند که با افزایش دما مقدار TMAC کاهش می‌یابد [7]. یوسفی نسب و همکارانش مقدار TMAC برای برهمکنش های مولکول های گازهای نجیب با مولکول‌های سطح پلیمری از جنس DGEBA-THPA/Graphite Fiber محاسبه کردند و نشان دادند که مقدار این ضریب در شرایط مختلف دمایی، فشاری و سرعت سطح مقداری غیر از واحد را به خود می‌گیرد [8].

۲- تئوری

برای برهمکنش‌های بین گاز-سطح، ماکسول دو مدل کلاسیک انتشاری و طیفی را در تئوری جنبشی معرفی کرد. در مدل انتشاری، مولکول‌های گاز نزدیک دیواره برای یک مدت زمان طولانی جذب می‌شوند به همین دلیل به طور میانگین، هر مولکولی که با دیواره برخورد می‌کند تمامی ممنتوم خود را به دیواره منتقل می‌کند یا به عبارتی دیگر تمامی اطلاعات مربوط به ممنتوم آن قبل از برخورد از بین می‌رود. بعد از آن مولکول‌های جذب شده با احتمال برابر برای انعکاس، در تمامی زوایا از دیواره منعکس می‌گردند. در این مدل برخورد، ممنتوم مماسی به طور کامل از بین می‌رود و مقدار ممنتوم نرمال متناسب با دمای دیواره تغییر می‌کند. مدل برخورد طیفی، مولکول یک برخورد کاملاً الاستیک است که هیچ گونه جذبی بر روی دیواره صورت نمی‌گیرد. در نتیجه هیچ تبادل ممنتومی بین مولکول برخورد کرده و دیواره اتفاق نمی افتد. در مدل طیفی، زاویه انعکاس نسبت به مدل انتشاری واقعی‌تر است ولی در مدل انتشاری دما و سرعت مولکول‌ها بعد از برخورد، نسبت به مدل طیفی واقعی تر است. در نتیجه ترکیبی از این دو مدل در یک مدل می‌تواند حالت واقعی‌تری از یک برهمکنش بین گاز-سطح را بیان کند. در شرایطی که زمان جذب مولکول‌ها بر روی دیواره خیلی بلند مدت یا کوتاه مدت نباشد، استفاده از مدل‌های نفوذی یا طیفی مناسب نمی‌باشد. به همین دلیل ترکیبی از دو روش انتشاری و طیفی برای استفاده در شرط مرزی‌های مورد استفاده در روش DSMC توسط سرسیگنانی –لمپیس و لورد پیشنهاد گردید. به دلیل اینکه اطلاعات مولکول‌های برخوردی و منعکس شده از یک سطح در اکثر موارد شناخته شده نمی‌باشد، پیش‌بینی

ضریب TMAC معمولاً از روش‌های آزمایشگاهی یا شبیه سازی عددی (دینامیک مولکولی) به دست می‌آید [5]. ضریب تجمع ممنتوم مماسی TMAC، مومنتم نرمال NMAC و انرژی مماسی EAC پارامترهایی می‌باشند که مقدار تبادل ممنتوم و انرژی را به ترتیب بین گاز و سطح بیان می‌کنند و به صورت روابط ۱، ۲ و۳ بیان می‌شوند [7].

$$TMAC = \sigma_t = \frac{P_t^i - P_t^r}{P_t^i - P_t^w} = \frac{mV_t^i - mV_t^r}{mV_t^i - mV_t^w} = 1 - \frac{v^i v^r + w^i w^r}{(v^i)^2 + (w^i)^2} \quad (۱)$$

$$EAC = \alpha_t = \frac{q_t^i - q_t^r}{q_t^i - q_t^w} = \frac{\frac{1}{2} m{V_t^i}^2 - \frac{1}{2} m{V_t^r}^2}{\frac{1}{2} m{V_t^i}^2 - \frac{1}{2} m{V_t^w}^2} = \frac{T^i - T^r}{T^i - T^w} \quad (۲)$$

$$NMAC = \sigma_n = \frac{mu^i - mu^r}{mu^i - P_{nw}} = \frac{\sqrt{T_n^i} - \sqrt{T_n^r}}{\sqrt{T_n^i} - \sqrt{T_n^w}} \quad (۳)$$

و رابطه زیر برای ضریب انطباق انرژی و مومنتم حاکم می‌باشد:

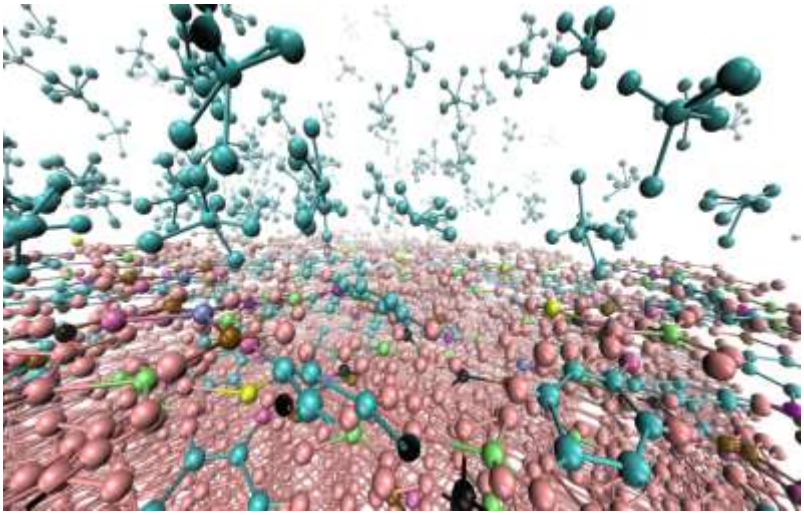
$$\alpha_n = \sigma_n \quad (۴)$$

$$\alpha_t = \sigma_t(2 - \sigma_t) \quad (۵)$$

۳- نتایج شبیه‌سازی دینامیک‌مولکولی

در ابتدا با استفاده از دینامیک مولکولی، به شبیه‌سازی برهمکنش بین مولکول‌های گاز هگزافلورایداورانیم و مولکول‌های سطح پلیمری DGEBA-THPA/Carbon Fiber پرداخته می‌شود. مولکول‌های گاز هگزافلورایداورانیم در برخورد با سطح پلیمری دچار تله-واجذب[۱] پخش معکوس پراکندگی[۲] برخوردهای دوگانه یا چندتایی می‌شوند. با توجه به میزان احتمال رخداد هر یک از این پدیده‌ها، مقدار ضرایب انطباق می‌تواند تغییر پیدا کند. عدد نادسن، دمای گاز، سرعت سطح و جنس مولکول‌های گاز و سطح تعیین کننده میزان رخداد هر یک از این احتمالات می‌باشند. شکل (۱) قرارگیری مولکول‌های گاز هگزافلورایداورانیم در مجاورت مولکول‌های سطح پلیمری را با استفاده از شبیه‌سازی MD نشان می‌دهد.

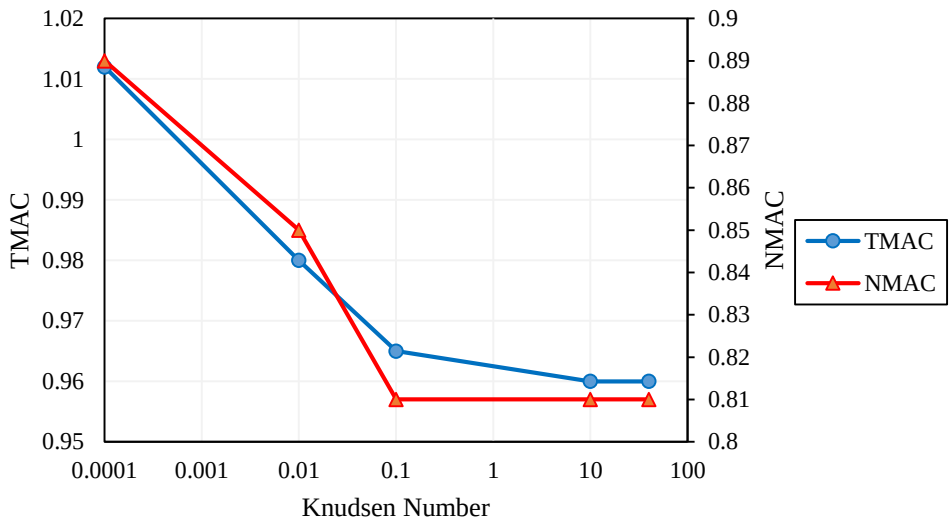
[۱] Trapping-desorption behavior
[۲] Backscattering



شکل ۱. قرارگیری مولکول‌های گاز هگزافلوراید اورانیم در کنار سطح پلیمری با روش MD

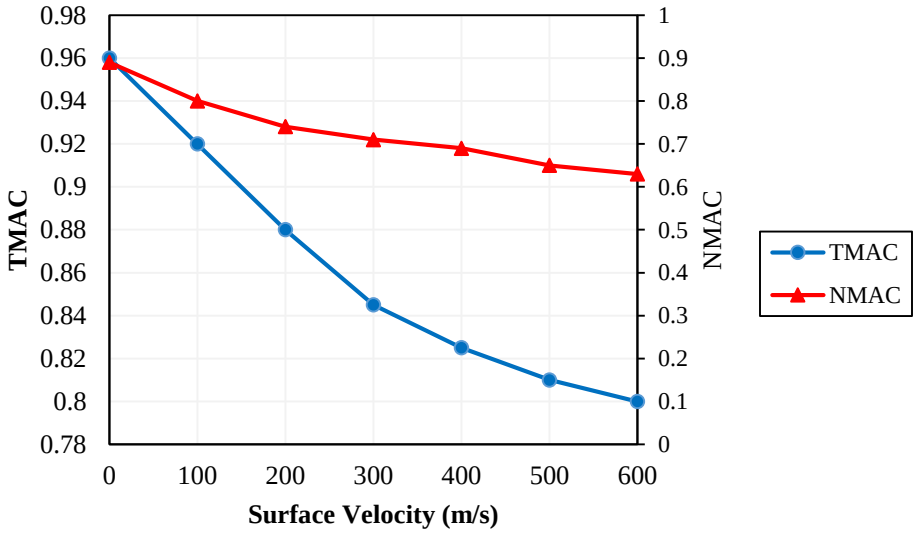
نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای به دست آوردن مقادیر ضرایب انطباق گاز هگزافلورایداورانیم در مجاورت سطح رزین پلیمری DGEBA به همراه عامل پخت THPA که از چند لایه عامل استحکام کننده کربن در آن استفاده گردیده است در ادامه آورده شده است. به دلیل حساسیت مقدار ضرایب انطباق به مقادیر عدد نادسن، دما، زبری و سرعت سطح، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در تمامی حالت‌های مذکور صورت گرفته است.

در شکل (۲) برای تغییرات عدد نادسن از رژیم مولکولی ($K_n > 0.1$) تا یک رژیم پیوسته ($K_n < 0.1$)، در دمای T=300 k تغییرات ضریب انطباق مومنتم مماسی مورد بررسی قرار گرفته است. پارامتر TMAC و NMAC در اعداد نادسن مربوط به رژیم‌های کاملاً مولکولی و گذار، با تغییرات فشار تغییری نمی‌کند. در واقع در این رژیم‌های جریانی، فاصله بین مولکول‌های گاز بیشتر از فاصله شعاع قطع مولکول‌ها می‌باشد در نتیجه برهمکنش‌های غیرپیوندی بین مولکول-های گاز، بر روی یکدیگر اثر نخواهند گذاشت.



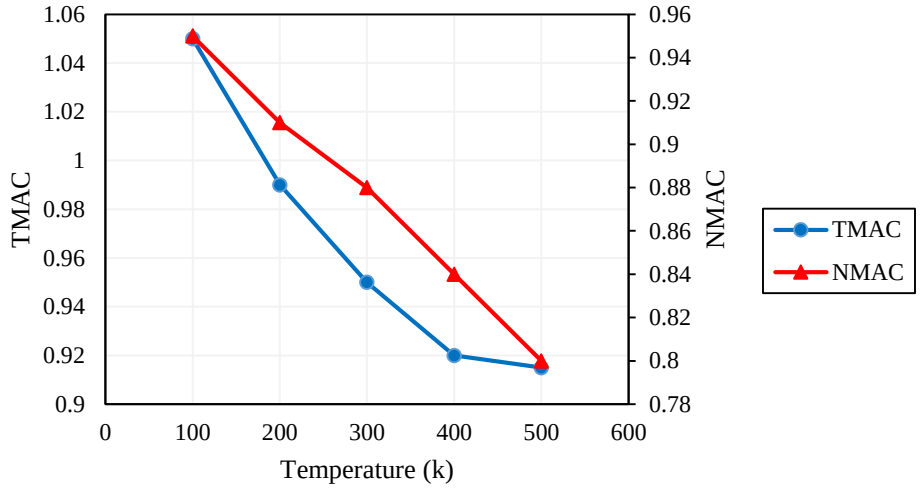
شکل ۲. تغییرات TMAC و NMAC در عددهای نادسن مختلف

یکی دیگر از پارامترهای موثر در مقدار TMAC و NMAC سرعت سطح می‌باشد. تغییرات مقدار TMAC و NMAC با افزایش سرعت سطح یک رابطه عکس به خود می‌گیرد (شکل ۳). در واقع می‌توان گفت که با افزایش سرعت سطح، زمان جذب مولکول‌های گاز با دیواره کاهش می‌یابد. همانطوری که در شکل مشاهده می‌گردد، زمانی که پراکندگی غیرالاستیک افزایش می‌یابد انحراف از مقادیر انطباق کامل (شرط مرزی انتشاری) می‌تواند قابل ملاحظه باشد و در نتیجه مقدار TMAC و NMAC کاهش می‌یابد.



شکل ۳. تغییرات TMAC و NMAC در سرعت های مختلف برای سطح

از دیگر عوامل مؤثر بر مقدار TMAC، فاکتور دما می‌باشد. در شکل (٤) تغییرات TMAC برای محدوده‌های دمایی بین ۱۰۰ تا ۵۰۰ کلوین برای برهمکنش مولکول‌های گاز هگزافلوراید اورانیم با دیواره پلیمری نشان داده شده است. به دلیل رفتار تله-واجذب[۳]مولکول‌های گاز نزدیک به سطح، TMAC با دما به صورت نمایی تغییر می‌کند. با کاهش دما، این رفتار به دلیل برخوردهای چندگانه افزایش می‌یابد. با افزایش رفتار تله-واجذب مقدار NMAC نیز افزایش می‌یابد. مهمترین اختلاف بین NMAC و TMAC حساس‌تر بودن مقدار TMAC به دماهای پایین‌تر می‌باشد.



شکل ٤. تغییرات TMAC و NMAC در دماهای مختلف گاز

۳-نتیجه‌گیری

به دلیل میزان اهمیت ضرایب انطباق ممنتوم و انرژی به میزان دقت و صحت نتایج حاصل از شرط‌مرزی تعریف شده برای روش DSMC، در این مقاله از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای استخراج این ضرایب در یک برهمکنش مولکول‌های گاز سطح با مولکول‌های سطح پلیمری از جنس DGEBA-THPA/Carbon Fiber استفاده گردید. با توجه به حساسیت این ضرایب به عدد نادسن، دما و سرعت سطح، این ضرایب برای تغییرات گسترده‌ای از موارد مذکور استخراج گردید. بر اساس مشاهده نتایج استخراج شده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، ملاحظه گردید که مقدار TMAC و NMAC در یک برهمکنش با سطوح پلیمری مقادیری غیر از واحد به خود می‌گیرند. در نتیجه برای رسیدن به نتایج

[۳] Trapping-desorption behavior

دقیق‌تر برای شرط مرزی‌های شامل مولکول‌های گاز هگزافلوراید اورانیم و مولکول‌های سطح پلیمری، استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و استفاده از ضرایب تجمع پیش‌بینی شده توسط آن در روش DSMC، الزامی می‌باشد.

٤-مراجع

[1] G. Bird, The DSMC method, The University of Sydney, 2013.

[2] R. Lord, "Some extensions to the Cercignani-Lampis gas-surface scattering kernel," *Phys. Fluids A,* p. 706–710, 1991.

[3] R. Lord, "Some further extensions of the Cercignani-Lampis gas-surface interaction model," *Phys. Fluids,* vol. 7, p. 1159–1161, 1995.

[4] C. Cercignani and M. Lampis, "Kinetic models for gas-surface interactions," *Transp. Theory Stat.Phys.,* vol. 1, p. 101–114, 1971.

[5] A. Agrawal and S. V. Prabhu, "Survey on measurement of tangential momentum accommodation coefficient," *vacuum and technology,* pp. 634-645, 2008.

[6] J. Reinhold, T. Veltzke, B. Wells, J. Schneider, F. Meierhofer, L. Colombi Ciacchi, A. Chaffee and J. Thöming, "Molecular dynamics simulations on scattering of single Ar, N2, and CO2molecules on realistic surfaces," *Computers & Fluids,* pp. 31-39, 2014.

[7] B.-Y. Cao, M. Chen and Z.-Y. Guo, "Temperature dependence of the tangential momentum accommodation coefficient for gases," *APPLIED PHYSICS LETTERS,* 2005.

[8] S. Yousefi-Nasab, J. Safdari, J. Karimi-Sabet, A. Norouzi and E. Amini, "Determination of Momentum Accommodation Coefficients and Velocity Distribution Function for Noble Gas-Polymeric Surface Interactions Using Molecular Dynamics Simulation," *Applied Surface Science,* vol. 493, pp. 766-778, 2019.