

мя наиболее медленного изменения заряда, то есть во время прохода участков орбиты с минимальной и с максимальной освещённостью.

Потребляемая мощность составляет менее 1Вт, габариты платы $\approx 15 \times 20$ см, вес ≈ 150 г.

ИССЛЕДОВАНИЕ АДСОРБЦИОННО-ДЕСОРБЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ МЕТОДОМ ВЕРОЯТНОСТНОГО КЛЕТОЧНОГО АВТОМАТА

Коныгин С.Б.

Адсорбционно–десорбционные процессы являются неотъемлемой частью практически каждого технологического процесса. В настоящее время анализ адсорбционных процессов проводится, как правило, на основании макроскопических (термодинамических) подходов. Эти подходы абстрагируются от микроскопической структуры исследуемой системы и рассматривают ее как сплошную среду, описываемую с помощью усредненных макроскопических параметров. При этом опускается большое количество информации, связанной с процессами, происходящими на атомно-молекулярном уровне. Широкое распространение термодинамических подходов обусловлено следующими обстоятельствами:

относительная простота используемого математического аппарата;
наличие широкого круга справочной информации по термодинамическим свойствам веществ, параметрам процессов и т.д.;

относительная простота проведения экспериментальных исследований с целью определения параметров физических моделей.

Однако производственная практика показывает, что значения параметров, входящих в термодинамические модели, испытывают существенные изменения в течение всего срока эксплуатации адсорбента. Чрезвычайно важным является то обстоятельство, что эти изменения происходят за счет таких процессов, которые никак не учитываются в рамках макроскопического подхода. В этой связи для адекватного описания адсорбционных технологических процессов с помощью термодинамических методов необходимо проведение широкого спектра экспериментальных исследований, целью которых является изучения динамики изменения параметров адсорбента в течение срока службы. Проведение такого рода исследований сопряжено со значительными трудностями, обусловленными, в первую очередь, многообразием адсорбентов, адсорбируемых веществ и технологических режимов.

В этой связи разработка новых методов эффективного моделирования адсорбционно-десорбционных процессов представляет значительный интерес. В настоящей работе для анализа указанных процессов предлагается использовать метод вероятностного клеточного автомата (ВКА) /1,2/.

При моделировании адсорбционно-десорбционных процессов методом ВКА поверхность адсорбента представляется в виде сети дискретных ячеек. Каждая из ячеек отражает одну вакансию на поверхности адсорбента и может содержать одну адсорбированную частицу или оставаться пустой.

Для моделирования поверхностных физико-химических процессов наиболее целесообразно использовать двумерные структуры ВКА, в которых обе координатные оси направлены параллельно поверхности подложки. В зависимости от типа кристаллической решетки материала можно использовать следующие структуры:

- 1) с квадратными (или прямоугольными) ячейками (рисунок 1);
- 2) с треугольными ячейками (рисунок 2);
- 3) с шестиугольными решетками (рисунок 3).

Выбор типа ячеек может быть продиктован, например, валентностью атомов кристалла. Так, для четырехвалентных атомов целесообразно использовать структуру 1, а для трехвалентных – 2.

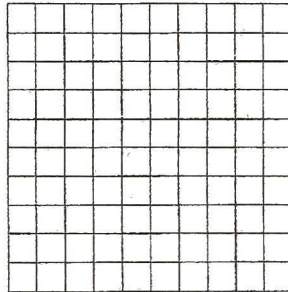


Рисунок 1 – Структура ВКА с квадратными ячейками

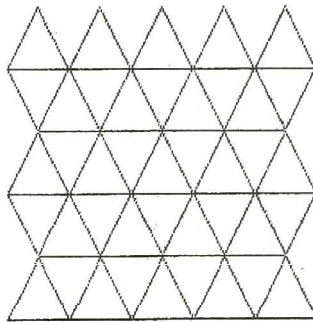


Рисунок 2 – Структура ВКА с треугольными ячейками

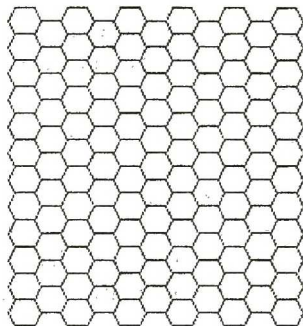


Рисунок 3 – Структура ВКА с шестиугольными ячейками

Состояния ячеек изменяются синхронно в соответствии с вероятностями реализации следующих элементарных поверхностных процессов:

- адсорбция;
- десорбция;
- поверхностная диффузия.

Адсорбция – процесс соударения газовой частицы с поверхностью твердого тела, сопровождающийся потерями энергии частицы за счет взаимодействия с фононами и приводящий к удерживанию частицы на поверхности за счет межмолекулярных сил. В качестве поверхности может выступать как поверхность адсорбента, так и поверхность предыдущих слоев адсорбированных частиц. Во втором случае можно элементарный процесс адсорбции аналогичен процессу конденсации.

Десорбция – процесс ухода адсорбированной частицы с поверхности твердого тела в газовую фазу, обусловленный локальной флуктуацией энергии адсорбированной частицы, обеспечивающей разрыв ее межмолекулярных связей с соседями.

Поверхностная диффузия – процесс перехода адсорбированной частицы из текущего поверхностного равновесного положения в соседнее, обусловленный локальной флуктуацией энергии частицы.

Процесс адсорбции может реализоваться только в пустой ячейке, в результате чего она будет содержать адсорбированную частицу. Процесс десорбции может реализоваться только в заполненных ячейках, в результате чего они становятся пустыми. Процесс поверхностной диффузии может протекать только в заполненной ячейке, по соседству с которой имеется хотя бы одна пустая, и заключается в перемещении частицы в соседнюю ячейку.

Временной шаг моделирования определяется периодом колебаний адсорбированных частиц в потенциальной яме на поверхности адсорбента и по порядку величины обычно составляет 10^{-10} - 10^{-13} с [3/].

Вероятность реализации адсорбционного процесса $w_{\text{адс}}$ в одной ячейке ВКА за один шаг определяется числом соударений частиц газа с поверхностью адсорбента /4/ и определяется выражением

$$w_{\text{адс}} = \gamma \tau d^2 p \sqrt{\frac{N_A}{2\pi k T_s M}}, \quad (1)$$

где p – давление адсорбируемого газа,
 M – молярная масса газа,
 T_s – температура газа,
 d – размер ячейки ВКА,
 τ – временной шаг ВКА,
 γ – коэффициент прилипания (адсорбции),
 k – постоянная Больцмана,
 N_A – число Авогадро.

Вероятность реализации процесса десорбции частицы из одной ячейки ВКА за один временной шаг определяется на основании принципов статистической физики и равна

$$w_{\text{дес}} = \exp\left(-\frac{\Delta E_{\text{дес}}}{k T_n}\right), \quad (2)$$

где $\Delta E_{\text{дес}}$ – энергия активации десорбции,
 T_n – температура поверхности адсорбента.

Для учета влияния соседних частиц на вероятность реализации десорбционного процесса энергия активации может быть представлена в виде суммы

$$\Delta E_{\text{дес}} = \Delta E_{\text{дес}0} + \sum_i \Delta E_{\text{дес}i}, \quad (3)$$

где $\Delta E_{\text{дес}0}$ – энергия активации десорбции при отсутствии соседей,
 $\Delta E_{\text{дес}i}$ – добавочная энергия активации, обусловленная взаимодействием с i -м соседом.

Вероятность частицы за один временной шаг ВКА перейти в одно из соседних положений за счет диффузионного процесса определяется выражением

$$w_{\text{диф}} = \exp\left(-\frac{\Delta E_{\text{диф}}}{k T_n}\right), \quad (4)$$

где $\Delta E_{\text{диф}}$ – энергия активации процесса диффузии.
 Энергия активации процесса диффузии так же, как и в случае десорбции, может быть представлена в виде суммы

$$\Delta E_{\text{диф}} = \Delta E_{\text{диф}0} + \sum_i \Delta E_{\text{диф}i}, \quad (5)$$

где $\Delta E_{\text{оиф}0}$ – энергия активации диффузии при отсутствии соседей,
 $\Delta E_{\text{оиф}i}$ – добавочная энергия активации, обусловленная взаимодействием с i -м соседом.

При этом для частицы вероятность покинуть свое текущее положение равна

$$w_{\text{оиф}} = (Z - R) \exp\left(-\frac{\Delta E_{\text{оиф}}}{kT_n}\right), \quad (6)$$

где Z – общее количество соседних положений (занятых и свободных),
 R – число соседних частиц.

Поверхностная диффузия может происходить только при наличии соседних вакансий. Частица, окруженная со всех сторон, не может двигаться до тех пор, пока не освободится хотя бы одно соседнее место.

На основании вышеизложенных принципов были разработаны программные продукты, реализующие метод ВКА. С помощью разработанного программного обеспечения проведены исследования кинетики протекания адсорбционно-десорбционных процессов при различных внешних условиях.

Целью первого эксперимента является исследование процессов образования адсорбционного монослоя на абсолютно чистой поверхности адсорбента. Локальные взаимодействия между адсорбированными частицами не учитываются, т.е.

$$\Delta E_{\text{dec}} = \Delta E_{\text{dec}0}. \quad (7)$$

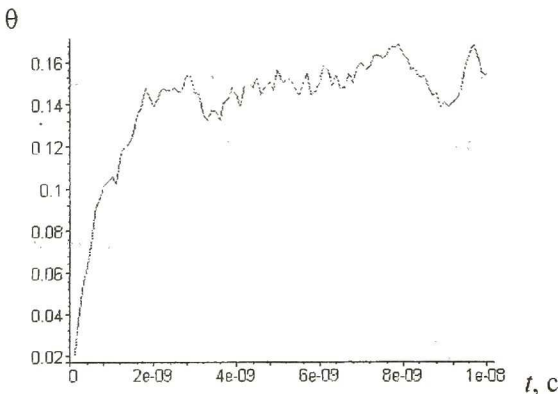


Рисунок 4 – Зависимость коэффициента заполнения поверхности от времени в процессе адсорбции при различных температурах поверхности
 $(p = 40 \text{ мм.рт.ст.}, \Delta E_{\text{dec}} = 0.15 \text{ эВ})$

На рисунке 4 представлены зависимости коэффициентов заполнения поверхности от времени при различных ее температурах.

Характерной особенностью полученных результатов моделирования является флуктуационный характер заполнения поверхности адсорбированными частицами.

На рисунке 5 представлено детальное распределение адсорбированных частиц на поверхности адсорбента через 0.005 с после начала процесса адсорбции.

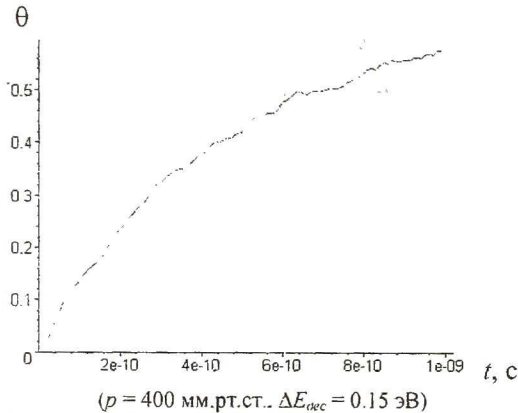
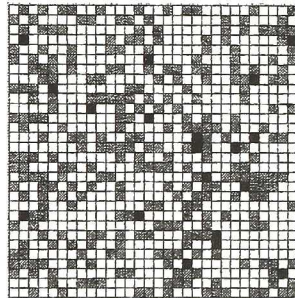


Рисунок 5 – Зависимость коэффициента заполнения поверхности от времени в процессе адсорбции при различных температурах поверхности



($p = 10^{-3}$ мм.рт.ст., $T = 450$ К, $\Delta E_{адс} = 1$ эВ).

□ – чистая поверхность;
 ■ – атом первого монослоя.

Рисунок 6 – Распределение адсорбированных частиц на поверхности твердого тела через 0.005 с после начала процесса

Полученные результаты моделирования свидетельствуют о широких возможностях метода ВКА при анализе адсорбционно-десорбционных процессов. Дальнейшим продолжением работы в части исследования мономолекулярной адсорбции является учет дополнительных элементарных физико-химических процессов, таких как объемная диффузия и поверхностные химические реакции.

Список использованных источников

1. Ванга В.К. Исследование пространственно распределенных динамических систем методом вероятностного клеточного автомата //УФН, 1999.—т.169.—№5.—с.481–505.
- 2: Лоскутов А.Ю., Михайлов А.С. Введение в синергетику.—М.:Наука, 1990.—272 с.
3. Грошковский Я. Техника высокого вакуума.—М.:Мир, 1975.—642 с.
4. Левич В.Г. Курс теоретической физики. т.1.—М.:Наука, 1969.—912 с.

ЭНТРОПИЙНЫЕ МОДЕЛИ МИКРОТЕХНОЛОГИЙ

Коньгин С.Б., Саноян А.Г.

Для современных интегральных схем характерна чрезвычайно высокая упорядоченность материальных сред, обеспечивающих функциональное качество устройств /1/. В практическом плане это обстоятельство приводит к необходимости развития технологической базы, способной реализовать элементы конструкций субмикронных размеров /2/. Достигнутые и перспективные уровни микроминиатюризации оперируют с физическими объемами менее 10^{-6} мкм³, что обуславливает проблематичность использования макроскопических подходов /3/ в конструкторско-технологической практике. В этой связи все большую роль приобретают вопросы обеспечения топологического и континуального порядка физических сред /4/, уровень проработки которых, как правило, недостаточен для практических целей. Состояние отмеченных выше моментов стимулирует развитие нетрадиционных моделей устройств микроэлектроники и микротехнологий, позволяющих объединить микро- и макроскопические подходы. Целью настоящей работы является разработка энтропийных моделей микротехнологий, основанных на базовых представлениях теории информации /5/, что обеспечило общность и универсальность конечных результатов, независимо от типа микроэлектронного устройства и микротехнологии его создания.

Пусть имеется некоторый объем физического пространства V , в пределах которого необходимо реализовать техническое устройство. Указанный объем представляется в виде совокупности упорядоченных ячеек размещения индивидуальных атомов. Имеется также рабочая среда, содержащая $(m+1)$ типов атомов, как необходимых для создания устройства, так и примесной природы.

Процесс изготовления устройства состоит в размещении определенных типов атомов в ячейках размещения объема V . Результат размещения атомов считается удачным, если он обеспечивает появление необходимого функционального качества устройства. В принятой постановке под технологией следует понимать комплекс мер, направленных на повышение вероятности размещения необходимых типов атомов в определенных ячейках размещения объема V . Очевидно, что факту отсутствия