

## CAD THIN-FILM ELECTROLUMINESCENT INDICATORS

D. Evsevichev, O. Maksimova

*The Ulyanovsk State Technical University  
32, Sev. Venec st., Ulyanovsk, 432027, Russia, 432027*

*Abstract.* Comparative analysis of modern means of information display was made. The structures full-color and monochrome thin-film electroluminescent indicator elements were presented. Functional characteristics necessary to describe the modes of thin-film electroluminescent display facilities were determined.

*Keywords:* Thin-film indicator, automation, brightness, light efficiency, electroluminescence, algorithms, programs, full-color indicator, thin films.

УДК 533.15

## ФОРМИРОВАНИЕ ПРИСТЕНОЧНОГО СЛОЯ ИЗ МОЛЕКУЛ ГАЗА В УЗКОМ КАНАЛЕ ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ФОРМЫ ПРИ УСЛОВИИ ПРИЛИПАНИЯ МОЛЕКУЛ НА ПОВЕРХНОСТЬ

А.А. Титов

*Московский физико-технический институт (Государственный университет)  
141700, Московская обл., г. Доломитовый, Институтский переулок, 9*

*Аннотация:* В статье рассмотрено формирование пристеночного слоя из молекул газа внутри узкого прямоугольного канала. Предполагалось, что молекулы газа прилипают к поверхности или к уже налипшим слоям с некоторым коэффициентом прилипания. Нарастание пристеночного слоя пропорционально количеству прилипших молекул. Количество прилипших молекул найдено методами Монте-Карло. Построена поверхность в момент закрытия канала, найдены автомодельные переменные и формулы, по которым поверхность можно аппроксимировать.

*Ключевые слова:* пристеночный слой из молекул газа, прямоугольный канал, налипшие слои, коэффициент прилипания, нарастание пристеночного слоя, методы Монте-Карло, поверхность в момент закрытия канала.

### Введение

Течение газа в узких капиллярах и порах достаточно хорошо исследовано многими авторами на примерах каналов с простой геометрией, таких как щели и трубки. Введены различные теоретические методики, проведены численные расчеты и эксперименты в большом диапазоне чисел Кнудсена. На поверхности материала обычно берется условие непротекания. Однако если предположить, что молекулы газа будут абсорбироваться на поверхность, то внутри щелей и капилляров будут образовываться слои из молекул газа, что конечно будет влиять на поведение газа. Если дано пористое вещество, или материал с маленькими дырками, через которое будет пропускаться газ, то

поры могут забиваться пылью. Например, проводились опыты по откачиванию пограничного слоя через очень маленькие отверстия на крыле, которые были удачными в аэродинамической трубе, но в реальных условиях из-за пыли поры быстро забивались. Однако этот эффект можно использовать для заделки узких глубоких трещин в каком-нибудь материале. Вполне вероятно, для этого лучше подходят наножидкости, в которых дисперсным компонентом является некоторый «клей». Если этим клеем заполнить трещины в материале, то это скажется на его свойствах, что открывает новые возможности для создания композитных материалов. Так же может представлять интерес задача о напылении газа на поверхность с нано-щелями и определении, к примеру, на какую глубину заделается нано-щель.

В общем случае поставить и решить любую и вышеперечисленных задач достаточно сложно, поэтому целесообразно рассмотреть самый простейший случай – налипание молекул разреженного газа на внутреннюю поверхность прямоугольного канала.

### Постановка задачи для прямоугольной щели

Рассмотрим канал прямоугольного сечения с геометрией на рис. 1.

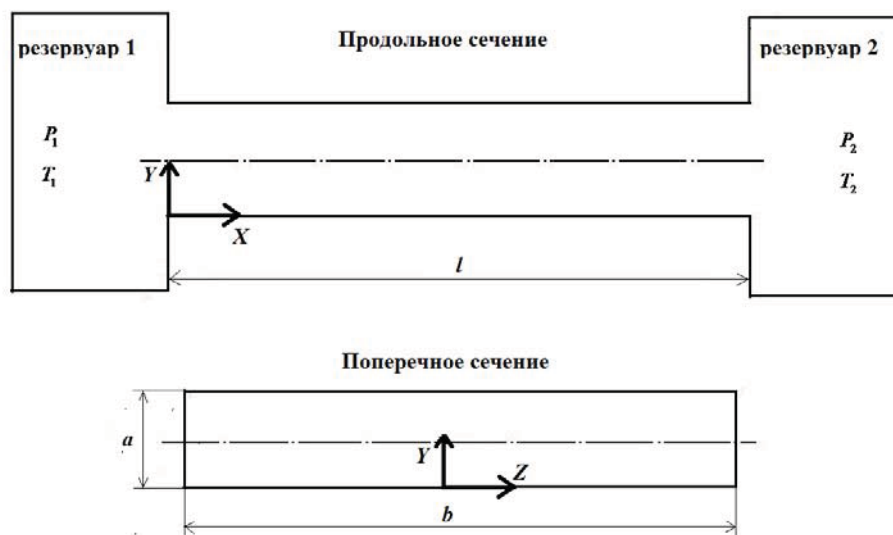


Рис 1

Размеры резервуаров с газом много больше размеров  $l$  и  $a$ . Принимаем и  $b = \infty$  что переводит задачу в двумерный случай. Давления и температуры в резервуарах взяты таким образом, что длина свободного пробега молекул в резервуарах была много больше  $l$  и  $a$ . Молекулы газа в резервуарах имеют распределение скоростей по Максвеллу. Температура внутренней стенки канала  $T_w$ . Молекулы от стенки отражаются диффузно без зеркального отражения. Потoki  $N_1$  и  $N_2$  из резервуаров 1 и 2 через границу канала можно вычислить по формулам:

$$N_1 = \frac{P_1}{\sqrt{2\pi k_B T_1 m}}, \quad N_2 = \frac{P_2}{\sqrt{2\pi k_B T_2 m}},$$

где  $m$  - масса молекулы,  $k_B$  - постоянная Больцмана[1;2;3].

Распределение Максвелла отраженных молекул по скоростям хорошо описывает массовый поток в изотермическом режиме, поэтому примем  $T_1 = T_2 = T_w$ .

Предположим, что при попадании молекулы на стенку канала молекула прилипает с вероятностью  $k_s$ . Предположим, что  $k_s$  не зависит или слабо зависит от энергии падающих молекул, от угла падения, от температуры стенки, так что ее можно принять постоянной по всей поверхности материала. Так же предположим, что вероятность прилипания молекулы на уже налипшие слои так же равна  $k_s$ .

Введем функции  $S_1(x, t): x \in [0, 1], t \in [0, t_1]$  (рис.2) и  $S_2(x, t): x \in [0, 1], t \in [0, t_1]$ , которые обозначают нижнюю и верхнюю поверхность внутри щели в момент времени  $t$ , причем время  $t_1$  - время, за которое нижняя и верхняя поверхности соприкоснутся хотя бы в одной точке. Предполагаем, что слои молекул, налипших снаружи, слабо влияют на формирование поверхности внутри канала. Так как задача симметрична относительно плоскости  $y = \frac{a}{2}$  (рис 2), то  $S_2(x, t) = a - S_1(x, t)$ .



Рис 2.

Так как поверхность нарастает только от прилипших молекул, то можно считать, что приращение поверхности пропорционально количеству прилипших молекул и поверхность увеличивается вдоль нормали, т.е.  $S_1^{(0,1)}(x, t)$  будет

$$S_1^{(0,1)}(x, t) = Ak_s N(x, S_1(x, t), t) \frac{1}{\sqrt{1 + S_1^{(1,0)}(x, t)^2}}, \quad (3)$$

где  $\frac{1}{\sqrt{1 + S_1^{(1,0)}(x, t)^2}}$  является проекцией нормали к поверхности  $S_1(x, t)$  на ось  $Y$  (нормаль направлена в сторону газа),  $A$  – коэффициент пропорциональности (его можно экспериментально найти по толщине налипшей пленки за определенное время, если, например, поместить пластинку из материала канала в резервуар с данным газом с известными параметрами),  $N(x, S_1(x, t), t)$  – поток падающих молекул в точке на нижней поверхности. Предположим, что  $A$  постоянен на всей поверхности и не зависит от её кривизны.

Так как газ разряжен, то слои будут нарастать очень медленно, поэтому поток  $N(x, S_1(x, t), t)$  можно рассматривать уже устоявшимся в момент времени  $t$ , то есть  $N(x, S_1(x, t), t) = N(x, S_1(x, t))$ . С учетом этого уравнение (3) можно преобразовать:

$$S_1^{(0,1)}(x, t) = Ak_s N(x, S_1(x, t)) \frac{1}{\sqrt{1 + S_1^{(1,0)}(x, t)^2}}. \quad (4)$$

Уравнение (4) можно решать численно. Поток  $N(x, S_1(x, t))$  находится методом пробной частицы Монте-Карло[3] с условием прилипания на поверхность. Поверхность интерполируется кусочно-линейной функцией. После расчета  $N(x, S_1(x, t))$  находится приращение  $S_1^{(0,1)}(x, t)$  к поверхности, и строится новая поверхность. Это процесс повторяется до момента времени  $t_1$ , когда поверхности перекроют канал.

#### Нахождение поверхности в случае одинакового потока из резервуаров 1 и 2.

Рассмотрим случай  $N_1 = N_2$ . Поверхность в момент времени  $t_1$  будет зависеть только от геометрии канала и коэффициента прилипания. Из численного решения уравнения (4) были получены автомодельные переменные для результирующей поверхности:

$$x_1 = \frac{x}{l}, \quad (5)$$

$$\xi = k_s \left( \frac{l}{a} \right)^2. \quad (6)$$

Так же в этом случае было найдено выражение для результирующей поверхности на всем диапазоне переменных (5) и (6):

$$S_1(x_1, \xi) \approx 0.5a \frac{e^{-B(\xi)x_1^{0.6}} + e^{-B(\xi)(1-x_1)^{0.6}}}{1 + e^{-B(\xi)}}, \quad (7)$$

$$S_2(x_1, \xi) \approx a - S_1(x_1, \xi), \quad (8)$$

где  $S_1(x_1, \xi)$  и  $S_2(x_1, \xi)$  - поверхности, образовавшиеся внутри канала в момент времени  $t_0$ .  $B(\xi)$  находится численно. Ее можно аппроксимировать следующим образом:

$$B(\xi) \approx \sqrt{2}\xi^{0.3}, \xi \in (0, \infty). \quad (9)$$

На рис. 3 показан численный результат и аппроксимация (7)  $S_1(x_1, \xi)$  при различных значениях  $\xi$ . На рис. 4 показана функция  $B(\xi)$  и аппроксимация (9).

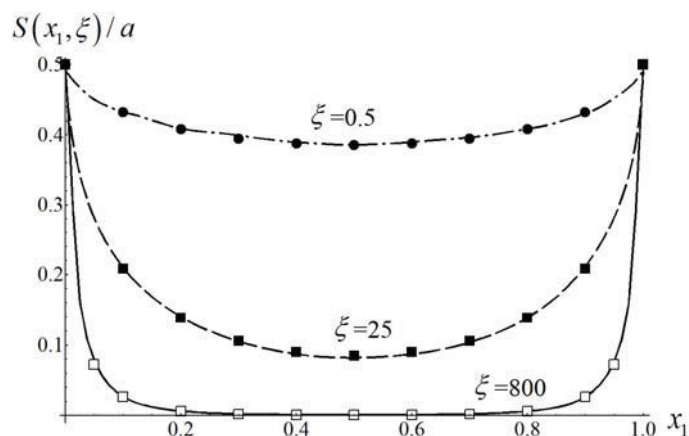


Рис. 3.

Сплошная линия – расчетная поверхность, точки – формула (7)

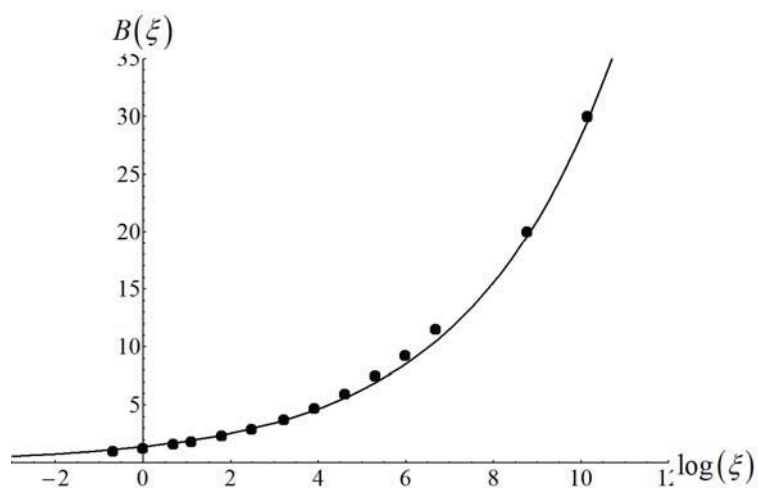


Рис. 4.

Черные точки - значения функции  $B(\xi)$ ,  
сплошная линия – аппроксимация (9)

### Аппроксимация в случае разных потоков из резервуаров 1 и 2.

В случае  $N_1 \neq N_2$ ,  $t_1 \leq t_2$  поверхность можно аппроксимировать по формуле:

$$S_1(x_1, \xi, t) \approx 0.5a \left( c_1 e^{-B(\xi)g_1(x_1)^{0.6}} + c_2 e^{-B(\xi)(1-g_2(x_1))^{0.6}} \right), \quad (10)$$

$$S_2(x_1, \xi) \approx a - S_1(x_1, \xi), \quad (11)$$

где  $g_1(x_1) = d_1(x_1 - 0.5) + 0.5$ ,  $g_2(x_1) = d_2(x_1 - 0.5) + 0.5$ ;

$d_1 = d_1(\xi, N_1, N_2, t)$ ,  $d_2 = d_2(\xi, N_1, N_2, t)$ ,  $c_1 = c_1(\xi, N_1, N_2, t)$  и  $c_2 = c_2(\xi, N_1, N_2, t)$  - коэффициенты, которые могут быть подобраны по результатам численного решения

или эксперимента. Переменные (5) и (6) так же автомодельны для этого случая, а  $B(\xi)$  та же самая функция, что и в формуле (7).

Для примера рассмотрим задачу при  $N_2 = 0.5N_1$  в момент времени  $t_1$ . Из значений функции  $S_1(0, \xi, t_1)$  и  $S_1(1, \xi, t_1)$  на границе с резервуаром можно найти  $c_1$  и  $c_2$ . Значения  $d_1$  и  $d_2$  можно подобрать или оценить из значений  $S_1^{(1,0,0)}(0, \xi, t_0)$  и  $S_1^{(1,0,0)}(1, \xi, t_0)$ .

На рис.5 показан численный результат и аппроксимация (10) для  $S_1(x_1, \xi)$  при различных значениях  $\xi$  и при  $N_1 \neq N_2, t_1 = t_2$ .

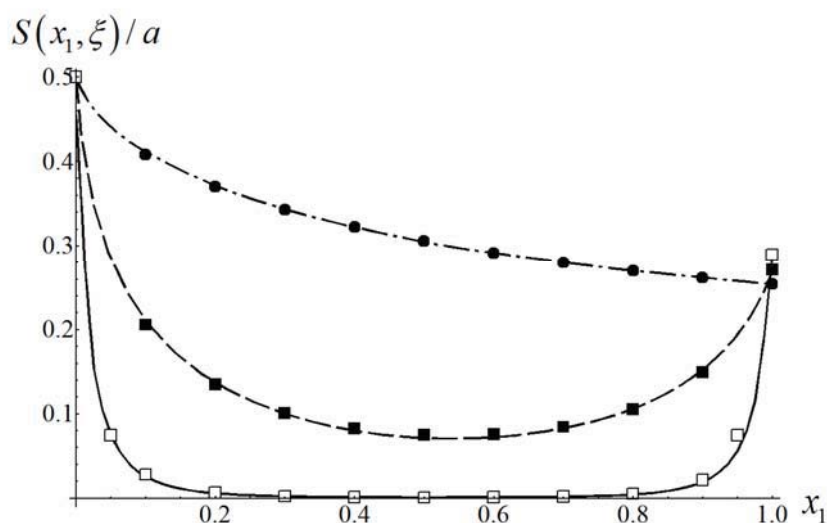


Рис. 5.

Сплошная линия – расчетная поверхность, точки – формула (10).

### Выводы

Получен результат, который описывает наружный слой из молекул газа внутри длинной узкой щели в случае разреженного газа, при условии прилипания молекул газа на поверхность, диффузного рассеяния от стенок неприлипших молекул, отсутствия заметного влияния концов щели.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. – М., 1967 г. – 440с.
2. Кошмаров Ю.А., Рыжов Ю.А. Прикладная динамика разреженного газа. – М: Машиностроение, 1977. – 184 с.
3. Шарипов Ф.М. Движение разреженных газов в каналах и микроканалах: монография/Ф.М.Шарипов, В.Д. Селезнев-Екатеринбург: УрО РАН, 2008 (Екатеринбург). – 231с.

**THE FORMATION OF THE BOUNDARY LAYER OF GAS MOLECULES  
IN A NARROW RECTANGULAR CHANNEL,  
PROVIDED ADHESION MOLECULES ON THE SURFACE**

**A. Titov**

*Moscow Institute of Physics and Technology (State University)  
9, Institutsky pereulok, Dolgoprudny, Moscow Region, 141700, Russia*

*Abstract:* In the paper considered is the formation of the boundary layer of gas molecules inside a narrow rectangular channel. As assumed the gas molecules stick to the surface or to the build-up layers with a sticking coefficient. The growth of the boundary layer is proportional to the number of the trapped molecules which is found by Monte Carlo methods. The surface at the closure of the channel is constructed, self-similar variables and formulas by which the surface can be approximated are found.

*Keywords:* boundary layer of gas molecules, rectangular channel, build-up layers, sticking coefficient, growth of the boundary layer Monte Carlo methods, surface at the closure of the channel.

УДК 530.1

**ИЗМЕНЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ГАЗОВ  
ПРИ ОБРАЗОВАНИИ В НИХ ПРОСТЕЙШИХ КЛАСТЕРОВ**

**А.В. Гелиев**

*Центральный аэрогидродинамический институт имени профессора Н.Е. Жуковского,  
Московский физико-технический институт  
141700, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский переулок, 9*

*Аннотация.* Основываясь на ab-initio методах квантовой химии, изучаются физико-химические свойства простейших ван-дер-ваальсовых кластеров азота, метана и углекислого газа. Рассчитываются структуры и энергетические характеристики димеров (кластеров, содержащих две молекулы): энергии диссоциации, вращательные постоянные, частоты межмолекулярных колебаний. По данным расчётов определяются суммы по квантовым состояниям различных видов движений, константы равновесия реакций образования димеров. Используя константы равновесия реакций, на основе предложенной газокинетической кластерной модели определяются мольные доли димеров газов, показывается существенное влияние димеров на теплоёмкость газообразного азота, метана и углекислого газа.

*Ключевые слова:* кластер, димер, ассоциаты, константа равновесия, квазихимическая кластерная модель, молекулярная орбиталь, гамильтониан, уравнение Шрёдингера.

Употребление термина "кластер" в современной научной литературе становится все более частым. В работе речь пойдет об ассоциатах, состоящих из двух молекул, которые могут существовать в газовой фазе и которые принято называть ван-дер-ваальсовыми кластерами. Часто под ван-дер-ваальсовыми силами подразумевают силы