

**ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ АЭРОКОСМИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ имени академика С.П. КОРОЛЁВА»**

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ
ОДНОКОМПОНЕНТНОЙ МОНОСЛОЙНОЙ
АДСОРБЦИИ И ДЕСОРБЦИИ
МЕТОДОМ ВЕРОЯТНОСТНОГО
КЛЕТОЧНОГО АВТОМАТА (ВКА)**

САМАРА 2007

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО ПО ОБРАЗОВАНИЮ
ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САМАРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ АЭРОКОСМИЧЕСКИЙ
УНИВЕРСИТЕТ имени академика С.П.КОРОЛЁВА»

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ
ОДНОКОМПОНЕНТНОЙ МОНОСЛОЙНОЙ
АДСОРБЦИИ И ДЕСОРБЦИИ
МЕТОДОМ ВЕРОЯТНОСТНОГО
КЛЕТОЧНОГО АВТОМАТА (ВКА)

*Утверждено Редакционно-издательским советом университета
в качестве методических указаний*

САМАРА
Издательство СГАУ
2007

УДК 621.382.049.77

ББК 32.744.1

Рецензент канд. техн. наук, доц. А. Г. С а н о я н

Составитель *А.Н. Агафонов*

Моделирование процессов однокомпонентной монослойной адсорбции и десорбции методом вероятностного клеточного автомата (ВКА): метод. указания к лаб. работе / сост. А.Н. Агафонов. – Самара: Изд-во Самар. гос. аэрокосм. ун-та, 2007. – 32 с.

Методические указания предназначены для ознакомления студентов с принципами моделирования технологических процессов, основанных на физической адсорбции, на примере метода вероятностного клеточного автомата.

Рекомендуются студентам специальности 210201 при изучении дисциплин микроэлектронного цикла и, в частности, для изучения предмета «Моделирование технологических процессов».

© Самарский государственный
аэрокосмический университет, 2007

Содержание

Моделирование процессов однокомпонентной монослойной адсорбции и десорбции методом вероятностного клеточного автомата (ВКА).....	1
Цель работы.....	4
Задания.....	4
Теоретические основы работы. Краткие теоретические сведения об адсорбционных процессах.....	4
Классический метод описания адсорбционных процессов.....	7
Краткие сведения о методе вероятностного клеточного автомата (ВКА)....	10
Применение метода ВКА при моделировании процессов физической адсорбции и десорбции.....	12
Методика нахождения времени установления адсорбционного равновесия.....	20
Описание программного продукта.....	21
Вид главного окна. Управление программой.....	21
Назначение кнопок.....	21
Окно настроек.....	22
Файлы.....	23
Пример использования программы.....	23
Порядок выполнения лабораторной работы.....	25
Подготовка к лабораторной работе.....	25
Оформление отчета о лабораторной работе.....	29
Библиографический список.....	30

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ОДНОКОМПОНЕНТНОЙ
МОНОСЛОЙНОЙ АДСОРБЦИИ И ДЕСОРБЦИИ
МЕТОДОМ ВЕРОЯТНОСТНОГО КЛЕТОЧНОГО АВТОМАТА (ВКА)**

Цель работы: изучение механизмов физической адсорбции и десорбции, ознакомление с методами их моделирования и обработки полученной в результате моделирования информации.

Задания:

1. Изучить физические основы адсорбционных процессов.
2. Изучить используемую модель ВКА.
3. Исследовать установление адсорбционного равновесия.
4. По результатам моделирования построить изотермы адсорбции.
5. Научиться создавать модели адсорбционных процессов на основе ВКА.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ РАБОТЫ:

Краткие теоретические сведения об адсорбционных процессах

Термин адсорбция (от лат. слов “ad” – «на» и ”sorbeo” – «поглощаю») имеет в настоящее время три значения: само явление поглощения вещества поверхностью, процесс этого поглощения и, наконец, количество поглощенного вещества. Поглощение вещества может происходить как из газа, так и из жидких растворов, причем как поверхностью твердых тел, так и жидкостей. Если поглощение газа (адсорбата) идет только поверхностью твердых тел, то последние называют адсорбентами, а процесс - адсорбцией. Если поглощение осуществляется также и объемом твердого тела, то процесс называется абсорбцией. Тогда для смешанного процесса употребляют более общий термин сорбция. Процесс адсорбции и обратный ему процесс десорбции схематично изображены на рис. 1. В зависимости от природы сил, которые предположительно действуют между адсорбированной моле-

4

кулой и поверхностью твердого тела, различают физическую и химическую адсорбцию (хемосорбцию).

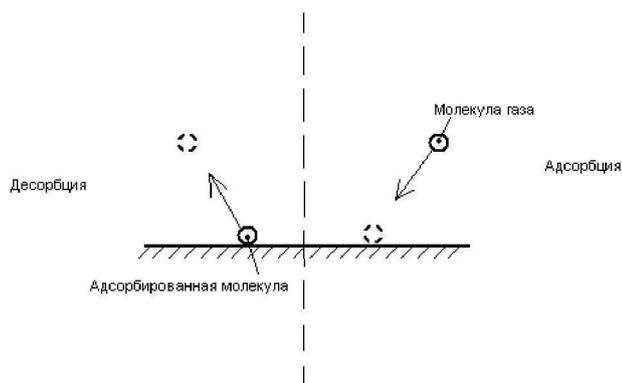


Рис. 1 - Схема процессов адсорбции и десорбции

В дальнейшем будем рассматривать упрощенную модель взаимодействия газа с плоской поверхностью твердого тела, причем молекулы могут осаждаться только в один слой (монослойная адсорбция).

Когда чистая поверхность твердого тела входит в контакт с газом, начинается процесс адсорбции, который продолжается до тех пор, пока не наступит адсорбционное равновесие, которое носит динамический характер, поскольку наряду с адсорбцией по мере заполнения поверхности адсорбентом все более интенсивно происходит десорбция (обратный процесс). Установление динамического равновесия между процессами адсорбции и десорбции характеризуется тем, что в течение достаточно больших промежутков времени число частиц газа на поверхности адсорбента остается приблизительно одинаковым.

Рассмотрим более подробно разницу между химической и физической адсорбцией с энергетической точки зрения. Зависимость энергии адсорбционной системы от расстояния между адсорбированной частицей и по-

верхностью адсорбента. Кривая A , соответствующая физической адсорбции, имеет неглубокий минимум довольно далеко от поверхности, соответствующий теплоте физической адсорбции. Кривая B характеризуется значительно большей теплотой адсорбции Q , характерной для химической адсорбции.

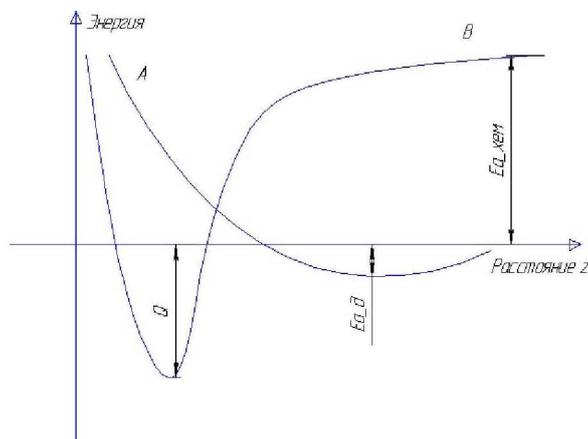


Рис. 2 – Зависимость энергии системы от расстояния между адсорбатом и поверхностью.

A – физическая адсорбция, B – хемосорбция

В лабораторной работе рассмотрен случай физической адсорбции, следовательно, энергия активации процесса адсорбции (E_{a_a}) может быть принята равной нулю. Энергия активации процесса десорбции (E_{a_d}) равна теплоте адсорбции.

КЛАССИЧЕСКИЙ МЕТОД ОПИСАНИЯ АДСОРБЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ

Существуют классические методы описания как монослойных (модель Ленгмюра), так и многослойных адсорбционных процессов (модель Брунауэра – Эммета – Теллера (БЭТ)). Рассмотрим более подробно эти модели.

Для зависимости количества адсорбированного на твердом теле вещества от давления получается простое уравнение, если для скорости адсорбции воспользоваться приближенным выражением:

$$\frac{d}{dt} \Gamma = k_2 (\Gamma_t - \Gamma) p - k_1 \Gamma, \quad (1)$$

где Γ – концентрация адсорбата на единицу поверхности,

Γ_t – полная концентрация адсорбционных центров,

p – давление газа,

k_1 – константа скорости десорбции,

k_2 – константа скорости адсорбции.

Первый член в правой части описывает скорость адсорбции, которая принимается пропорциональной давлению и числу незанятых адсорбционных центров. Второй член есть скорость десорбции, которая пропорциональна заполнению поверхности Γ . При этом предполагается однородность поверхности, то есть все центры считаются одинаковыми. В реальности, константы скорости k_1 и k_2 обычно зависят от относительной плотности покрытия поверхности (коэффициента заполнения):

$$\Theta = \frac{\Gamma}{\Gamma_t}, \quad (2)$$

В случае физической адсорбции, предположение о независимости констант скорости k_1 и k_2 от Θ часто оказывается приемлемым при количестве адсорбированного вещества менее одного монослоя. Решая уравнение (1), для стационарного случая, получаем:

$$\Gamma = \Gamma_t \frac{P}{(p + b^{-1})}, \quad (3)$$

где

$$b = \frac{k_2}{k_1}.$$

Это уравнение называют уравнением изотермы Ленгмюра. При достаточно низком давлении уравнение изотермы Ленгмюра переходит в «закон Генри»:

$$\Gamma = \Gamma_t pb. \quad (4)$$

Согласно которому количество адсорбированного вещества прямо пропорционально давлению.

Особенно важную роль в теории физической адсорбции играет адсорбционная изотерма (БЭТ). При ее выводе предполагается, что постоянная скорости десорбции k_1 не изменяется для молекул газа, адсорбированных на чистой поверхности, но принимает иные значения для любых молекул газа, адсорбирующихся поверх первого слоя.

Модель БЭТ основана на предположении, что адсорбированные частицы взаимодействуют между собой только «по вертикали», т.е. не учитывается влияние частиц в том же слое, что и рассматриваемая, что является ее существенным недостатком.

В настоящее время выделяют пять основных типов изотерм физической адсорбции, наблюдаемых в экспериментах. Их внешний вид приведен на рис. 3.

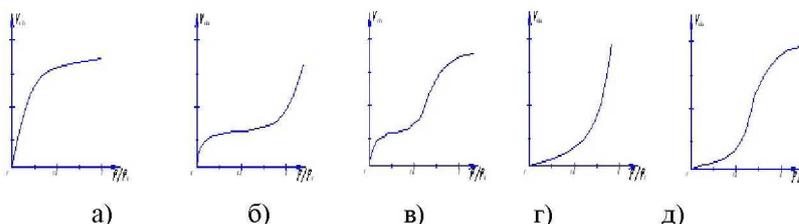


Рис. 3 – Внешний вид изотерм физической адсорбции:
 а - I тип, б - II тип, в - III тип, г - IV тип, д - V тип

Рассмотрим более подробно представленные на рис. 1 изотермы адсорбции. Первый тип – классическая «ленгмюровская» изотерма, соответствует случаю монослойной адсорбции. Сильное взаимодействие между первым слоем адсорбированного вещества и поверхностью адсорбента, во втором слое скорость V_d десорбции значительно больше скорости адсорбции V_a . Рассматривая этот тип изотерм с термоактивационных позиций, можно сказать, что в первом слое энергия активации десорбции W_d превышает энергию активации процесса адсорбции W_a , в то время как во втором и последующих слоях наоборот, $W_d < W_a$.

Второй тип – соответствует случаю, когда заполнение первого слоя идет по изотерме Ленгмюра, а заполнение последующих переходит в неограниченную конденсацию. Таким образом, существует некоторый диапазон значений давления, при котором устанавливается динамическое равновесие при заполненном монослое. При значениях давлений больше некоторого

$P_{кр}$, процесс переходит в конденсацию, а при значениях меньше $P_{кр}$ – идет согласно изотерме Ленгмюра. С энергетической точки зрения это означает, что имеет место существенный порог энергии активации процесса адсорбции и/или десорбции на границе первого слоя, т.е. последующие слои не заполняются, пока полностью не заполнится первый, а после заполнения первого идет процесс неограниченной конденсации. Третий тип – случай ограниченной адсорбции с двумя пороговыми значениями уровней заполнения. Четвертый тип – неограниченная адсорбция (нет предельных уровней заполнения). Пятый тип – ограниченная адсорбция (один предельный уровень заполнения).

Модель БЭТ позволяет описать только изотермы: I-го, II-го, IV-го типов. Рассмотренный в работе метод ВКА принципиально позволяет описать все представленные типы изотерм.

КРАТКИЕ СВЕДЕНИЯ О МЕТОДЕ ВЕРОЯТНОСТНОГО КЛЕТОЧНОГО АВТОМАТА (ВКА)

Клеточный автомат состоит из набора объектов (ячеек), обычно образующих регулярную решетку. Состояние отдельно взятого i -го объекта (или ячейки) в момент времени n характеризуется некоторой переменной a_i^n , которая может быть целым, действительным или комплексным числом, либо представлять собой набор из нескольких чисел. Рассматриваемые состояния ячеек изменяются синхронным образом через дискретные интервалы времени в соответствии с локальными вероятностными правилами, которые могут зависеть от состояния переменных в ближайших соседних узлах. Эти правила считаются известными и не меняются со временем.

При моделировании методом ВКА, рассматриваемая система разбивается на ячейки, осуществляется их последовательный просмотр и изменение их состояния согласно заданным локальным правилам, причем в случае ВКА изменение состояния ячейки носит вероятностный характер. Для того чтобы избежать влияния уже просмотренных и возможно уже сменивших свое состояние ячеек на еще не просмотренные, все ячейки меняют свое состояние ОДНОВРЕМЕННО, при окончании сканирования решетки. При смене всеми ячейками системы своего состояния, система делает один шаг. После этого операция просмотра клеток и смены их состояния повторяется, то есть совершается следующий шаг.

Если сравнивать моделирование с помощью клеточных автоматов и обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), то одно из основных отличий первых от вторых заключается в локальности правил, с помощью которых описывается динамика системы. В случае применения ОДУ мы пользуемся некоторыми правилами изменения усредненных по всей системе величин (например, концентраций). При этом изначально полагают, что такие правила существуют. В случае КА существование таких обобщенных правил необязательно. Достаточно знать законы развития системы на микро- или мезоуровне в небольших пространственных областях (ячейках), из которых состоит макросистема. Важно лишь, что эти локальные правила одинаковы для всех ячеек. Другим отличием КА от дифференциальных уравнений (ДУ) является использование не только дискретных, но и, как правило, целочисленных переменных. Дискретность переменных позволяет рассматривать большой класс разрывных недифференцируемых функций. Следует отметить, что дискретные свойства КА заметно уменьшаются при работе с большими значениями переменных, но никогда не исчезают. Всегда существует минимальный дискретный шаг изменения переменной. В

случае же численного решения ОДУ или ДУ в частных производных можно уменьшать шаг дискретности до сколь угодно малых величин.

Локальность правил поведения и дискретность переменных позволяют естественным образом учитывать флуктуации или внутренние шумы системы без каких-либо дополнительных предположений. Для учета флуктуаций в случае применения ДУ используются стохастические ДУ, для решения которых необходимо привлекать различные флуктуационно-диссипативные соотношения. Во многих случаях вывод таких соотношений является весьма трудоемкой задачей.

Совокупность таких свойств, как локальность правил поведения и дискретность переменных порождает порой совершенно непредсказуемое поведение распределенной дискретной системы. Непредсказуемость поведения является еще одной отличительной чертой КА и в данном контексте носит скорее качественный характер.

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА ВКА ПРИ МОДЕЛИРОВАНИИ ПРОЦЕССОВ ФИЗИЧЕСКОЙ АДСОРБЦИИ И ДЕСОРБЦИИ

Краткое описание моделируемой системы

Будем рассматривать моделирование следующей адсорбционной системы:

1. Адсорбция идет только в первый слой (монослойная адсорбция).
2. В начальный момент времени поверхность чистая.
3. Поверхность атомарно гладкая, т.е. на ней отсутствуют структурные дефекты, и рельеф поверхности представляет собой ровную площадку.
4. Отсутствует взаимодействие между адсорбированными частицами, т.е. коэффициент заполнения поверхности не оказывает влияния на энергию активации процессов адсорбции и десорбции.

5. Рассматриваем физическую адсорбцию, т.е. энергия активации процесса адсорбции равна нулю.

6. Для простоты рассмотрения примем модель идеального газа для расчета потока частиц, падающего на поверхность.

Таким образом, рассматриваемая система полностью соответствует случаю, описываемому классической изотермой Ленгмюра.

Структура ВКА

В данной работе рассматривается моделирование процессов физической адсорбции и десорбции с использованием метода ВКА. Реализована модель, содержащая ВКА размером 25x25 клеток (ячеек), которые моделируют отдельные адсорбированные атомы (молекулы) на поверхности.

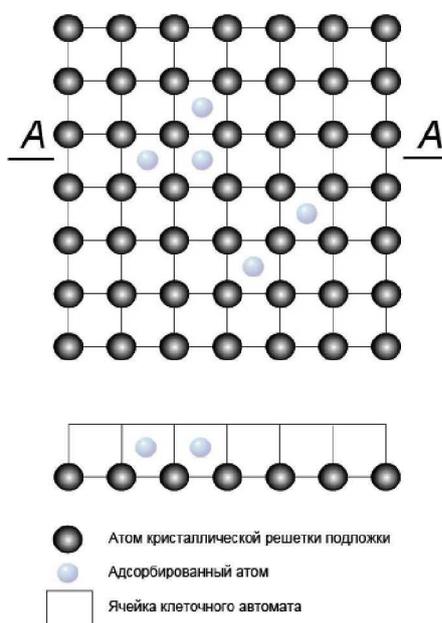


Рис. 4 – Графическая схема примененного ВКА

При разработке системы для каждой ячейки ВКА хранятся такие параметры как ее состояние (занята или свободна) и вероятности процессов, которые могут в ней пройти. Все остальные параметры системы, такие как температуры газовой смеси и подложки, начальные значения энергий активации и т.д. характеризуют всю систему в целом и считаются одинаковыми для всех клеток. Такое разделение позволяет наиболее эффективно использовать память компьютера, не храня значения перечисленных параметров в каждой ячейке отдельно.

Методика моделирования

Само моделирование осуществляется следующим образом: изначально все ячейки считаются пустыми, вероятности возможных процессов – равными начальным, а невозможных (десорбция) – равными нулю. Потом происходит последовательное обращение к ячейкам матрицы и определяется, пойдет тот или иной процесс или нет. В случае если процесс идет, состояние соответствующей ячейки в матрицы изменяется на новое.

Схема алгоритма, реализующего моделирование элементарных адсорбционных процессов, приведена на рис. 5. Последовательность выполняемых блоком действий имеет следующий вид:

- 1) после вызова вычислительного блока «Адсорбция» определяется, имеется ли в текущей ячейке атом или нет;
- 2) если ячейка пуста, то определяется вероятность адсорбции W_a ;
- 3) генерируется случайное число Q_1 в диапазоне от 0 до 1, которое определяет, может ли реализоваться адсорбционный процесс на данном шаге;
- 4) сравниваются числа Q_1 и W_a ;

5) если $Q_1 \geq W_a$, то адсорбционный процесс не реализуется, и происходит выход из блока

6) если $Q_1 < W_a$, то десорбционный процесс реализуется;

7) в текущую ячейку помещается адсорбированный атом, и происходит выход из блока;

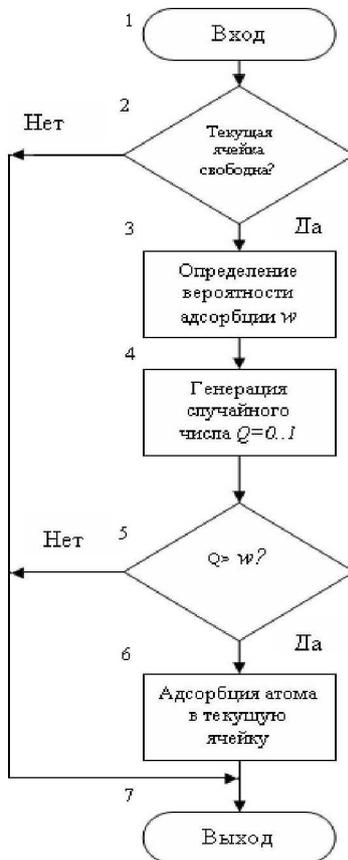


Рис. 5 – Схема алгоритма моделирования процесса физической адсорбции

Схема алгоритма, реализующего моделирование десорбционных процессов, приведена на рис. 6. Последовательность выполняемых блоком действий имеет следующий вид:

- 1) после передачи управления блоку «Десорбция» (символ 1) определяется, имеется ли в ячейке атом или нет (символ 2);
- 2) если ячейка пуста, то происходит выход из блока (символ 7);
- 3) если в ячейке имеется атом, то в зависимости от количества и типа соседей определяется вероятность десорбции (символ 3);
- 4) генерируется случайное число Q в диапазоне от 0 до 1, которое определяет, может ли реализоваться десорбционный процесс на данном шаге (символ 4);
- 5) сравниваются числа Q и W (символ 5);
- 6) если $Q \geq W$, то десорбционный процесс не реализуется, и происходит выход из блока (символ 7);
- 7) если $Q < W$, то десорбционный процесс реализуется;
- 8) из текущей ячейки удаляется атом (символ 6);
- 9) происходит выход из блока (символ 7).

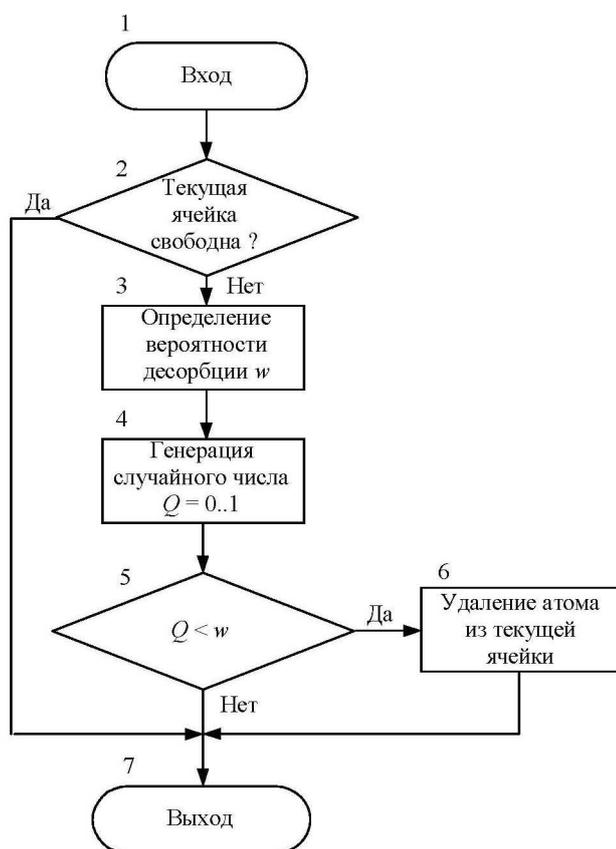


Рис. 6 – Схема алгоритма моделирования процесса десорбции

В результате совершения системой одного шага получаем новый вид поверхности тела. При совершении системой заданного числа шагов наблюдаем ее эволюцию во времени.

Временной шаг

Временной шаг выбирается равным времени колебания атома кристаллической решетки подложки (порядка 1 пс.). Это связано с тем, что эле-

ментарные акты адсорбции и десорбции происходят в результате создания необходимых энергетических условий возникающих при этих колебаниях. Таким образом, время шага, меньшее чем период колебаний атома решетки, теряет смысл.

Методика расчета вероятностей

Будем считать, что все возможные в системе процессы идут только тогда, когда энергия участвующих в них частиц превысит некоторое критическое значение, которое называется энергией активации данного процесса.

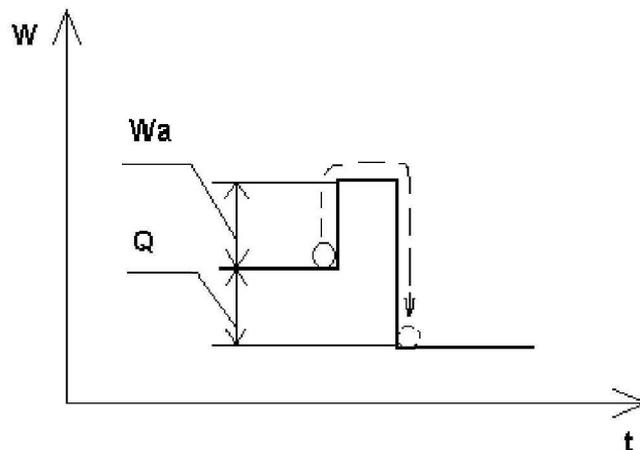


Рис. 7 – Схема активационного процесса:

W_a - энергия активации процесса адсорбции,

Q - энергия, выделяющаяся при протекании процесса.

Для адсорбции - теплота адсорбции, то есть энергия,
выделяющаяся при адсорбции одной частицы

Рассмотрим случай, когда частицы могут получить нужную энергию только за счет теплового движения. Такие процессы называются термоак-

тивационными. Закон, определяющий зависимость числа частиц, обладающих нужной энергией от величины этой энергии, называется законом распределения частиц по скоростям (энергиям). Примем, что в рассматриваемой системе частицы распределены по закону Максвелла-Больцмана (см. рис. 8).

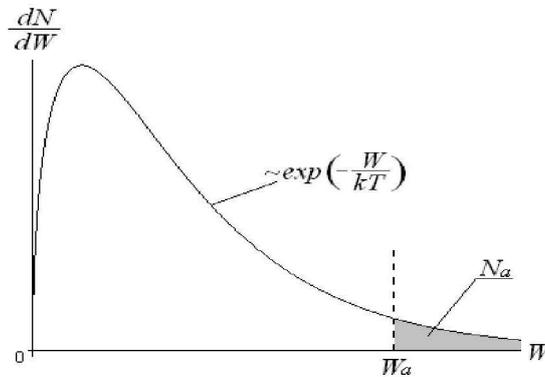


Рис. 8 – Распределение Максвелла-Больцмана по энергиям

Таким образом, для нахождения числа частиц, которые могут преодолеть потенциальный барьер высотой W_a , необходимо вычислить площадь закрашенной фигуры. Зная это число, можно найти вероятность того, что частица обладает энергией равной W_a или большей.

$$P = \frac{N_a}{N_0}, \quad (5)$$

где N_0 – общее число частиц, падающих на поверхность в единицу времени,

N_a – число частиц газа, обладающих энергией активации или большей.

Таким образом, адсорбцию отдельной частицы мы будем рассматривать как вероятностный процесс.

В этой работе влияние соседних клеток на вероятности протекания тех или иных процессов в данной клетке считается пренебрежимо малым. Тогда вероятность прохождения процесса будет вычисляться как:

$$P = A \cdot e^{-W_a/kT} \quad (6)$$

где W_a – энергия активации процесса,

T – температура, при которой идет процесс (температура газов при адсорбции и температура поверхности при десорбции),

A – множитель, который определяется параметрами моделирования.

Рассмотрим более подробно процесс физической адсорбции. Так как энергия активации процесса физической адсорбции принята нами равной нулю, то выражение (6) примет вид:

$$P = A \quad (7)$$

Это означает, что любая частица, оказавшаяся около поверхности, считается физически адсорбированной, и вероятность адсорбции зависит только от предэкспоненциального множителя A , который определяется параметрами газовой среды и геометрией решетки ВКА.

МЕТОДИКА НАХОЖДЕНИЯ ВРЕМЕНИ УСТАНОВЛЕНИЯ АДСОРБЦИОННОГО РАВНОВЕСИЯ

Для нахождения времени установления адсорбционного равновесия можно применить графический метод.

Строя график зависимости коэффициента заполнения поверхности от времени (или числа шагов), находим время, при котором значение коэффи-

циента заполнения будет составлять 0,95 – 0,98 от значения горизонтальной асимптоты этого графика. Найденное значение представляет собой время установления адсорбционного равновесия.

Пример:

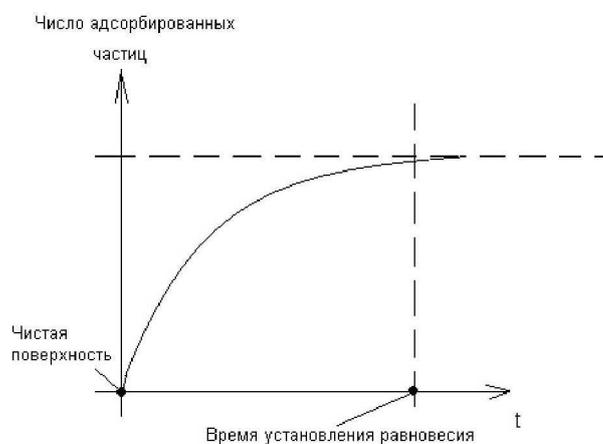


Рис. 9 – Методика установления адсорбционного равновесия

ОПИСАНИЕ ПРОГРАММНОГО ПРОДУКТА

Вид главного окна. Управление программой

На рис. 10 представлен вид главного окна программы. Слева выводится картина рабочего поля, а текстом справа - соответствующие этой картине параметры.

Назначение кнопок

«Сброс» – сбрасывает клеточный автомат в исходное состояние,

«Шаг» – система делает 1 шаг,

«N шагов» – система делает заданное число шагов,

- «Заккрыть» – выход из программы,
- «Справка» – открытие окна помощи,
- «Настройка» – открытие окна настроек.

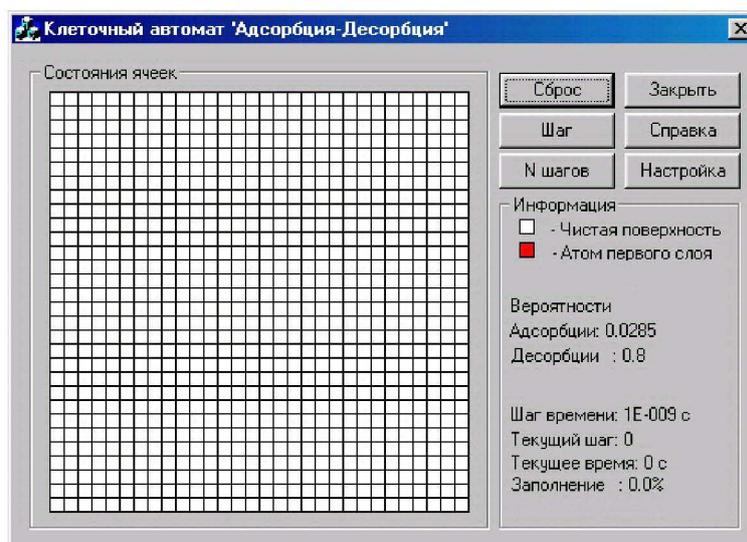


Рис. 10 – Главное окно программы

Окно настроек

Окно настроек позволяет указать необходимые для моделирования параметры системы:

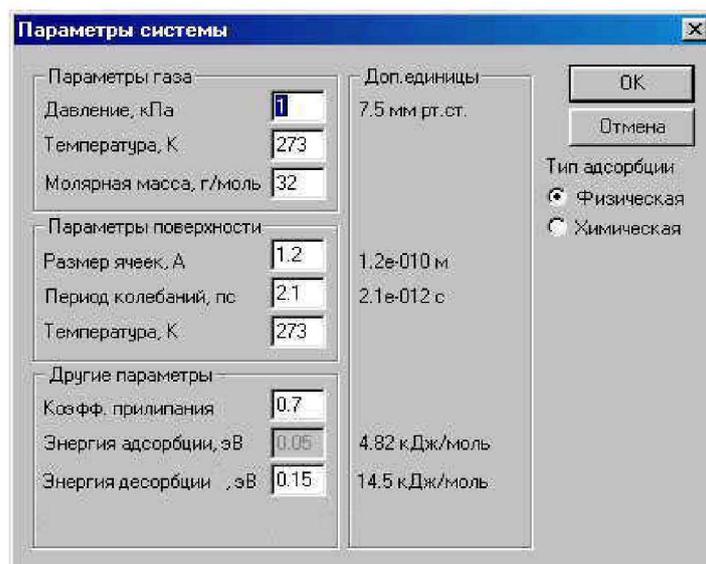


Рис. 11 – Окно настроек

Файлы

Приложение включает в себя следующие файлы необходимые для его нормальной работы:

1. Adsorbce.exe – исполняемый файл приложения.
2. Results.txt – содержит число ячеек, занятых молекулами компоненты А, сохраняемые через каждые 10 шагов.
3. Adsorbce.ini – содержит текущие настройки.
4. Default.ini – содержит настройки по умолчанию.

Пример использования программы

Рассмотрим случай, когда необходимо смоделировать поведение системы с заданными параметрами:

1. Давление газа – 60 кПа.

2. Температура газа 200 К.
3. Молярная масса адсорбата – 32 г/моль.
4. Период колебаний адсорбированного атома 1 пс.
5. Размер ячейки 1 Å.
6. Температура поверхности 500 К.
7. Энергия активации адсорбции – 0.5 эВ.
8. Энергия активации десорбции – 0.25 эВ.
9. Коэффициент прилипания – 0.7.

Система должна сделать 500 шагов, после чего температуру газов надо увеличить на 100 К, и сделать еще 500 шагов.

Для выполнения такой задачи необходимо:

1. Зайти в окно настроек.
2. Изменить значения соответствующих параметров таким образом, чтобы они соответствовали требуемым.
3. Закрыть окно настроек.
4. При помощи кнопки «N шагов» заставить систему сделать нужное число шагов (в нашем случае 500).
5. Изменить в окне настроек значение температуры газов на требуемое (400 К).
6. Сделать еще 500 шагов (аналогично п.4).
7. Окончание моделирования.

ПОРЯДОК ВЫПОЛНЕНИЯ ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЫ

Подготовка к лабораторной работе

- 1) Ознакомиться с теоретическими основами адсорбционных процессов.
- 2) Запустить программу.
- 3) Ознакомиться с интерфейсом программы и назначением элементов управления.
- 4) Получить исходные данные у преподавателя (табл. 1).

Таблица 1

Варианты исходных данных к лабораторной работе

Параметр	Номер бригады					
	1	2	3	4	5	6
Давление газа, кПа	20	10	12	50	15	5
Температура газа, К	273	300	310	265	315	350
Молярная масса газа, г/моль	32	32	32	32	32	32
Размер ячейки ВКА, Å	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2	1,2
Период колебаний, пс	2	1	1	2	1	1
Температура поверхности, К	273	300	310	265	315	350
Коэффициент прилипания	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7	0,7
Энергия десорбции, эВ	0,12	0,1	0,2	0,07	0,15	0,25
Вариация давления, кПа	10	5	6	15	5	1
Вариация температуры, К	30	50	20	15	30	70

Задание 1. Исследование динамики установления адсорбционного равновесия.

- 1) Нажать на кнопку «Настройка» и установить в окне настроек значения параметров согласно заданию. Нажать кнопку «ОК».
- 2) Сбросить ВКА в начальное состояние (кнопка «Сброс» программы). На вопрос «Очистить поле?» ответить «ОК».
- 3) Сделать 50 шагов ВКА. Для этого нажать на кнопку «N шагов», ввести количество шагов и нажать «ОК».
- 4) Записать текущее время процесса и коэффициент заполнения поверхности в табл. 2.
- 5) Повторяя п.3 - п.4, заполнить всю табл. 2.
- 6) Построить график зависимости коэффициента заполнения поверхности от времени.
- 7) По полученному графику определить время установления адсорбционного равновесия (см. пункт «Методика определения времени установления адсорбционного равновесия»).

Таблица 2

Зависимость коэффициента заполнения поверхности от времени

Число шагов ВКА								
Время, с								
Коэфф. заполнения								

Задание 2. Изучение зависимости времени установления адсорбционного равновесия от давления газа и температуры поверхности.

1) Аналогично заданию 1 лабораторной работы определить времена установления адсорбционного равновесия для исходной (T), повышенной ($T + \Delta T$) и пониженной ($T - \Delta T$) температур поверхности.

2) Результаты занести в табл. 3.

3) Повторить п.1 - п.2 для повышенного ($P + \Delta P$) и пониженного ($P - \Delta P$) значений давления.

Таблица 3

Зависимость времени установления адсорбционного равновесия от давления и температуры газов

$T \backslash P$	P	$P + \Delta P$	$P - \Delta P$
T			
$T + \Delta T$			
$T - \Delta T$			

Задание 3. Построение изотерм моделируемых процессов.

Давление газовой смеси в системе изменяется от нуля до P_0 . При заполнении таблицы и построении графика использовать не менее 10 измерений. Заполнить табл. 4.

Таблица 4

Данные для построения изотерм адсорбции

P T	0				P
T1					
T2					
T3					

Заполнение ведется следующим образом:

1. Устанавливается значение температуры T_1 и давления 0 кПа.

При этих значениях температуры и давления ожидается установление адсорбционного равновесия.

2. Коэффициент заполнения при этих значениях параметров заносится в соответствующую ячейку таблицы.

3. Устанавливается следующее значение давления.

4. Повтор п. 2 – 3. Для следующих температур заполнение ведется аналогично.

5. Основываясь на полученных данных построить графики изотерм $\theta(P)$.

ОФОРМЛЕНИЕ ОТЧЕТА О ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЕ

Отчет рекомендуется выполнять, используя табличный процессор Excel.

Отчет по лабораторной работе должен содержать:

1. Цель работы.
2. Исходные данные для каждого эксперимента.
3. Табл. 2.
4. График выхода системы к адсорбционному равновесию.
5. Табл. 3.
6. Табл. 4.
7. Выводы по результатам каждого эксперимента.

Библиографический список

1. Моррисон, С. Химическая физика поверхности твердого тела / С. Моррисон. – М.: Мир, 1980. – 488 с.
2. Фейнман, Р. Фейнмановские лекции по физике. Т. 4. / Р. Фейнман, Р. Лейтон, М.Сэндс. – М.: Мир, 1976. – 495 с.
3. Карпов, Ю.Г. Теория автоматов / Ю.Г. Карпов. – СПб.: Питер, 2002. – 224 с.

Учебное издание

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ
ОДНОКОМПОНЕНТНОЙ
МОНОСЛОЙНОЙ
АДСОРБЦИИ И ДЕСОРБЦИИ
МЕТОДОМ ВЕРОЯТНОСТНОГО
КЛЕТОЧНОГО АВТОМАТА (ВКА)**

Методические указания к лабораторной работе

Составитель Агафонов Андрей Николаевич

Редактор О. С. Бабаченко
Компьютерная верстка О. С. Бабаченко

Подписано в печать 26. 11. 2007 г. Формат 60x84 1/16.
Бумага офсетная. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 2,0. Тираж 150 экз.
Заказ Арт. С - 45/2007.

Самарский государственный аэрокосмический университет.
443086 Самара, Московское шоссе, 34

Изд-во Самарского государственного аэрокосмического университета.
443086 Самара, Московское шоссе, 34