Un modèle cinétique d'interaction solide-gaz

Kazuo AOKI, Departement of Mathematics,National Cheng Kung University - Tainan
Vincent GIOVANGIGLI, CMAP-CNRS, Ecole Polytechnique - Palaiseau
François GOLSE, CMLS, Ecole Polytechnique - Palaiseau
Shingo KOSUGUE, Institute for Liberal Arts and Sciences - Kyoto

Les équations cinétiques modélisant l'interaction solide-gaz comportent un terme de force stationnaire du aux atomes du solide dans leur position d'équilibre, un terme de collision avec des phonons représentant les mouvements de ces atomes, et un terme de collision de type Boltzmann entre les particules gazeuses [1, 2, 3]. Pour un physisorbat mince et planaire une telle équation réduite peut s'écrire

$$\partial_t f + \boldsymbol{c}_{\shortparallel} \cdot \boldsymbol{\partial}_{\shortparallel} f + \frac{1}{\epsilon} c_z\, \partial_\zeta f - \frac{1}{\epsilon} \partial_\zeta \mathrm{W}\, \partial_{c_z} f = J(f,f) + \frac{1}{\epsilon}\frac{1}{\tau_{\mathrm{ph}}}(nM - f), \tag{1}$$

où t désigne le temps, f la distribution de particules, $\boldsymbol{c} = (\boldsymbol{c}_{\shortparallel}, c_z)^t$ leur vitesse, $\boldsymbol{\partial}_{\shortparallel}$ la dérivée tangantielle, $\zeta = z/\epsilon$ la coordonnée normale réduite, $\mathrm{W} = \mathrm{W}(\zeta)$ le potential d'interaction, J l'opérateur de collision du gaz, $(nM - f)/\tau_{\mathrm{ph}}$ l'opérateur de collision avec les phonons, τ_{ph} le temps de relaxation, $n = \int f d\boldsymbol{c}$ la densité particulaire et M la Maxwellienne d'équilibre à l'interface. En notant $\tau^\star_{\mathrm{fr}}$ un temps caractéristique de libre parcours moyen, $\tau^\star_{\mathrm{ph}}$ un temps d'interaction gaz-phonon et $\tau^\star_{\mathrm{la}}$ un temps de transit dans la couche de physisorption on a supposé que $\epsilon = \tau^\star_{\mathrm{ph}}/\tau^\star_{\mathrm{fr}} = \tau^\star_{\mathrm{la}}/\tau^\star_{\mathrm{fr}} \ll 1$. Le potentiel W est tel que $\lim_{\zeta\to 0} \mathrm{W}(\zeta) = +\infty$, $\lim_{\zeta\to+\infty} \mathrm{W}(\zeta) = 0$, et possède des zones répulsives et attractives comme un potentiel de Lennard-Jones intégré sur le demi-plan solide $z < 0$. Le temps d'interaction avec les phonons $\tau_{\mathrm{ph}} = \tau_{\mathrm{ph}}(\zeta) > 0$ est une fonction croissante avec $\lim_{\zeta\to\infty} \tau_{\mathrm{ph}}(\zeta) = \infty$, et $1/\tau_{\mathrm{ph}}(\zeta)$ est intégrable sur $[0, +\infty)$.
Les équations obtenues pour l'approximation d'ordre zéro $f^{(0)}(t, \boldsymbol{x}_{\shortparallel}, \zeta, \boldsymbol{c}_{\shortparallel}, c_z)$ s'écrivent alors

$$c_z\, \partial_\zeta f^{(0)} - \frac{1}{m} \partial_\zeta \mathrm{W}\, \partial_{c_z} f^{(0)} = \frac{1}{\tau_{\mathrm{ph}}}(nM - f^{(0)}), \qquad \lim_{\zeta\to\infty} f^{(0)} = f_g(t, \boldsymbol{x}_{\shortparallel}, 0, \boldsymbol{c}_{\shortparallel}, c_z), \qquad c_z < 0, \tag{2}$$

où $f_g(t, \boldsymbol{x}_{\shortparallel}, z, \boldsymbol{c}_{\shortparallel}, c_z)$ est la distribution du gaz en $z = 0$.. Le problème (2) est bien posé dans des espaces fonctionnels appropriés et la solution fournit la distribution de particules $\lim_{\zeta\to\infty} f^{(0)}(t, \boldsymbol{x}_{\shortparallel}, \zeta, \boldsymbol{c}_{\shortparallel}, c_z)$ pour $c_z > 0$, i.e., la condition aux limites pour l'équation de Boltzmann [3]. On peut enfin introduire un procédé itératif d'approximation qui converge exponentiellement vers les solutions et les simulations numériques confirment les résultats théoriques [2, 3].

Références

[1] V.D. Borman, S.Yu. Krylov, and A.V. Prosyanov, *Theory of nonequilibrium phenomena at a gas-solid interface*, JETP **67**, 2110–2121 (1988).

[2] K. Aoki, V. Giovangigli, and S. Kosuge, *Boundary conditions for the Boltzmann equation from gas-surface interaction kinetic models*, Phys. Rev. E **106**, 035306 (2022).

[3] K. Aoki, V. Giovangigli, F. Golse and S. Kosuge, *The Physisorbate-Layer Problem Arising in Kinetic Theory of Gas-Surface Interaction*, J. Stat. Mech., 191 53 (2024).

Contact : `vincent.giovangigli@polytechnique.edu`