

К ТЕОРИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ РАЗРЕЖЕННОГО ГАЗА С ПОВЕРХНОСТЬЮ

А. А. Пярину (Москва)

Коэффициенты аккомодации, характеризующие обмен энергией и импульсом в задаче взаимодействия разреженного газа с поверхностью, можно вычислять аналитическими или численными методами с учетом или без учета начальных возмущений кристаллической решетки. При этом возникает необходимость заменить бесконечный трехмерный кристалл твердого тела, в зависимости от приближенной постановки задачи, конечной одно-, двух- или трехмерной совокупностью атомов с определенными связями между ними или же без этих связей. Точность результата при такой замене необходимо оценить.

В работе [1] определены зоны свободного движения и сильного взаимодействия в двумерной модели, а в [2] приведены оценки длины цепочки атомов, участвующих в акте столкновения в одномерном случае. В данной работе исследуется влияние на коэффициенты аккомодации величины блока атомов твердого тела, участвующих в столкновении и учитываемых при взаимодействии атома газа с поверхностью.

В одномерной задаче в начальный момент все атомы цепочки имеют смещения из положений равновесия и скорости колебаний, случайные по направлению и величине. Выявлена зависимость коэффициентов аккомодации энергии и импульса от начальных условий, параметров газа, а также получена оценка для количества атомов в цепочке, которые влияют на точность при расчете коэффициентов аккомодации с заданной энергией взаимодействия.

В двух- и трехмерном случаях произведена оценка сил взаимодействия поверхностных атомов с набегающим атомом газа. По мере удаления от атома-мишени силы убывают, так что имеет смысл получить сведения о числе поверхностных атомов, непосредственно участвующих в акте столкновения, кроме атома-мишени, и влияющих на величину коэффициентов аккомодации.

После соответствующих оценок твердое тело представляется конечным трехмерным кристаллом. При этом предлагается метод и описывается схема расчета обмена энергией и импульсом между разреженным газом и поверхностью тела.

Атомы в решетке связаны между собой упругими силами, пропорциональными величинам смещения из положений равновесия. Как смещения, так и скорости атомов в кристалле в начальный момент, определяемый как начало взаимодействия с атомом газа, являются случайными по величине и направлению. Атомы газа обладают макроскоростью, которая соответствует энергии взаимодействия $\sim 5-10 \text{ эв}$, и имеют максвелловское распределение по тепловым скоростям. Взаимодействие предполагается коллективным, т. е. столкновение отдельного атома газа происходит с целым блоком атомов тела. Вычислены индивидуальные коэффициенты аккомодации в зависимости от начального положения и скорости атома газа, проведено осреднение по параметрам, определяющим начальное состояние взаимодействующей системы, и рассчитаны соответствующие осредненные коэффициенты аккомодации. Взаимодействие между атомами газа и кристалла осуществляется согласно закону Леннарда-Джонса (в расчетах использован потенциал 6-12).

1. Систему уравнений движения для атома газа и линейной цепочки атомов тела, взаимодействующих через потенциал $\varphi(x_1)$, можно записать в виде (см. [3, 4]):

$$\ddot{x}_0(\tau) = \frac{1}{k\mu} \frac{d\varphi(x_1)}{dx_1}, \quad \ddot{x}_2(\tau) = \frac{1}{k} \frac{d\varphi(x_1)}{dx_1} - \frac{1}{2} x_3(\tau) \quad (1.1)$$

$$x_n(\tau) = \frac{1}{2} [x_0(\tau) - x_2(\tau)], \quad x_n(\tau) = \frac{1}{2} [x_{n-1}(\tau) - x_{n+1}(\tau)] \quad (n \geq 3)$$

Здесь k — постоянная силы взаимодействия между узлами цепочки; μ — отношение масс атомов газа и цепочки; τ — приведенное время; $x_{2n+1}(\tau)$ и $x_{2n}(\tau)$ и $x_{2n}(\tau)$ соответственно удвоенное относительное смещение n -го и $(n+1)$ -го и скорость n -го атомов. Зададим взаимодействие атома газа с первым атомом цепочки потенциалом (6-12) Леннарда-Джонса и обозначим $\alpha^0 = 2\varepsilon / \sigma^2 k$.

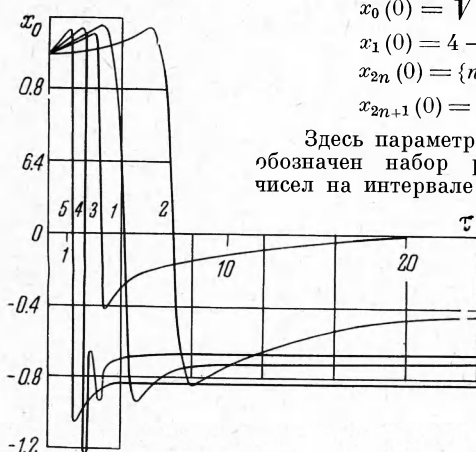
Предполагается, что все смещения отнесены к $1/2a$; a — шаг решетки; ε , σ — параметры потенциала Леннарда-Джонса. Выберем положительное направление вдоль оси цепочки к атому газа и примем, что зона свободного движения удалена от положения равновесия первого атома цепочки на расстояние $2a$ и максимальная амплитуда узла решетки не превышает $1/2a$, так что относительные смещения узлов будут заключены в интервале $[-1, \dots, 0, \dots, +1]$. Вследствие того, что модель пригодна лишь для малых смещений, этот интервал в начальных условиях уменьшен на порядок. В относительных величинах промежутки изменения скоростей атомов решетки будут заключены в таком же интервале. Энергия набегающего атома газа задается через параметр l , который определяется равенством $1/2 M \dot{r}_0^2 = \varepsilon l$.

Таким образом, начальные условия для системы (1.1) запишутся так:

$$\begin{aligned}
 x_0(0) &= \sqrt{l\alpha^0/\mu} \\
 x_1(0) &= 4 - \{1\} \\
 x_{2n}(0) &= \{n-1\} \quad (n \geq 1) \\
 x_{2n+1}(0) &= \{n\} - \{n+1\} \quad (n \geq 1)
 \end{aligned}
 \tag{1.2}$$

Здесь параметрами столкновения являются $l, \mu, \alpha^0; \{n\}$ обозначен набор равномерно распределенных случайных чисел на интервале $[-0.1, +0.1]$.

Система (1.1) с начальными условиями (1.2) решалась численно на ЭВМ при фиксированном числе n . Известно, что без учета фазы колебаний атомов цепочки коэффициент аккомодации энергии существенно зависит лишь от пяти первых атомов [2]. Поэтому при расчетах учитывалось от 6 до 20 атомов, что соответствует порядку системы уравнений при счете от 14 до 42. Расчеты производились при значениях параметров $\mu = 0.1 \div 0.8; l = 10 \div 500;$



$\alpha^0 = 10^{-1} \div 10^{-3}$ и различных наборах начальных условий.

Сравнительные графики скоростей x_0 атома газа для двух значений n (6 и 10) приведены соответственно на фиг. 1, 2. Вычисления показывают, что длина цепочки, начиная с шестого-седьмого атома, уже очень слабо влияет на передаваемые импульсы и энергию. Практически не меняется и время взаимодействия, лишь качественная картина колебаний возмущенной цепочки (и совместно с нею атома газа, если произошел захват) различна при разной длине ее, при этом дальние атомы возмущаются слабо. Коэффициенты аккомодации нормального импульса α_n и энергии α для некоторых параметров взаимодействия приведены в табл. 1.

Таблица 1

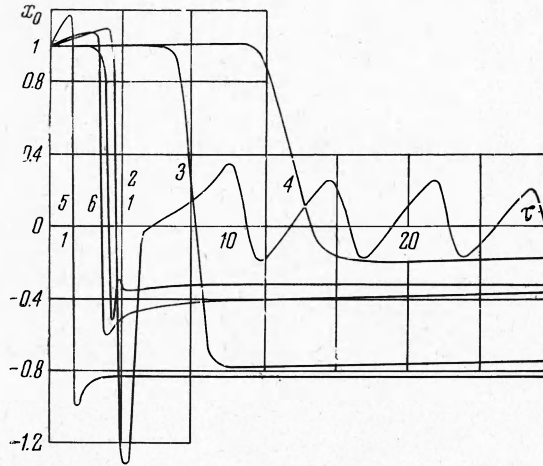
l	μ	α^0	$n = 6$			$n = 10$		
			α_n	α	(1) ¹	α_n	α	(2) ¹
10	0.1	0.01	0.170	0.310	5	0.169	0.309	5
10	0.3	0.01	0.334	0.556	4	0.329	0.550	
10	0.5	0.01	0.603	0.846		0.677	0.887	
10	0.9	0.01	0.910	0.992	3	1.000	1.000	1
10	0.1	0.1	0.288	0.493	1	0.273	0.472	
10	0.3	0.1	0.580	0.723	2	0.591	0.832	
10	0.9	0.1	0.966	0.999		0.926	0.995	
100	0.9	0.1	0.899	0.990		0.899	0.989	
100	0.1	0.01	0.088	0.165		0.084	0.161	4
100	0.5	0.01	0.691	0.905		0.680	0.898	2
100	0.1	0.001	0.052	0.100		0.052	0.101	
100	0.3	0.001	0.240	0.422		0.246	0.431	
100	0.5	0.001	0.535	0.784		0.530	0.778	
100	0.9	0.001	0.870	0.983		0.854	0.979	
500	0.5	0.01	0.590	0.830		0.592	0.834	3
500	0.5	0.001	0.535	0.785		0.537	0.786	

¹ В этих столбцах указаны номера кривых, приведенных на фиг. 1, 2.

Сравнение полученных значений коэффициентов с имеющимися результатами, где не производилось осреднение, показывает, что эффект наличия начальных возмущений сохраняется независимо от длины цепочки, а коэффициенты обмена при различных начальных условиях в основном близки к средним значениям. Длина цепочки оказывает влияние на обмен лишь при малых энергиях взаимодействия, а для практически интересного диапазона скоростей атомов газа с большой степенью точности можно ограничиться учетом пяти-шести атомов в линейной модели.

Если легкие частицы газа в основном отражаются с малой аккомодацией, то при взаимодействии тяжелых атомов коэффициенты α_n и α близки к единице, а при малых

энергиях возможен захват атома газа. В последнем случае атом газа может совершать



Фиг. 2

Здесь r_0 — расстояние до атома-мишени; n, m — номера соседей. Не умаляя общности, а лишь для простоты выкладок в дальнейшем будем рассматривать нормальные лобовые столкновения, и выражения для потенциала $\varphi(A)$ примут вид

$$\varphi(A) = \varphi(r_0) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \varphi(r_n)$$

$$\varphi(A) = \varphi(r_0) + 4 \sum_{n=1}^{\infty} \varphi(r_n) + 4 \sum_{\substack{n>0 \\ m>0}} \varphi(r_{n,m}) \quad (2.1)$$

Здесь $r_n^2 = z^2 + (na)^2$, $r_{n,m}^2 = z^2 + (n^2 + m^2)a^2$, z — нормально к поверхности. Однако суммы в этих выражениях при замене $\varphi(r)$ потенциалом, близким к реальному (например, потенциалом (6-12) Леннарда-Джонса), вычислить аналитически трудно, да и нет необходимости, поскольку достаточно иметь оценку сил взаимодействия от отдаленных атомов поверхности. Относя все длины к шагу решетки a и полагая постоянную σ в потенциале Леннарда-Джонса равной a , функция $\varphi(r)$ для этого потенциала с точностью до постоянного множителя будет иметь вид

$$\varphi(r^*) = 1/r^{*12} - 1/r^{*6}, \quad r_n^{*2} = k^2 + n^2$$

$$r_{n,m}^{*2} = k^2 + n^2 + m^2, \quad n, m = 1, 2, \dots$$

Здесь $k = z/a$ — относительное расстояние атома газа от мишени.

Таким образом, для фиксированной точки A $\varphi(A)$ есть функция только n в двумерном случае и двух переменных n, m в трехмерном варианте. Исследуем первый случай.

Рассмотрим частичную сумму $S_n = \psi(1) + \dots + \psi(n)$ бесконечного ряда S_{∞} . Остаток этого ряда $R_n = \psi(n+1) + \psi(n+2) + \dots$ вследствие сходимости последнего удовлетворяет неравенствам

$$\int_{n+1}^{\infty} f(n) dn < R_n < \int_n^{\infty} f(n) dn \quad (2.2)$$

Здесь $\varphi(r_n) \equiv \psi(n)$, а в несобственном интеграле $f(n)$ будет непрерывной убывающей функцией от n , принимающей при $n = 1, 2, 3, \dots$ значения $\psi(1), \psi(2), \psi(3), \dots$.

Для конкретного числа $2n$ соседей, окружающих атом-мишень, суммарный потенциал в любой фиксированной точке вблизи поверхности легко вычисляется. Неравенство (2.2) позволяет оценить погрешность, вносимую пренебрежением воздействия более отдаленных атомов поверхности. Интегралы в (2.2) для потенциала Леннарда-

колебательные движения вблизи поверхности достаточно долго (кривая 1, фиг. 2), или же захватываться сразу после первого колебания (кривая 3, фиг. 1).

2. В отличие от одномерной цепочки в двух- и трехмерной модели взаимодействия потенциал данной точке A вблизи поверхности складывается из потенциалов взаимодействия со всеми поверхностными узлами решетки, т. е.

$$\varphi(A) = \varphi(r_0) + \sum_{n \neq 0} \varphi(r_n)$$

$$\varphi(A) = \varphi(r_0) + \sum_{n, m \neq 0} \varphi(r_{n,m})$$

в двух- и трехмерной простой кубической модели соответственно.

Джонса вычисляются аналитически. В дальнейшем понадобится лишь второй из них.

$$\int_n^\infty f(n) dn = \left(\frac{63}{256k^{11}} - \frac{3}{8k^5} \right) \frac{\pi}{2} - \frac{n}{10k^2(k^2+n^2)^5} - \frac{9n}{80k^4(k^2+n^2)^4} - \frac{63n}{480k^6(k^2+n^2)^3} - \frac{63n}{384k^8(k^2+n^2)^2} - \frac{63n}{256k^{10}(k^2+n^2)} + \frac{n}{4k^2(k^2+n^2)^2} + \frac{3n}{8k^4(k^2+n^2)} + \left(\frac{3}{8k^5} - \frac{63}{256k^{11}} \right) \operatorname{arctg} \frac{n}{k} \quad (2.3)$$

При взаимодействии с поверхностью оценка второго члена в выражении для потенциальной функции (2.1) аналогична двумерной модели ($m = 0$), а последний член представим в виде

$$\sum_{n=1}^\infty \left[\sum_{m=1}^\infty \Phi(r_{n,m}) \right] = \sum_{n=1}^\infty S_{nm}$$

Для него выполняется неравенство

$$\int_{n+1}^\infty S_{nm} dn < R_n < \int_n^\infty S_{nm} dn$$

при условии, что внутренняя сумма вычислена точно. Если через R_m обозначить остаток внутреннего ряда при приближенном вычислении последнего, то для R_n уже будет справедлива оценка сверху в виде

$$R_n < \int_n^\infty \left[\sum_{m=1}^m \Phi(r_{n,m}) \right] dn + \sum_n R_m \quad (2.4)$$

Если задать m и n и фиксировать каждый раз значение n , то можно вычислить оценки для R_m . Суммируя эти верхние границы, получаем второй член в выражении (2.4). После вычисления частичной суммы по m интеграл в первом члене находится обычным способом, при этом возможна перестановка суммирования и интегрирования.

Расчеты произведены для относительной ошибки ΔR в потенциале взаимодействия в зависимости от количества учетных соседей атома-мишени и приведены в табл. 2. В трехмерной модели относительная ошибка по сравнению с двумерной моделью несколько выше, а для небольшого числа соседей отличается в несколько раз. Однако убывание ошибки с ростом числа соседних атомов настолько интенсивно, что для практических целей достаточная точность достигается при одинаковом числе учетных соседей как в двух-, так и в трехмерном случаях.

Таблица 2

k n = m	0.5		1.0		2.0	
	ΔR_n	ΔR_{nm}	ΔR_n	ΔR_{nm}	ΔR_n	ΔR_{nm}
1	$0.469 \cdot 10^{-4}$	$0.937 \cdot 10^{-4}$	0.277	0.434	0.269	0.423
2	$0.271 \cdot 10^{-5}$	$0.405 \cdot 10^{-5}$	$0.348 \cdot 10^{-1}$	$0.470 \cdot 10^{-1}$	$0.733 \cdot 10^{-1}$	0.106
3	$0.385 \cdot 10^{-6}$	$0.512 \cdot 10^{-6}$	$0.522 \cdot 10^{-2}$	$0.731 \cdot 10^{-2}$	$0.202 \cdot 10^{-1}$	$0.268 \cdot 10^{-1}$
5	$0.311 \cdot 10^{-7}$	$0.372 \cdot 10^{-7}$	$0.496 \cdot 10^{-3}$	$0.595 \cdot 10^{-3}$	$0.255 \cdot 10^{-2}$	$0.306 \cdot 10^{-2}$
10	$0.102 \cdot 10^{-8}$	$0.112 \cdot 10^{-8}$	$0.165 \cdot 10^{-4}$	$0.182 \cdot 10^{-4}$	$0.101 \cdot 10^{-3}$	$0.111 \cdot 10^{-3}$
20	$0.444 \cdot 10^{-10}$	$0.466 \cdot 10^{-10}$	$0.524 \cdot 10^{-6}$	$0.548 \cdot 10^{-6}$	$0.336 \cdot 10^{-5}$	$0.351 \cdot 10^{-5}$

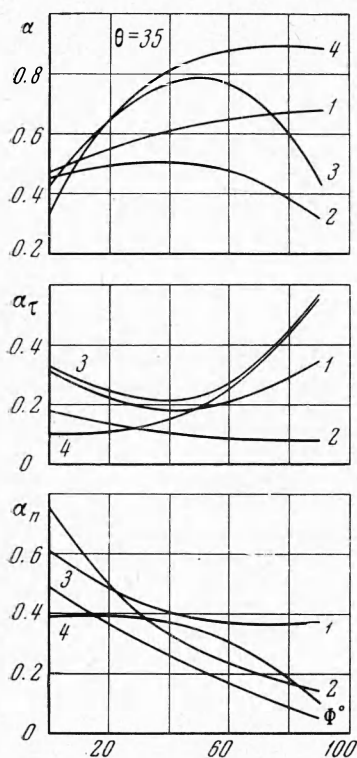
Сравнивая вычисленные значения коэффициентов аккомодации с использованием приближенного обрезанного потенциала с поправкой и без нее, замечаем качественное совпадение результатов, т. е. доминирующее влияние в процессе столкновения газового атома со стенкой оказывают лишь ближайшие к атому-мишени соседи на поверхности, количество которых зависит главным образом от параметров потенциала и для известных потенциалов (в том числе функции Леннарда-Джонса) с учетом приближенных значений самих параметров не превышает двух-трех. Однако зона свободного движения зависит в основном от скорости набегающего газа [1].

Таким образом, соседние атомы на поверхности тела оказывают меньшее влияние на обмен энергией и импульсом, чем атомы второго и более глубоких слоев, и проведенные расчеты позволяют количественно оценить это влияние. Заметим, что схема

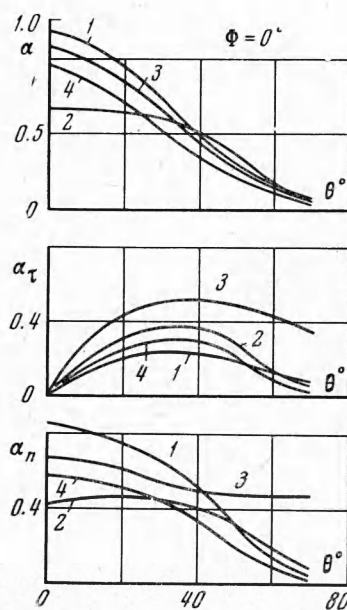
парного взаимодействия [1], основанная на выделении зоны сильного взаимодействия, остается в силе и учет ближайших соседей при умеренных скоростях будет давать лишь малый поправочный множитель к вычисленным в [1] коэффициентам аккомодации.

3. Представим конечный блок атомов твердого тела в виде правильной кубической решетки. Выделим на поверхностной грани один атом, и его положение равновесия примем за начало координат (x_1, x_2, x_3) , где ось x_3 направлена нормально этой грани. На решетку набегают поток газовых атомов, имеющих максвелловское распределение по собственным скоростям u , а макроскорость зададим величиной v и двумя углами θ, Φ , из которых первый будем отсчитывать от нормали к поверхности.

Здесь линейным масштабом принимается σ . Начальные смещения атомов решетки являются случайными, распределенными в относительных единицах на отрезке $(-0.1, +0.1)$, а максимальное значение начальной скорости определяется через энергию связи атомов в решетке. Положение атома газа (r, θ, φ) в начальный момент времени разыгрывается на некоторой контрольной поверхности, расположенной от плоскости $x_3 = 0$ на относительном расстоянии d , которое определяется оценкой поля сил над поверхностью. В расчетах принято $d = 2$, а относительный шаг решетки $a = 1$. Блок атомов, участвующих в акте столкновения, состоит из 36 атомов. В зависимости от сил взаимодействия контрольная поверхность разбивается на ячейки, внутри которых начальные точки распределены равномерно.



Фиг. 3



Фиг. 4

Уравнения движения для взаимодействующей системы решаются на ЭВМ методом Адамса с переменным шагом.

Коэффициенты аккомодации для траектории при фиксированном начальном положении атома газа получаются усреднением по скоростям этого атома, имеющим распределение в виде максвелловской функции

$$f = \left(\frac{M}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{M(v-u)^2}{2kT} \right] \quad (3.1)$$

Здесь T — температура, k — постоянная Больцмана, а коэффициенты $\alpha, \alpha_n, \alpha_\tau$, характеризующие обмен энергией и импульсом (нормальной и тангенциальной составляющей соответственно) между пучком атомов газа с заданной макроскопической скоростью и телом, вычисляются после усреднения по всевозможным траекториям.

