

**ОБ ОБМЕНЕ ЭНЕРГИЕЙ И ИМПУЛЬСОМ МЕЖДУ АТОМАМИ И МОЛЕКУЛАМИ ГАЗА И ПОВЕРХНОСТЬЮ ТВЕРДОГО ТЕЛА**

*А. И. Ерофеев (Москва)*

Рассмотрение взаимодействия атомов или молекул газа с поверхностью твердого тела на основе классической механики приводит к трудоемкой задаче — решению уравнений движения всех частиц, участвующих во взаимодействии. В ряде случаев задача может быть упрощена [1-3]. Так, в работе [2] упрощение достигается тем, что атомы твердого тела рассматриваются как независимые гармонические осцилляторы; такое представление дает правильную картину движения, если столкновение непродолжительно. В работе [3] сделана попытка учесть влияние соседних атомов решетки на взаимодействие атома газа и атома твердого тела; в этой работе рассматривается движение не более шести атомов твердого тела. Не анализируя здесь пределы применимости упрощенных постановок задач, заметим, что необходимость учета связей атомов в твердом теле возникает тогда, когда столкновение атома газа с поверхностью становится достаточно продолжительным; количество же связей будет зависеть от конкретных условий задачи.

Одним из путей упрощения задачи может быть составление эквивалентной плоской модели твердого тела, что позволяет значительно сократить объем расчетов. В работе взаимодействие атомов с поверхностью твердого тела рассмотрено на основе модели, описанной в [1], причем сделаны уточнения, касающиеся выбора количества атомов твердого тела, необходимого для описания взаимодействия, определения параметров потенциала взаимодействия атомов в твердом теле и учета влияния со стороны атомов тела, не расположенных в плоскости движения, на атом газа.

1. Плоская модель взаимодействия частицы газа с твердым телом. а) Основным геометрическим параметром при моделировании твердого тела плоской квадратной решеткой является кратчайшее расстояние между атомами  $a$ , которое должно зависеть от параметров реальной пространственной решетки. В дальнейшем будет установлена зависимость коэффициентов обмена от величины  $a$ .

б) Взаимодействие атомов в решетке будем рассматривать как парное взаимодействие с потенциалом Морзе:

$$U(r) = D [e^{-2c(r-b)} - 2e^{-c(r-b)}] \quad (1.1)$$

Здесь  $r$  — расстояние между частицами, а  $b, c, D$  — параметры. Каждый поверхностный атом взаимодействует с пятью соседями, а каждый внутренний — с восемью (фиг. 1). Если в качестве параметров потенциала выбрать параметры, определенные для пространственной решетки [4], то такие характеристики твердого тела, как энергия связи атомов внутри решетки и на ее поверхности, упругие свойства и т. д., будут сильно различаться для плоской и пространственной моделей. Поэтому определим параметры потенциала исходя из условия эквивалентности физических свойств поверхности тела в плоской и пространственной решетках, которые могут быть следующими.

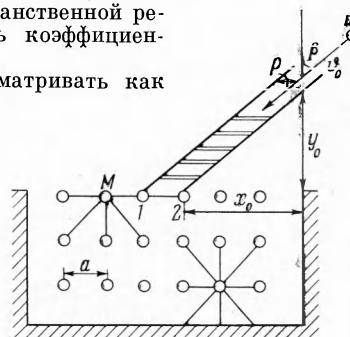
1) В отсутствие взаимодействия с атомом газа атомы решетки находятся в положении равновесия; это означает, что сумма сил, действующих на каждый атом тела, равна нулю.

2) Энергии связи поверхностного атома для плоской решетки  $E_{s2}$  и для пространственной решетки  $E_{s3}$  должны быть одинаковы.

3) Период колебаний поверхностного атома в каком-либо направлении (например по нормали к поверхности)  $\tau_{n2}$  в плоской решетке должен быть равен периоду колебаний атома в том же направлении  $\tau_{n3}$  для пространственной решетки.

В рассматриваемом случае перечисленным условиям соответствуют равенства

$$\begin{aligned} e^{-2c(a\sqrt{2}-b)} - e^{-c(a\sqrt{2}-b)} + \frac{1}{2}\sqrt{2}[e^{-2c(a-b)} - e^{-c(a-b)}] &= 0 \\ 2c^2D \left[ 2e^{-2c(a-b)} \left( 1 - \frac{1}{ac} \right) - e^{-c(a-b)} \left( 1 - \frac{2}{ac} \right) + \right. & \\ \left. + e^{-2c(a\sqrt{2}-b)} \left( 2 - \frac{\sqrt{2}}{2ac} \right) - e^{-c(a\sqrt{2}-b)} \left( 1 - \frac{\sqrt{2}}{2ac} \right) \right] &= \frac{4\pi^2 M}{\tau_{s2}^2} \\ |2D [e^{-2c(a\sqrt{2}-b)} - 2e^{-c(a\sqrt{2}-b)}] + 3D [e^{-2c(a-b)} - 2e^{-c(a-b)}]| &= E_{s3} \end{aligned} \quad (1.2)$$



Фиг. 1

Здесь  $M$  — масса атома тела. Решая систему (1.2), находим параметры потенциала  $b, c, D$ .

в) Параметры потенциалов взаимодействия атома газа и атома тела определим на основе комбинационного принципа [5, 6], который для потенциала вида Морзе можно сформулировать следующим образом:

$$D_{ij}^2 = D_{ii}D_{jj}, \quad 2c_{ij}^{-1} = c_{ii}^{-1} + c_{jj}^{-1}, \quad 2b_{ij} = b_{ii} + b_{jj} \quad (1.3)$$

Здесь одинаковые индексы у параметров потенциала относятся к взаимодействию одинаковых атомов, а смешанные индексы — к взаимодействию разных атомов.

г) Выбор конечного числа атомов твердого тела, как отмечалось выше, объясняется тем, что с увеличением количества атомов увеличивается число уравнений, а значит, и время счета на ЭВМ. С другой стороны, число атомов должно быть достаточно велико, чтобы время  $t$ , за которое возмущение, вызванное на поверхности, отразилось от границ конечного объема и дошло до поверхностного слоя, было больше времени взаимодействия  $\tau$  налетающего атома с атомами тела ( $t > \tau$ ). При выполнении этого условия атом газа, отразившись от поверхности, достигнет зоны, в которой энергия взаимодействия с телом значительно меньше его кинетической энергии, быстрее, чем возмущение достигнет поверхностного слоя. Выполнение неравенства  $t > \tau$  зависит от отношения масс атома газа  $m$  и атома тела  $M$  ( $\kappa = m/M$ ), от угла падения  $\beta$ , от начальной скорости атома газа  $v_0$ , от параметров взаимодействия и т. д. С уменьшением  $\kappa$  при прочих равных условиях  $\tau$  уменьшается; значит, чем меньше  $\kappa$ , тем меньшим количеством слоев решетки можно ограничиться. Оценки показывают, что при  $\kappa \leq 0.5$  и  $v_0 \approx 10^6$  см/сек трех-четыре слоя достаточно при описании взаимодействия, причем при  $\kappa = 0.5$  энергия молекулы должна быть такова, чтобы поверхностный атом не мог вылететь из решетки. Необходимо также выбрать количество атомов в слое. Если частица налетает на поверхность под углом падения  $\beta$  (см. фиг. 1) и направление ее первоначального движения лежит в зоне, проходящей через центры атомов 1 и 2, то в худшем случае ее начальная вертикальная координата  $y_0$  при горизонтальной координате  $x_0$ , равной расстоянию от атома 2 до конца верхнего слоя, равна  $y_0 = x_0 \operatorname{ctg} \beta$ . При этом должно выполняться неравенство  $|U(y_0)| \ll E_0$ , где  $E_0$  — начальная кинетическая энергия,  $U(y_0)$  — потенциальная энергия в поле тела. Количество атомов в слое  $n$  определится затем из соотношения  $n = 2x_0/a$ , где  $a$  — параметр плоской решетки. Легко заметить, что с увеличением угла падения  $\beta$  количество атомов в слое резко возрастет. Однако при больших  $\beta$  взаимодействие частицы газа с атомом тела слабое, и поэтому можно ограничиться меньшим количеством слоев. В настоящей работе при  $\beta \leq 60^\circ$  решетка составлена из трех слоев по шесть атомов в слое, а при  $60^\circ \leq \beta \leq 80^\circ$  решетка составлена из одного поверхностного слоя в двадцать атомов.

д) Учтем, далее, влияние, оказываемое на атом газа, со стороны атомов тела, не расположенных в плоскости движения частицы газа. Ввиду того что потенциальная энергия и силы очень быстро спадают с увеличением расстояния между частицами, при учете влияния всего тела можно ограничиться несколькими слоями атомов в глубь тела и несколькими слоями в плоскостях, параллельных плоскости движения частиц газа. Предполагается, что во время взаимодействия эти дополнительные атомы не двигаются. В работе учтено влияние двух слоев вглубь и двух слоев вправо и влево от плоскости движения.

2. Результаты расчетов взаимодействия атомов газа с поверхностью и суждение модели. Определим коэффициенты аккомодации энергии и импульса. Коэффициент аккомодации энергии  $\alpha$  введен следующим образом

$$\alpha = 1 - \langle v^2 \rangle / v_0^2 \quad (2.1)$$

Здесь  $\langle v^2 \rangle$  — среднее значение квадрата скорости атома газа после столкновения,  $v_0$  — скорость атома газа до столкновения. Коэффициенты аккомодации нормального импульса  $\sigma$  и тангенциального импульса  $\sigma'$  определены соответственно

$$\sigma = \langle v_n \rangle / v_0, \quad \sigma' = \langle v_\tau \rangle / v_0 \quad (2.2)$$

Здесь  $\langle v_n \rangle, \langle v_\tau \rangle$  — средние значения нормальной и тангенциальной компонент скорости атома газа после столкновения. Осреднение проводилось по прицельному параметру  $\rho$  (фиг. 1) по формуле

$$\langle v \rangle = \left[ \int_0^{1/2a} v(\rho) \rho d\rho \right] \left[ \int_0^{1/2a} \rho d\rho \right]^{-1} \quad (2.3)$$

Заметим, что  $v_\tau$  имеет различные знаки в зависимости от того, летит ли отраженная частица в направлении первоначального движения или в противоположном направлении. В первом случае будем считать, что знак  $v_\tau$  положителен, во втором — отрицателен.

Далее рассматривается взаимодействие молекулы азота без учета внутренних степеней свободы с плоской решеткой, причем моделировались два металла — молибден и железо, массы атомов которых равны 96 и 56 соответственно. Параметры потенциалов взаимодействия атомов в твердом теле определялись по формулам (1.2) для следующих значений параметра решетки  $a$ , энергии связи атома на поверхности  $E_s$  и периода колебаний  $\tau_n$ .

1) Модель 1 (Mo) —  $E_s = 6.762 \text{ эв}$  [7];  $\tau_n = 1.9 \cdot 10^{-13} \text{ сек}$ ;  $a = 3.14 \text{ \AA}$ . Здесь постоянная плоской решетки взята равной постоянной пространственной решетки [8]. Решая систему (1.2), получаем следующие значения параметров потенциала:  $D_1 = 1.8886 \text{ эв}$ ;  $c_1 = 1.4153 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}$ ;  $b_1 = 3.2583 \text{ \AA}$ .

2) Модель 2 —  $E_s = 6.762 \text{ эв}$ ;  $\tau_n = 1.9 \cdot 10^{-13} \text{ сек}$ ;  $a = 2.85 \text{ \AA}$ . Тогда  $D_2 = 1.8344 \text{ эв}$ ;  $c_2 = 1.4032 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}$ ;  $b_2 = 2.9845 \text{ \AA}$ .

3) Модель 3 (Fe) —  $E_s = 4.192 \text{ эв}$  [7];  $\tau_n = 1.6 \cdot 10^{-13} \text{ сек}$ ;  $a = 2.85 \text{ \AA}$ . Постоянная пространственной решетки железа равна  $2.86 \text{ \AA}$  [8]. Параметры потенциала равны:  $D_3 = 1.1889 \text{ эв}$ ;  $c_3 = 1.6552 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}$ ;  $b_3 = 2.9434 \text{ \AA}$ .

Для определения параметров потенциалов взаимодействия атомов газа и атомов твердого тела воспользуемся формулами (1.3) и параметрами потенциалов взаимодействия одинаковых атомов [4, 9]. Имеем

1)  $N_2$  — Mo взаимодействие ( $U$ ):  $D = 0.0964 \text{ эв}$ ;  $c = 1.5223 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}$ ;  $b = 3.503 \text{ \AA}$ .

2)  $N_2$  — Fe взаимодействие ( $U'$ ):  $D' = 0.0692 \text{ эв}$ ;  $c' = 1.46 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}$ ;  $b' = 3.437 \text{ \AA}$ .

а) *Нормальное падение*. Для нормального падения атома газа рассмотрены зависимости коэффициентов обмена: 1) от отношения масс; 2) от параметра плоской решетки  $a$ ; 3) от характеристик твердого тела; 4) от параметров потенциала взаимодействия атом газа — атом тела; 5) от энергии налетающего атома. Ниже представлены результаты расчета зависимости  $\alpha$  и  $\sigma$  от отношения масс  $\kappa$  для моделей 1, 2, 3. В качестве потенциала взаимодействия атома газа и атома твердого тела для моделей 1, 2 был взят потенциал  $U$ , а для модели 3 —  $U'$ . Энергия атома газа при  $\kappa = 0,15; 0,3; 0,4$  равнялась  $E_0 = 14,5 \text{ эв}$ , а при  $\kappa = 0,5$  энергия атома составляет  $1/2 E_0$ . Это связано с тем, что при  $\kappa = 0,5$  и энергии  $E_0$  верхний атом решетки при некоторых значениях прицельного параметра отрывается и влияет на отраженный атом газа.

$\kappa = 0.15$	0.3	0.4	0.5	
$\alpha = 0.437$	0.682	0.791	0.837	(модель 1)
$\sigma = 0.686$	0.516	0.422	0.370	
$\alpha = 0.413$	0.658	0.764	0.837	
$\sigma = 0.707$	0.544	0.454	0.374	(модель 2)
$\alpha = 0.448$	0.699	0.803	0.838	
$\sigma = 0.691$	0.514	0.417	0.379	(модель 3)

Сравнивая соответствующие результаты для моделей 1 и 2, видим, что для одних и тех же потенциалов взаимодействия атом газа — атом тела коэффициент accommodation энергии уменьшается при уменьшении расстояния между атомами в плоской решетке. Если ввести параметр  $\eta = b/a$ , где  $b$  — параметр потенциала взаимодействия атом газа — атом тела, то можно проследить зависимость изменения  $\alpha$  при изменении  $\eta$ . Для модели 1 имеем  $\eta_1 = 1.11$ , для модели 2 —  $\eta_2 = 1.23$ ; изменение  $\eta$  приблизительно на 10% привело к изменению  $\alpha$  максимум на 6% (при  $\kappa = 0.15$ ) и к изменению  $\sigma$  максимум на 7% (при  $\kappa = 0.4$ ). Заметим, что с увеличением  $\eta$  коэффициент  $\alpha$  уменьшается, а  $\sigma$  увеличивается.

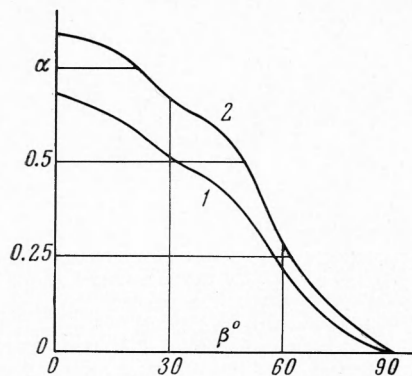
Приведем далее результаты расчетов  $\alpha$  и  $\sigma$  для моделей 2, 3, которые различаются физическими свойствами (энергия связи в решетке, период колебаний атома), но имеют одно и то же расстояние между атомами ( $a = 2.85 \text{ \AA}$ ). Атом газа взаимодействует с атомом тела с потенциалом  $U'$

$\kappa = 0.3$	0.4	0.5	
$\alpha = 0.692$	0.794	0.821	(модель 2)
$\sigma = 0.521$	0.427	0.401	
$\alpha = 0.639$	0.803	0.838	
$\sigma = 0.514$	0.417	0.379	(модель 3)

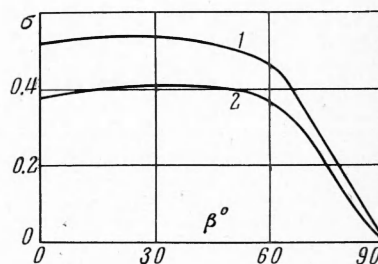
Видно, что изменения  $\alpha$  и  $\sigma$  невелики (максимум 5%). Зависимость коэффициентов обмена от параметров потенциала взаимодействия атом газа — атом твердого тела была рассмотрена для модели 2; получены следующие результаты:

$\kappa = 0.3$	0.4	0.5	
$\alpha = 0.658$	0.764	0.837	(потенциал $U$ )
$\sigma = 0.544$	0.454	0.374	
$\alpha = 0.692$	0.794	0.821	
$\sigma = 0.521$	0.427	0.401	(потенциал $U'$ )

Заметим, что различия в  $\alpha$  и  $\sigma$  определяются именно потенциалами взаимодействия, так как параметр  $\eta$  для рассматриваемых случаев отличается мало ( $\sim 2.5\%$ ):  $\eta = 1.23$  для потенциала  $U$ ,  $\eta' = 1.20$  для потенциала  $U'$ . Увеличение  $\alpha$  при потенциале  $U'$ , по сравнению с  $U$  для  $\kappa = 0.3, 0.4$ , по-видимому, связано с тем, что атом газа в первом случае ближе подходит к поверхности ( $D' < D$ ), так как эквипотенциали взаимодействия атом газа — твердое тело имеют более глубокие ямы для  $U'$ , поэтому увеличивается возможность как бы «многократных столкновений». При  $\kappa = 0.5$  основную роль, по-видимому, играет то обстоятельство, что возмущения, вызванные в решетке, велики, вид эквипотенциалей за время взаимодействия изменяется, а изменения в  $\alpha$  и  $\sigma$  связаны с тем, что при потенциале  $U'$  атом газа при отражении преодолевает меньший потенциальный барьер, чем в случае потенциала  $U$ .



Фиг. 2



Фиг. 3

Наконец, приведем зависимость коэффициента аккомодации  $\alpha$  от начальной энергии частицы  $E_0$

$\kappa = 0.292$	0.4	0.5	
$\alpha = 0.682$	0.791	—	( $E_0 = 14.5 \text{ эв}$ )
$\alpha = 0.649$	0.761	0.837	( $E_0 = 7.25 \text{ эв}$ )
$\alpha = —$	—	0.830	( $E_0 = 4.83 \text{ эв}$ )
$\alpha = 0.653$	0.730	—	( $E_0 = 3.625 \text{ эв}$ )

В рассмотренном диапазоне начальной энергии изменения в  $\alpha$  не превышают 5%.

б) *Наклонное падение.* На фиг. 2, 3 представлены зависимости  $\alpha$  и  $\sigma$  от угла падения для следующих случаев: 1) кривая 1 —  $\kappa = 0.292$ , потенциал взаимодействия молекулы газа и атома решетки  $U$ , начальная энергия молекулы  $E_0 = 14,5 \text{ эв}$ , модель 1; 2) кривая 2 —  $\kappa = 0.5$ ,  $U'$ ,  $1/2 E_0$ , модель 3. Для коэффициента аккомодации тангенциального импульса  $\sigma'$  для тех же случаев получены такие результаты:

$\beta = 15^\circ$	$30^\circ$	$45^\circ$	$60^\circ$	$70^\circ$	$80^\circ$	
$\sigma' = 0.100$	0.340	0.510	0.739	0.886	0.972	( $\kappa = 0.292$ )
$\sigma' = 0.129$	0.342	0.508	0.762	0.881	0.962	( $\kappa = 0.5$ )

Сравнение полученных результатов с результатами работы [10] показывает, что наибольшее различие имеет место при больших углах падения ( $\beta > 60^\circ$ ), причем  $\alpha$  и  $\sigma$  в нашем случае в 1.5—2 раза меньше, а  $\sigma'$  — несколько больше, чем в работе [10]. Заметим, что одного только различия между плоской и пространственной задачами недостаточно для объяснения расхождений в коэффициентах аккомодации, поскольку для модели плотной упаковки твердых сфер решение плоской и пространственной задач приводит к близким результатам. Возможное объяснение заключается в следующем. В модели твердых сфер [10] радиусы атомов тела не зависят от угла падения. В модели с потенциалами атом газ приближается к поверхности на расстояние, которое определяется эквипотенциалю, соответствующей его начальной энергии. При больших углах падения нормальная компонента скорости уменьшается, и атом газа пролетает дальше от поверхности, чем в случае малых углов падения. Заметим также, что эквипотенциали, соответствующие меньшим значениям энергии, имеют более гладкий вид, чем эквипотенциали, соответствующие большим значениям энергии. Поэтому в модели с потенциалами обмен энергией и импульсом при больших углах падения меньше, чем в модели твердых сфер. Описанное изменение характера взаимодействия соответствовало бы в модели твердых сфер введению зависимости радиуса атома тела от угла падения.

Результаты расчетов, иллюстрирующие зависимость  $\alpha$ ,  $\sigma$  и  $\sigma'$  от параметра  $a$  (или  $\eta$ ), приведены в таблице для моделей 1 и 2 (потенциал взаимодействия  $U$ , началь-

ная энергия  $E_0 = 14.5 \text{ эв}$ ;  $\kappa = 0.292$  — для модели 1 и  $\kappa = 0.3$  — для модели 2).

$\beta = 15^\circ$	$30^\circ$	$45^\circ$	$60^\circ$	$70^\circ$	$80^\circ$
Модель 1					
$\alpha = 0.632$	0.523	0.426	0.219	0.105	0.031
$\sigma = 0.536$	0.543	0.516	0.475	0.328	0.158
$\sigma' = 0.100$	0.340	0.510	0.739	0.886	0.972
Модель 2					
$\alpha = 0.618$	0.518	0.424	0.185	0.083	0.031
$\sigma = 0.552$	0.539	0.524	0.426	0.307	0.144
$\sigma' = 0.160$	0.390	0.526	0.793	0.903	0.974

Из таблицы видно, что уменьшение  $a$  (увеличение  $\eta$ ) влияет на коэффициенты аккомодации так же, как увеличение угла падения. Наибольшие различия в значениях коэффициентов аккомодации будут для  $\sigma'$  при малых углах падения  $\beta$  ( $15^\circ$  и  $30^\circ$ ).

3. Взаимодействие молекулы с поверхностью. Рассмотрим теперь столкновение молекулы с поверхностью на основе описанной выше модели для того, чтобы определить влияние внутренних степеней свободы на коэффициенты обмена энергией и импульсом. Возможность возникновения неупругих потерь при столкновении молекулы с поверхностью была установлена в работах [1, 11].

а) Для определения параметров взаимодействия атомов, входящих в молекулу с каким-либо другим атомом, будем исходить из следующего предположения: потенциал взаимодействия молекулы с третьим атомом  $U$  есть сумма потенциалов взаимодействия атомов, входящих в молекулу, с третьим атомом, причем эта сумма осреднена по ориентациям молекулы, т. е.

$$U = \langle 2 U^* \rangle \quad (3.1)$$

Здесь  $U^*$  — потенциал взаимодействия атома молекулы с третьим атомом, а скобки  $\langle \rangle$  означают осреднение по ориентациям молекулы. Для определения трех параметров потенциала  $U^*$ , вид которого описывается функцией Морзе (1.1), необходимы три условия, которые могут быть следующими:

1) При расстоянии  $r$  между центром молекулы и третьим атомом, равном  $b$ ,  $\langle 2 U^* \rangle|_{r=b} = -D$ .

2) При  $r = b$  производная от  $\langle 2 U^* \rangle$  по  $r$  равна нулю.

3) При  $r = b - c^{-1} \ln 2$  имеем  $\langle 2 U^* \rangle = 0$ .

Заметим, что условия сопряжения потенциалов  $U$  и  $\langle 2 U^* \rangle$  сформулированы на достаточно большом расстоянии между центром молекулы и третьим атомом, где короткодействующие силы не стали еще определяющими. Разрешая эти условия, получаем следующие значения параметров потенциала Морзе для взаимодействия атомов:

1) N — Mo-взаимодействие ( $U_1^*$ ):

$$D_1^* = 0.0593 \text{ эв}; c_1^* = 1.5356 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}; b_1^* = 3.3226 \text{ \AA}$$

2) N — Fe-взаимодействие ( $U_2^*$ ):

$$D_2^* = 0.0419 \text{ эв}; c_2^* = 1.4734 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}; b_2^* = 3.2642 \text{ \AA}$$

Напомним, что параметры потенциала взаимодействия молекулы  $N_2$ , рассматриваемой как целое, с атомами Mo и Fe были определены в п. 2 (потенциалы  $U$  и  $U'$ ).

б) Результаты расчетов. Определим коэффициенты обмена энергией и импульсом. Обозначим через  $\alpha'$  отношение поступательной энергии центра масс молекулы после столкновения  $E'$  к начальной поступательной энергии  $E_0$

$$\alpha' = E' / E_0 \quad (3.2)$$

Долю начальной энергии молекулы, перешедшую в энергию внутреннего движения, обозначим через  $\alpha^*$

$$\alpha^* = \frac{T + U^+ - U_0}{E_0} \quad (3.3)$$

Здесь  $T$  — кинетическая энергия относительного движения атома в молекуле,  $U_0$  и  $U^+$  — потенциальные энергии атомов в молекуле до и после столкновения. Коэффициенты обмена нормальной  $\sigma$  и тангенциальной  $\sigma'$  составляющими импульса определим, как и для атома,

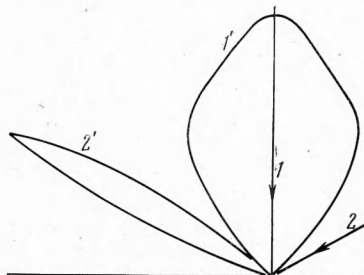
$$\sigma = \frac{v_n}{v_0}, \quad \sigma' = \frac{v_\tau}{v_0} \quad (3.4)$$

Здесь  $v_n$  и  $v_\tau$  — нормальная и тангенциальная компонента скорости центра масс молекулы после столкновения,  $v_0$  — абсолютная величина скорости молекулы до столкновения. Заметим, что определение коэффициентов обмена, данное в формулах (3.2), (3.3), справедливо только для случая, когда молекула после столкновения с



поверхностью продолжает существовать как единое образование. В случае же диссоциации или адсорбции одного или двух атомов молекулы определение коэффициентов следует изменить (см. [1]). Долю энергии, переданную телу, определим через коэффициент  $\alpha$

$$\alpha = 1 - \alpha' - \alpha^* \quad (3.5)$$



Фиг. 4

При взаимодействии молекулы азота с решеткой молибдена (модель 1) получены следующие значения коэффициентов обмена ( $E_0 = 14.5 \text{ эв}$ ;  $\kappa = 0.292$ ):

$$\begin{aligned} \beta = 0^\circ - \langle \alpha' \rangle &= 0.270; & \langle \alpha^* \rangle &= 0.091; & \langle \alpha \rangle &= 0.639; & \langle \sigma \rangle &= 0.468 \\ \beta = 30^\circ - \langle \alpha' \rangle &= 0.396; & \langle \alpha^* \rangle &= 0.138; & \langle \alpha \rangle &= 0.466; & \langle \sigma \rangle &= 0.503; & \langle \sigma' \rangle &= 0.307 \\ \beta = 60^\circ - \langle \alpha' \rangle &= 0.763; & \langle \alpha^* \rangle &= 0.056; & \langle \alpha \rangle &= 0.181; & \langle \sigma \rangle &= 0.422; & \langle \sigma' \rangle &= 0.758 \end{aligned}$$

При взаимодействии молекулы с решеткой железа (модель 3,  $E_0 = 7.25 \text{ эв}$ ,  $\kappa = 0.5$ ) получены такие результаты:

$$\beta = 0^\circ; \quad \langle \alpha' \rangle = 0.155; \quad \langle \alpha^* \rangle = 0.059; \quad \langle \alpha \rangle = 0.786; \quad \langle \sigma \rangle = 0.336$$

В обоих случаях молекулы до столкновения находятся в основном состоянии. В случае взаимодействия молекулы с моделью 1 закон сохранения выполнялся с хорошей точностью; для модели 3 в связи с большими возмущениями, вызываемыми в решетке, закон сохранения энергии выполнялся с меньшей точностью ( $\sim 2\%$ ).

Сравнение результатов взаимодействия молекулы с поверхностью с результатами взаимодействия атомов с поверхностью показывает, что изменения в  $\langle \sigma \rangle$  и  $\langle \sigma' \rangle$  не превышают 12%, максимальные различия в  $\langle \alpha \rangle$  имеют место при  $\beta = 60^\circ$  и равны 20%. Для модели 3 ( $N_2 - Fe$ ) при нормальном падении различия в  $\langle \alpha \rangle$  и  $\langle \sigma \rangle$  составляют 6,5 и 3,5% соответственно.

На фиг. 4 изображены индикатриссы рассеяния молекул, построенные для углов падения  $\beta = 0^\circ$  (кривая 1) и  $\beta = 60^\circ$  (кривая 2) по 132 траекториям для каждого угла падения (модель 1,  $E_0 = 14.5 \text{ эв}$ ).

Автор благодарит М. Н. Когана и В. С. Галкина за обсуждение настоящей работы.

Поступила 13 X 1966

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Ерофеев А. И. О взаимодействии молекул с поверхностью твердого тела. ПМТФ, 1966, № 3.
2. O m a n R. A., B o g a n A., W e i s e r G., L i C. Interaction of gas molecules with an ideal cristal surface. AIAA — Journal, 1964, vol. 2, No. 10.
3. П я р н п у А. А. О вычислении коэффициентов аккомодации. Инж. ж. 1965, т. 5, № 5.
4. G i r i f a l c o L. A., W e i s e r V. G. Application of the Morse potential function to cubic metals. Phys. Rev., 1959, vol. 114, No. 3.
5. M a s o n E. A. Forces between unlike molecules and properties of gaseous mixtures. J. Chem. Phys., 1955, vol. 23, No. 1.
6. G o o d m a n F. O. On the theory of accomodation coefficients — III. Classical perturbation theory for the thermal accomodation of light gases. J. Phys. Chem. solids, 1963, vol. 24, No. 12.
7. B r e w e r L. The chemistry and metallurgy of miscellaneous materials, vol. 19B, No. 3.
8. К и т т е л ь Ч. Введение в физику твердого тела. Физматгиз, М., 1962.
9. K o n o v a l o w D. D., H i r s c h f e l d e r J. O. Intermolecular potential function for nonpolar molecules. Phys. Fluids, 1961, vol. 4, No. 5.
10. Б а р а н ц е в Р. Г. Схема изолированного отражения атомов газа от твердой поверхности. Сб. Аэродинамика разреженных газов. Изд. ЛГУ, 1965, т. 2.
11. Л е о н а с В. Б. Об обмене энергией при столкновении молекул с твердой стенкой. ПМТФ, 1965, № 3.