

РАСЧЕТ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МОНОЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ПУЧКА АТОМОВ ГАЗА С ТРЕХМЕРНЫМ КРИСТАЛЛОМ

А. А. Пярину (Москва)

Количество работ, посвященных теоретическому исследованию процессов взаимодействия атомов (и молекул) газа с твердой поверхностью, в последнее время интенсивно увеличивается. Особое место среди них занимают так называемые численные эксперименты на быстродействующих электронных машинах, так как эти эксперименты позволяют исследовать явление при различных наборах параметров взаимодействия, оценить качественное их влияние на исследуемый процесс и отобрать результаты при тех параметрах, которые будут соответствовать физическому эксперименту.

На объем вычислений главным образом влияют размерность и величина блока атомов твердого тела, участвующих в столкновении с атомом газа. В связи с этим приобретают определенный вес также модели достаточно грубого приближения, например одномерные [1,2], двумерные [3], с парным взаимодействием [4,5], трехмерные с нормальным взаимодействием [6,7] и трехмерные с наклонным и нелобовым взаимодействием, но с ограниченным блоком [7,8]. В частности, на основе этих работ удалось выяснить степень влияния тех или иных факторов на акт взаимодействия, что было использовано в исследованиях, граничащих с почти точной постановкой задачи [8-10]. Тем не менее динамика решетки почти во всех этих работах рассматривается в гармоническом приближении и лишь в немногих из них первый атом решетки [1,7] или все атомы [3] (в двумерном случае) связаны с соседними либо потенциалом Леннарда — Джонса, либо потенциалом Морзе.

В численном эксперименте, которому посвящено данное сообщение, ставилась, наряду с конкретным вычислением коэффициентов аккомодации как функций параметров взаимодействия, задача исследования влияния характера связи атомов в решетке на процесс взаимодействия. В качестве потенциальной функции связи в решетке принят потенциал Морзе с параметрами, выбранными в соответствии с реальными свойствами решеток различных материалов (Fe, Mo, W). Молекула азота (N_2) взаимодействует с решеткой по закону Морзе или Леннарда — Джонса, причем взаимодействие происходит с каждым атомом блока. В блоке также все атомы взаимосвязаны, т. е. каждый узел взаимодействует со всеми остальными, число которых конечно вследствие предположения ограниченности размеров блока.

Уравнения движения имеют обычный вид

$$\begin{aligned} M \frac{d^2 R_0}{dt^2} &= - \sum_{i,j,k} \frac{\partial U_1(R_0 - R_{ijk})}{\partial (R_0 - R_{ijk})} \frac{R_0 - R_{ijk}}{R_0 - R_{ijk}} = F \\ m \frac{d^2 r_{ijk}}{dt^2} &= -F + \sum_{i \neq j \neq k} \frac{\partial U(\rho_{ijk}^{ijk})}{\partial \rho_{ijk}^{ijk}} \frac{\rho_{ijk}^{ijk}}{\rho_{ijk}^{ijk}} \\ R_{ijk} &= A_{ijk} + r_{ijk}, \quad \rho_{ijk}^{ijk+1} = R_{ijk} - R_{ijk+1} \end{aligned}$$

в правые части которых входят потенциалы Леннарда — Джонса и Морзе

$$\begin{aligned} U_1(R) &= 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{R} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{R} \right)^6 \right] \\ U(r) &= D [e^{-2c(r-b)} - 2e^{-c(r-b)}] \end{aligned}$$

Здесь R_0 — радиус-вектор атома газа, A_{ijk} — радиус-вектор узла решетки в положении равновесия, r_{ijk} — смещение из этого положения, M , m — массы атомов газа и решетки соответственно, ε , σ , D , c , b — параметры потенциалов.

При обезразмеривании уравнений и переменных использовано характерное время t° , за которое выбрано отношение R_0° / v° , где R_0° и v° — расстояние от начала координат и скорость атома газа в момент времени $t = 0$. Далее полагаем $t = \tau t^\circ$, $R_{ijk} = \rho_{ijk} \sigma$, $M = \mu m$, $R_0 = \rho_0 \sigma$, шаг решетки

$$\begin{aligned} a &= \alpha \sigma, & v^{\circ 2} &= v^2 \varepsilon \mu / M \\ D &= \delta \varepsilon, & b &= \beta \sigma, & \gamma &= c \sigma, & U_1 &= 24 \omega_1 \varepsilon, & U &= 2 \omega D c \sigma. \end{aligned}$$

Правые части уравнений движения будут тогда содержать в зависимости от t потенциала производные

$$\frac{d\omega_1}{d\rho} = \frac{1}{\rho^7} - \frac{2}{\rho^{13}}, \quad \text{или} \quad \frac{d\omega}{d\rho} = e^{-\gamma(\rho-\beta)} - e^{-2\gamma(\rho-\beta)}$$

умноженные на безразмерные коэффициенты

$$K_0 = 24 \rho^{\circ 2} / \mu v^2, \quad K_1 = 24 \rho^{\circ 2} / v^2, \quad K_2 = 2 \delta \gamma \rho^{\circ 2} / v^2$$

в случае внешнего потенциала Леннарда — Джонса и внутреннего потенциала Морзе и на коэффициенты

$$K_0 = 2 \delta_1 \gamma_1 \rho^{\circ 2} / \mu v^2, \quad K_1 = 2 \delta_1 \gamma_1 \rho^{\circ 2} / v^2, \quad K_2 = 2 \delta \gamma \rho^{\circ 2} / v^2$$

если внешний потенциал тоже типа Морзе (индекс 1 относится к внешнему потенциалу). Исходя из реальных значений остальных параметров, имеем $K_0 \sim 10^{-1}$, $K_1 \sim 10^{-2}$, $K_2 \sim 10^{-4}$. В расчетах, где не конкретизировались взаимодействующие атомы и решетка, качественные результаты были получены для следующих значений параметров: $\alpha = 0.8, 1.0, 1.2$; $\mu = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$; $v^0 = 6, 8, 10, 12, 14$ км/сек (безразмерный параметр v , значения которого даны в табл. 1, зависит от μ). Остальные параметры приведены в табл. 2.

Таблица 1

μ	$v^0 = 6$	$v^0 = 8$	$v^0 = 10$	$v^0 = 12$	$v^0 = 14$
0.1	114.8	153.1	191.3	229.6	267.9
0.3	66.3	88.4	110.5	132.6	154.6
0.5	51.3	68.4	85.5	102.7	119.8
0.7	43.4	57.8	72.3	86.8	101.2
0.9	38.3	51.0	63.8	76.5	89.3

Таблица 2

	δ	β	γ	δ_1	β_1	γ_1	μ	α
$N_2 - Fe$	150.0	0.800	6.124	8.71	0.930	5.402	0.500	0.773
$N_2 - W$	365.0	0.676	11.100	63.00	0.405	18.500	0.152	0.853
$N_2 - Mo$	238.0	0.880	5.237	8.69	0.990	5.301	0.292	0.849

В некоторых оценочных расчетах глубина внешней потенциальной ямы принималась больше приведенной в табл. 2 (например, $\delta = 0.015$ и 1.50).

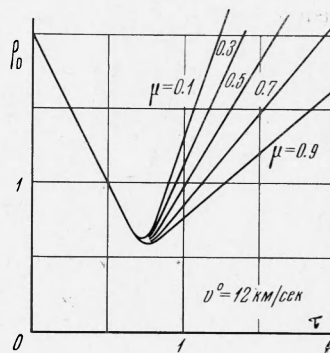
В начальный момент времени ($\tau = 0$) равны нулю как смещения из положений равновесия, так и скорости всех атомов решетки. Мишень представляет собой квадратную площадку вокруг начального атома со стороной α , внутри которой точки цели (ξ^* , η^*) распределены равномерно. Взаимодействие начинается с расстояния по вертикальной координате $\zeta = 2$, так что составляющие радиус-вектора атома газа ρ_0 в начальный момент определяются соотношениями

$$\xi^* + \zeta^* \operatorname{tg} \vartheta \cos \varphi, \quad \eta^* + \zeta^* \operatorname{tg} \vartheta \sin \varphi,$$

$$\rho_0 \cos \vartheta = \zeta^* = 2$$

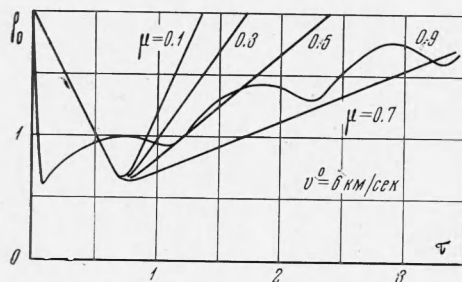
где углы ϑ и φ определяют положение вектора скорости атома газа в пространстве ($\vartheta = 0 \div 1/2 \pi$, $\varphi = 0 \div 2\pi$). Каждую мишень пронизывает 625 траекторий (25 точек цели на 25 ориентаций вектора скорости).

Система уравнений решалась на ЭВМ БЭСМ-3М методом Рунге — Кутты. Программа, составленная на языке АЛГОЛ-60, предусматривала как выдачу параметров отдельных траекторий и индивидуальных коэффициентов аккомодации энергии и импульсов, так и осредненных коэффициентов. Время счета одного варианта (25 траекторий) порядка 25—30 мин. Отражение определялось по выходу частицы газа на контрольный уровень ($\zeta = 2$), временный захват контролировался тем, что вертикальная координата не становилась отрицательной, а захват или полное поглощение — тем, что вертикальная координата сохранялась отрицательной и за пределами мишени. В расче-

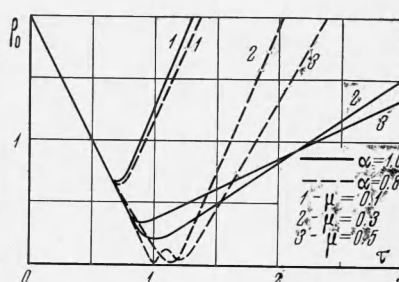


Фиг. 1

тах ограничивались блоком атомов $3 \times 3 \times 2 + 1$. Контрольные расчеты проводились и для большего блока, однако результаты различались очень мало, а время счета увеличивалось примерно вдвое.

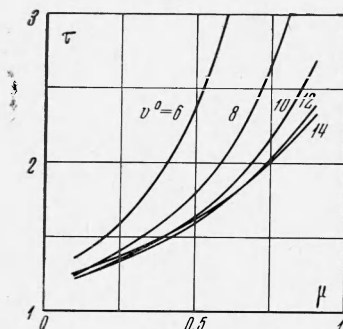


Фиг. 2



Фиг. 3

Некоторые траектории при нормальном падении, характерные для взаимодействия при различных наборах параметров с внешним потенциалом Леннарда — Джонса и внутренним Морзе, приведены на фиг. 1, 2, 3. Сравнение траекторий на каждой из них показывает, как меняется время взаимодействия в зависимости от отношения масс, с одной стороны, и от величины начальной скорости атома газа, с другой.

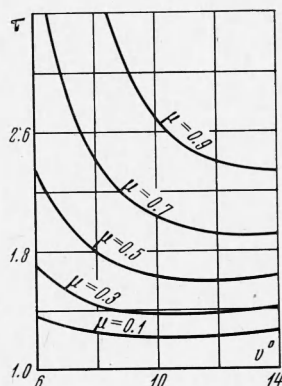


Фиг. 4

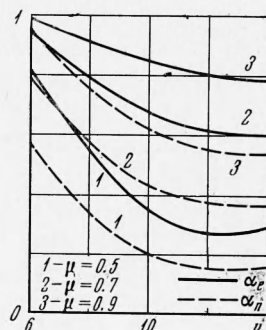
Типичная траектория с временным захватом приведена при $\mu = 0.9$ и $v^0 = 6$ км/сек на фиг. 2. Зависимость от шага решетки в случае $v^0 = 6$ км/сек отражена на фиг. 3. Заметим, что в случае $\alpha = 1.0$ (штриховые кривые) возможен временный захват; при прочих равных условиях этого нет в случае более плотной решетки ($\alpha = 0.8$, сплошные кривые). Кривые 1, 2, 3 на фигуре соответствуют значениям $\mu = 0.1, 0.3, 0.5$. Как правило, тяжелые атомы временно захватываются.

Представляет интерес сравнение времен столкновений в зависимости от начальной скорости и отношения масс. Соответствующие кривые приведены на фиг. 4, 5.

Расчеты показали устойчивую тенденцию к уменьшению коэффициентов аккомодации энергии α_e и нормального импульса α_n с увеличением начальной скорости, что наглядно иллюстрирует фиг. 6. Увеличение коэффициентов аккомодации происходит



Фиг. 5



Фиг. 6

также с увеличением отношения масс. Если в качестве внешнего потенциала взята функция Морзе, то при $\alpha = 1.0$ для тяжелых атомов зависимость коэффициентов аккомодации от μ слабая (фиг. 7), а в случае более плотной решетки ($\alpha = 0.8$) эта зависимость почти линейная. Величины коэффициентов аккомодации при трех значениях плот-

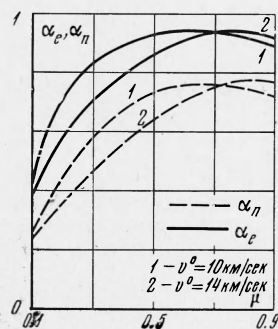
ностей решетки ($\alpha = 0.8, 1.0, 1.2$) и нескольких значениях начальной скорости приведены в табл. 3. Из сравнения этих величин следует, что нет ярко выраженной зависимости от плотности упаковки и коэффициенты аккомодации в целом достаточно близки по своим значениям для различных α .

Таблица 3

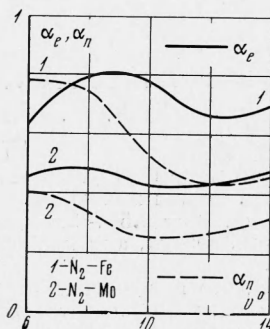
α	μ	$v^\circ = 10$		$v^\circ = 12$		$v^\circ = 14$	
		α_e	α_n	α_e	α_n	α_e	α_n
0.8	0.1	0.301	0.164	0.341	0.188	0.356	0.198
	0.3	0.476	0.277	0.562	0.338	0.600	0.361
	0.5	0.648	0.415	0.720	0.477	0.719	0.471
	0.7	0.795	0.550	0.846	0.608	0.800	0.571
	0.9	0.925	0.700	0.937	0.730	0.895	0.678
1.0	0.1	0.380	0.213	0.388	0.218	0.385	0.216
	0.3	0.720	0.478	0.702	0.458	0.702	0.455
	0.5	0.928	0.700	0.874	0.656	0.854	0.625
	0.7	0.935	0.760	0.927	0.730	0.935	0.759
	0.9	0.826	0.708	0.900	0.710	0.924	0.786
1.2	0.1	0.360	0.200	0.361	0.201	0.367	0.205
	0.3	0.669	0.430	0.646	0.406	0.665	0.422
	0.5	0.835	0.613	0.821	0.579	0.812	0.568
	0.7	0.935	0.745	0.945	0.740	0.922	0.724
	0.9	0.960	0.840	0.995	0.870	0.990	0.850

На фиг. 8 приведены коэффициенты α_e и α_n для пар $N_2 - Fe$ и $N_2 - Mo$. В обоих случаях в качестве внешнего потенциала использована функция Морзе.

Сравнение полученных результатов с аналогичными результатами для гармонической решетки показывает, что решетка с экспоненциальным потенциалом взаимодействия является более мягкой и допускает проникновение атомов газа или, в лучшем случае, их задержку на поверхности (образование адсорбционного слоя) практически при всех отношениях масс и значениях начальной энергии за исключением чисто лобовых столкновений.



Фиг. 7



Фиг. 8

Время взаимодействия увеличивается, однако контрольные расчеты показали, что размеры блока, который с заданной точностью участвует в столкновении, не изменяются. Общая тенденция — увеличение коэффициентов аккомодации по сравнению с их значениями для гармонической решетки.

Например, осредненные коэффициенты аккомодации, полученные для решетки Fe со связями Морзе и внешним потенциалом N_2-Fe Морзе для скоростей $v^\circ = 6$ и 8 и $\vartheta = 15^\circ$, имеют соответственно значения $\alpha_e = 0.371$ и 0.327 , $\alpha_n = 0.213$ и 0.180 , а коэффициент аккомодации касательного импульса $\alpha_\tau = 0.128$ и 0.177 . Эти значения отличаются от коэффициентов аккомодации, вычисленных для гармонической решетки, которая рассматривалась, в частности, и в [8], лишь на несколько процентов.

Расчет для кристалла с упругими силами взаимодействия для рассмотренного выше варианта дает $\alpha_e = 0.352$ и 0.327 , $\alpha_n = 0.196$ и 0.169 , $\alpha_t = 0.119$ и 0.169 . Зависимость же коэффициентов аккомодации от потенциала газ — поверхность более сильная. Соответствующие значения коэффициентов аккомодации для варианта N_2 -Fe, но с внешним потенциалом Леннарда — Джонса, следующие: $\alpha_e = 0.542$ и 0.465 , $\alpha_n = 0.282$ и 0.203 , $\alpha_t = 0.171$ и 0.175 .

Безусловно, определение количественных критериев справедливости гармонического приближения динамики решетки потребовало бы детального просчета по множеству параметров. Проведены были лишь контрольные варианты этих расчетов, из которых и следует приведенный выше качественный вывод. Учитывая, что время счета для ангармонической решетки намного больше, чем для гармонической, а результаты не столь существенно отличаются от имеющихся, представляется нецелесообразным количественное увеличение численных расчетов в этой области до тех пор, пока нет хороших полуэмпирических потенциалов взаимодействия или надежных экспериментальных результатов для оправдания достаточно больших затрат машинного времени.

Поступила 5 IX 1969

ЛИТЕРАТУРА

1. Леонас В. Б. Об обмене энергией при столкновении частиц с твердой стенкой. ПМТФ, 1963, № 6.
2. Пярнпуу А. А. О столкновении атомов с кристаллической поверхностью. Ж. вычислит. матем. и матем. физ., 1967, т. 7, № 3.
3. Ерофеев А. И. Об обмене энергией и импульсом между атомами и молекулами газа и поверхностью твердого тела. ПМТФ, 1967, № 2.
4. Баранцев Р. Г. Схема изолированного отражения атомов газа от твердой поверхности. В сб.: «Аэродинамика разреженных газов», Изд-во ЛГУ, 1965, стр. 253—271.
5. Пярнпуу А. А. О взаимодействии потока газа с твердой стенкой. Инж. ж., 1965, т. 5, вып. 3.
6. Goodman F. O. The dynamics of simple cubic lattices 1. Applications to the theory of thermal accommodation coefficients. J. Phys. Chem. Solids, 1962, vol. 23, No. 9.
7. Пярнпуу А. А. О вычислении коэффициентов аккомодации. Инж. ж., 1965, т. 5, вып. 5.
8. Рыжов Ю. А., Стриженов Д. С. О взаимодействии атомов с поверхностью твердого тела. ПМТФ, 1967, № 4.
9. Oman R. A., Bogdan A., Weiser G. H., Li C. H. Interaction of gas molecules with an ideal crystal surface, AIAA Journal, 1964, vol. 2, No. 10.
10. Пярнпуу А. А. К теории взаимодействия разреженного газа с поверхностью. ПМТФ, 1968, № 5.

ГАЗОСОДЕРЖАНИЕ ПЕННОГО СЛОЯ ПРИ ПОНИЖЕННЫХ ДАВЛЕНИЯХ

А. Н. Хозе, Ю. И. Шаров

(Новосибирск)

Приводятся некоторые результаты экспериментального исследования газосодержания пенного слоя. Опыты выполнены в колонне сечением 50×80 мм² при давлении $P = 0.1 \div 1.0$ бар, $W = 0.5 \div 2.0$ м/сек, $H = 140 \div 180$ мм. Газовой фазой во всех экспериментах был воздух, а жидкой фазой — вода, водные растворы этилового спирта и глицерина.

Установлено, что при понижении давления газосодержание пенного слоя значительно уменьшается, что приводит к возрастанию высоты исходного слоя жидкости h_0 .

Получена формула газосодержания, согласующаяся с опытными данными с точностью $\pm 10\%$.

Как показали исследования [1-3], высокая эффективность работы теплообменных поверхностей в слое газо-жидкостной пены при относительно небольших расходах газа и жидкости определяет целесообразность создания компактных пенных теплообменников.

Для конструирования таких теплообменников необходимо знать среднее газосодержание пенного слоя, которое определяет высоту исходного слоя жидкости, обеспечивающую покрытие трубного пучка пеной при данной скорости газа в свободном сечении колонны W .

Для барботажного режима при давлении $P = 1 \div 40$ бар такие закономерности и расчетные формулы в настоящее время имеются [2,4,5].

В этой работе приведены данные по исследованию газосодержания пенного слоя при развитом пенном режиме ($W = 0.5 \div 2.0$ м/сек), давлениях от 0.1 до 1.0 бар и от-