

4. МОДЕЛИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГАЗ - ТВЕРДОЕ ТЕЛО

В этой части пособия будут рассмотрены модели, лежащие в основе описания процессов адсорбции – десорбции и переноса энергии и импульса молекул в системе газ – твердое тело.

4.1. Обобщенная модель взаимодействия

При соударении молекулы газа с поверхностью твердого тела происходят процессы, которые можно представить в виде схемы, изображенной на рис. 4.1. Здесь и далее мы будем пользоваться термином «молекула», подразумевая при этом все частицы, существующие в газовой фазе, в том числе и атомы [3].

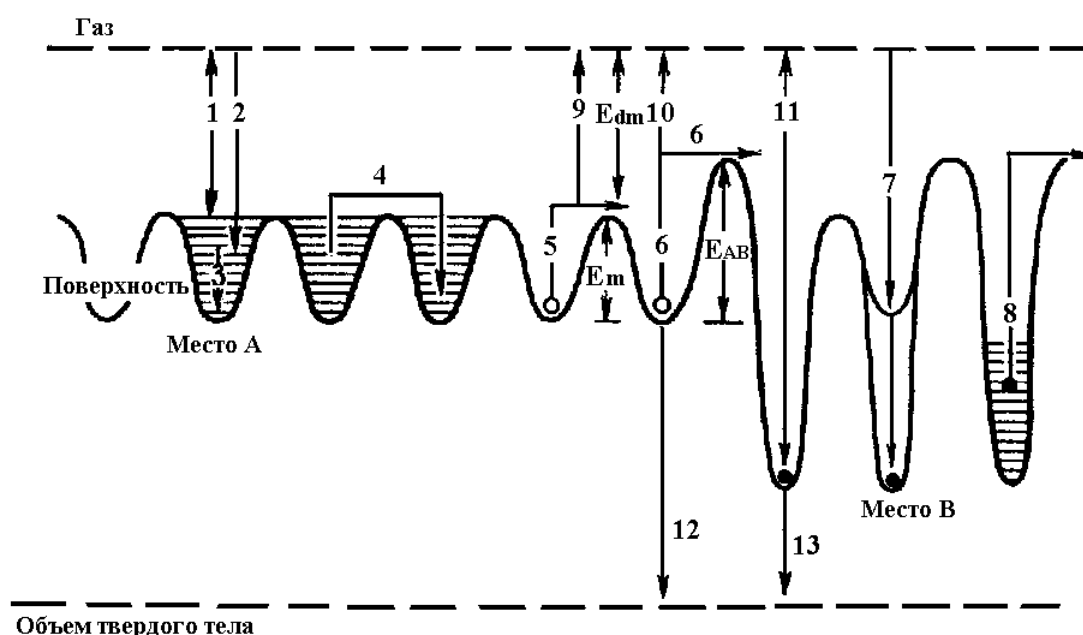


Рис. 4.1. Схема процессов взаимодействия частиц газа с твердым телом

1. Молекула претерпевает упругое рассеяние и возвращается в газовую фазу. Как и при упругом рассеянии электронов, этот процесс может привести к эффектам дифракции.

2. Молекула передает твердому телу часть своей кинетической энергии и оказывается удержанной центром слабой адсорбции. Это состояние (А) соответствует самым мелким потенциальным ямам и называется физической адсорбцией. При этом происходит процесс обмена энергией между твердым телом и ударяющейся о него молекулой и этот процесс называют аккомодацией.

3. Молекула первоначально удерживается твердым телом в состоянии А, связь между молекулой и поверхностью колебательно возбуждена, но при дальнейшем обмене энергией с твердым телом молекула может оказаться на нижнем уровне потенциальной ямы.

4. Молекула может попасть на нижний уровень потенциальной ямы А не при первичном столкновении с поверхностью, как в случае 3, а перепрыгнув на соседний центр и потеряв при этом энергию возбуждения.

5. Молекула, находящаяся на нижнем уровне потенциальной ямы А, может переместиться к соседнему центру А, получив от кристаллической решетки тепловую энергию, достаточную для преодоления энергетического барьера E_m .

6. Если на поверхности имеется второе состояние В с более высокой энергией связи, соответствующее хемосорбции, то молекула соседнего центра А может переместиться в состояние В, получив энергию активации E_{AB} . В этом случае состояние А является подвижным предшественником состояния В.

7. Состояния А и В могут располагаться практически в одной и той же точке поверхности и молекула, попадая в состояние А из газовой фазы, может перейти прямо в состояние В без перемещений по поверхности. Такой процесс рассматривался ранее (см. 2) при описании имеющего место в процессе взаимодействия водорода с металлом перехода от физической адсорбции к слабой хемосорбции. В этом случае состояние А называют неподвижным предшественником состояния В.

8. При образовании прочных хемосорбционных связей молекул адсорбата с поверхностью освобождается большое количество энергии, которая, как и для описанной выше стадии 4, не поглощается полностью тем центром В, на котором произошла первоначальная хемосорбция. Тогда молекула будет диффундировать из одного состояния В другое до тех пор, пока не передаст кристаллической решетке достаточное количество энергии, чтобы задержаться на определенном центре.

9. Молекула может десорбироваться. В данном случае имеет место десорбция десорбция в ходе диффузии (или миграции). При этом молекуле требуется энергия активации E_{dm} .

10. Десорбция из состояния А с энергией активации E_{dA} .

11. Десорбция из состояния В с энергией активации E_{dB} .

12. Перемещение молекулы из состояния А в объем твердого тела с образованием трехмерного соединения с адсорбентом.

13. То же из состояния В.

На перечисленные выше стадии могут влиять взаимодействия между адсорбированными частицами, которые мы считали независимыми друг от друга.

Теоретического описания всех перечисленных стадий на данный момент нет. Однако имеются достаточно развитые модели первичного соударения молекулы газа с поверхностью. Некоторые из них будут рассмотрены ниже.