

4.3. Континуальная модель взаимодействия

Наиболее простой является модель, основанная на представлении о том, что потенциал взаимодействия газ – поверхность является «плоским», т.е. атом газа ведет себя так, как будто поверхность твердого тела представляет собой плоскую поверхность континуума. При этом выражение для потенциала взаимодействия может быть записано в виде интеграла, который иногда берется аналитически.

Если твердое тело идеально в том смысле, что решетка идеально периодична в направлениях x , y (рис. 4.6), то $V(r)$ можно разложить в ряд Фурье.

Положим $\vec{r} = (x, y, z) = (\vec{R}, z)$, тогда

$$V(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}}(z) \exp(i\vec{G}\vec{R}), \quad (4.13)$$

где \vec{G} - двумерные векторы обратной решетки для поверхности.

$$\vec{G} = \left(\frac{2\pi}{a} n, \frac{2\pi}{b} k \right); \quad n, k = 1, 2, 3, \dots, \quad (4.14)$$

a и b - параметры решетки в направлениях x и y . В случае континуальной модели периодичность поверхности пропадает и единственным вектором обратной решетки остается $\vec{G} = 0$, так что

$$V(\vec{r}) = V_0(z) = V_{const}(z), \quad (4.15)$$

где z измеряется от поверхности сплошной среды. Таким образом, мы получаем нулевой член Фурье – разложения.

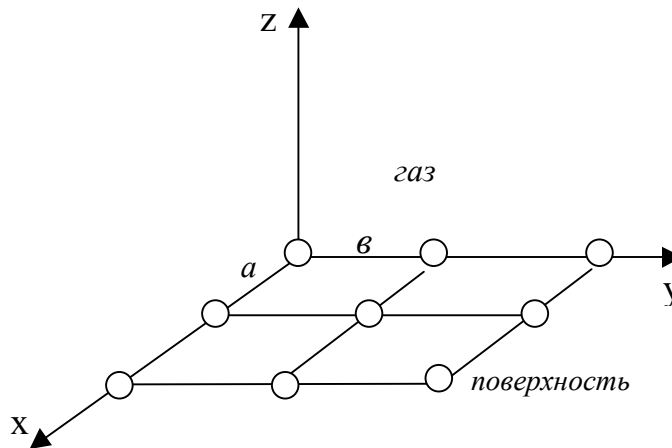


Рис. 4.6. К представлению о континуальной модели

Атом твердого тела считается «размазанным» по кубу со стороной a и объемом a^3 (атомный объем исходной решетки). Не трудно показать, что в сферической системе координат после интегрирования по углам выражение для $V_0(z)$ будет иметь вид

$$V_0(z) = V_{const}(z) = \frac{2\pi}{a^3} \int_z^\infty (r^2 - zr) U(r) dr, \quad (4.16)$$

где $U(r)$ - парный потенциал взаимодействия.

Для потенциала Леннарда –Джонса 6 – 12 легко получить

$$V_{const}(z) = \frac{W}{2} \left[\left(\frac{z_0}{z} \right)^9 - 3 \left(\frac{z_0}{z} \right)^3 \right], \quad (4.17)$$

где $\frac{W}{r_0} = \left(\frac{5^{1/2} \pi}{9} \right) \cdot \left(\frac{r_0}{a} \right)^3$; $\frac{z_0}{r_0} = 5^{-1/6}$.

Полученный закон обратной степени для взаимодействия газ – поверхность подтверждается экспериментально во многих случаях неметаллических и металлических поверхностей.