

#### 4.5. Модели жестких и мягких кубов

Несмотря на ряд допущений решеточные модели (и даже линейная цепочка) относительно сложны, а переход к более реальным моделям довольно труден. Поэтому предпринимались попытки создания математически более простых моделей. В частности, Бауле в 1914 г. первым предпринял попытку создать модель твердой поверхности. Он представил ее в виде системы невзаимодействующих твердых сфер массы  $m_s$ , первоначально находящихся в состоянии покоя, которые бомбардируются газовыми молекулами (твердыми сферами массы  $m_g$ ). Результат простого вычисления при лобовом столкновении молекулы газа и атома поверхности дает следующее выражение для коэффициента аккомодации энергии

$$\alpha_E = \frac{2\mu}{(1+\mu)^2}, \quad (4.22)$$

где  $\mu = \frac{m_g}{m_s}$  - отношение массы молекулы газа к массе атома решетки.

Чтобы учесть геометрию столкновения, ряд исследователей пересмотрели модель Бауле. В частности, был введен угол  $\theta_i$  между направлениями удара и нормалью к невозмущенной поверхности (рис.4.11). Такой учет геометрии привел к следующему результату:

$$\alpha_E = \frac{3,6\mu}{(1+\mu)^2} \cos\theta_i. \quad (4.23)$$

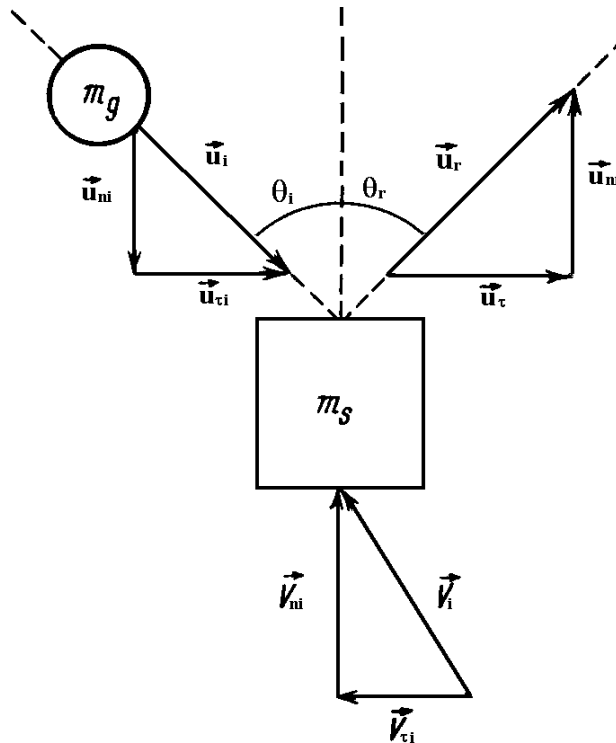


Рис. 4.11. Модель жестких кубов

Модель жестких кубов (или обобщенная теория твердых сфер), развитая на основе идей Бауле, включает следующие допущения.

1. Частица газа и поверхностный атом ведут себя как жесткие упругие сферы.

2. Потенциал взаимодействия между частицей газа и поверхностью одинаков в плоскости поверхности.

3. Поверхностные атомы представляют собой независимые частицы, окруженные прямоугольными потенциальными ямами, т.е. жесткими потенциальными ящиками. Частица газа взаимодействует с поверхностным атомом при попадании в ящик, соударяясь с частицей поверхности под углом  $\theta_i$  и отражаясь под углом  $\theta_r$ .

При этих допущениях поверхностные атомы можно представить как кубы, одна грань которых параллельна поверхности. Кубы движутся в направлении, перпендикулярном поверхности. Любая частица газа взаимодействует только с одним из этих кубов. Благодаря простоте этой системы можно сделать еще одно допущение, которое дает преимущество перед решеточной моделью.

4. Атомам поверхности можно приписать зависящее от температуры распределение по скоростям, например, одномерное распределение Максвелла, что снимает ограничение температуры решетки абсолютным нулем.

Эта модель так же имеет много ограничений, однако она достаточно проста и дает удовлетворительное согласие с экспериментом.

Согласно модели жестких кубов взаимодействие между газом и твердым телом происходит мгновенно, в действительности же время соударения конечно. Такое «мягкое» соударение вводится в модель благодаря имеющему два участка [3,7] потенциалу взаимодействия молекулы газа с поверхностью. Первый – не зависящий от расстояния потенциал притяжения, как и в модели жестких кубов, с прямоугольной потенциальной ямой. Второй – экспоненциально убывающий потенциал отталкивания, который и определяет конечное время взаимодействия (рис. 4.12).

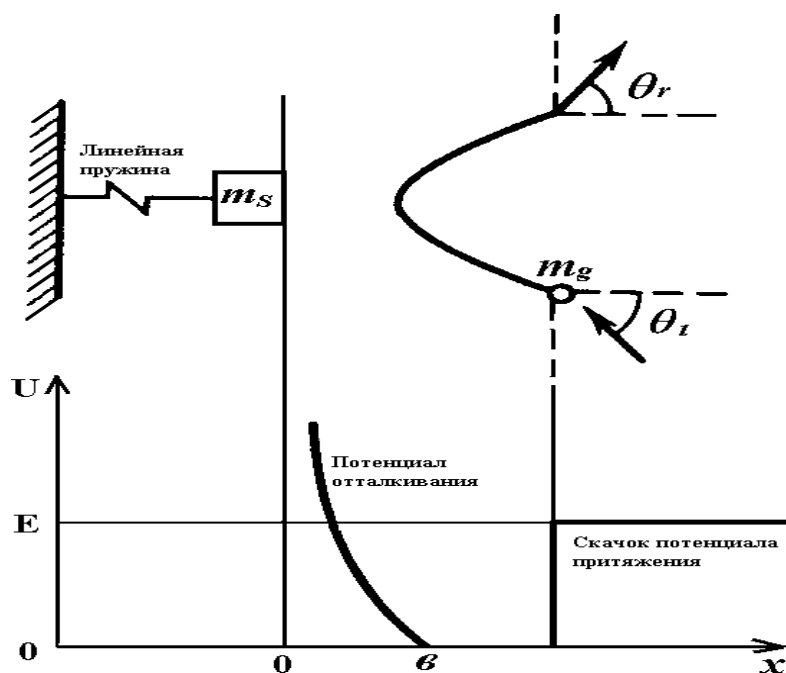


Рис. 4.12. Модель мягких кубов

В этой модели, получившей название модели мягких кубов, принимается, что поверхностный атом связан с фиксированной решеткой одной пружиной. Такое допущение, являющееся вторым главным отличием от модели жестких кубов, позволяет ввести силовую постоянную связи решетки с поверхностным атомом (аналогично модели цепочки линейных осцилляторов, где силовая постоянная, как отмечалось, может играть важную роль при описании взаимодействия).

Модель имеет три подгоночных параметра: глубину потенциальной ямы  $E$ , которую можно определить по экспериментальным теплотам адсорбции; область действия потенциала отталкивания  $b$ ; частоту осциллятора  $\omega$ , которая является функцией силовой постоянной линейной пружины и массы поверхностного атома. **4.5. Модели жестких и мягких кубов**

Несмотря на ряд допущений решеточные модели (и даже линейная цепочка) относительно сложны, а переход к более реальным моделям довольно труден. Поэтому предпринимались попытки создания математически более простых моделей. В частности, Бауле в 1914 г. первым предпринял попытку создать модель твердой поверхности. Он представил ее в виде системы невзаимодействующих твердых сфер массы  $m_s$ , первоначально находящихся в состоянии покоя, которые бомбардируются газовыми молекулами (твердыми сферами массы  $m_g$ ). Результат простого вычисления при лобовом столкновении молекулы газа и атома поверхности дает следующее выражение для коэффициента аккомодации энергии

$$\alpha_E = \frac{2\mu}{(1+\mu)^2}, \quad (4.22)$$

где  $\mu = \frac{m_g}{m_s}$  - отношение массы молекулы газа к массе атома решетки.

Чтобы учесть геометрию столкновения, ряд исследователей пересмотрели модель Бауле. В частности, был введен угол  $\theta_i$  между направлениями удара и нормалью к невозмущенной поверхности (рис.4.11). Такой учет геометрии привел к следующему результату:

$$\alpha_E = \frac{3,6\mu}{(1+\mu)^2} \cos\theta_i. \quad (4.23)$$

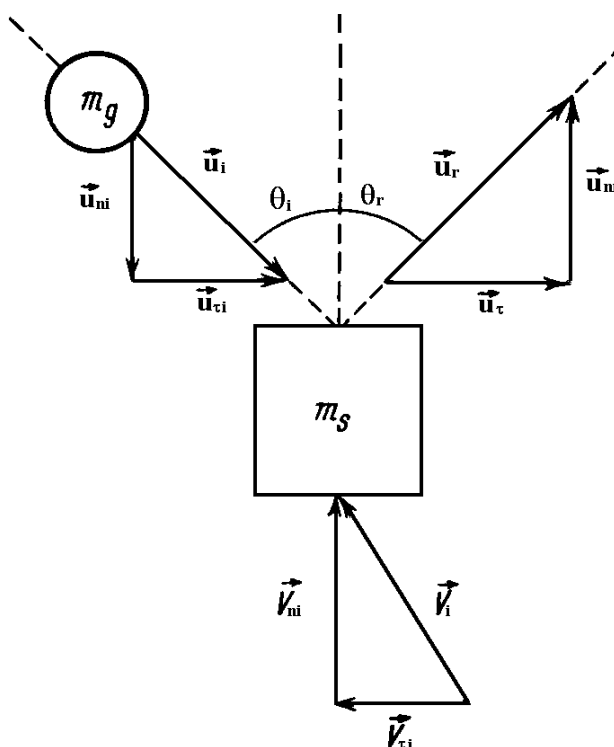


Рис. 4.11. Модель жестких кубов

Модель жестких кубов (или обобщенная теория твердых сфер), развитая на основе идей Бауле, включает следующие допущения.

1. Частица газа и поверхностный атом ведут себя как жесткие упругие сферы.
2. Потенциал взаимодействия между частицей газа и поверхностью одинаков в плоскости поверхности.
3. Поверхностные атомы представляют собой независимые частицы, окруженные прямоугольными потенциальными ямами, т.е. жесткими потенциальными ящиками. Частица газа взаимодействует с поверхностным атомом при попадании в ящик, соударяясь с частицей поверхности под углом  $\theta_i$  и отражаясь под углом  $\theta_r$ .

При этих допущениях поверхностные атомы можно представить как кубы, одна грань которых параллельна поверхности. Кубы движутся в направлении, перпендикулярном поверхности. Любая частица газа

взаимодействует только с одним из этих кубов. Благодаря простоте этой системы можно сделать еще одно допущение, которое дает преимущество перед решеточной моделью.

4. Атомам поверхности можно приписать зависящее от температуры распределение по скоростям, например, одномерное распределение Максвелла, что снимает ограничение температуры решетки абсолютным нулем.

Эта модель так же имеет много ограничений, однако она достаточно проста и дает удовлетворительное согласие с экспериментом.

Согласно модели жестких кубов взаимодействие между газом и твердым телом происходит мгновенно, в действительности же время соударения конечно. Такое «мягкое» соударение вводится в модель благодаря имеющему два участка [3,7] потенциалу взаимодействия молекулы газа с поверхностью. Первый – не зависящий от расстояния потенциал притяжения, как и в модели жестких кубов, с прямоугольной потенциальной ямой. Второй – экспоненциально убывающий потенциал отталкивания, который и определяет конечное время взаимодействия (рис. 4.12).

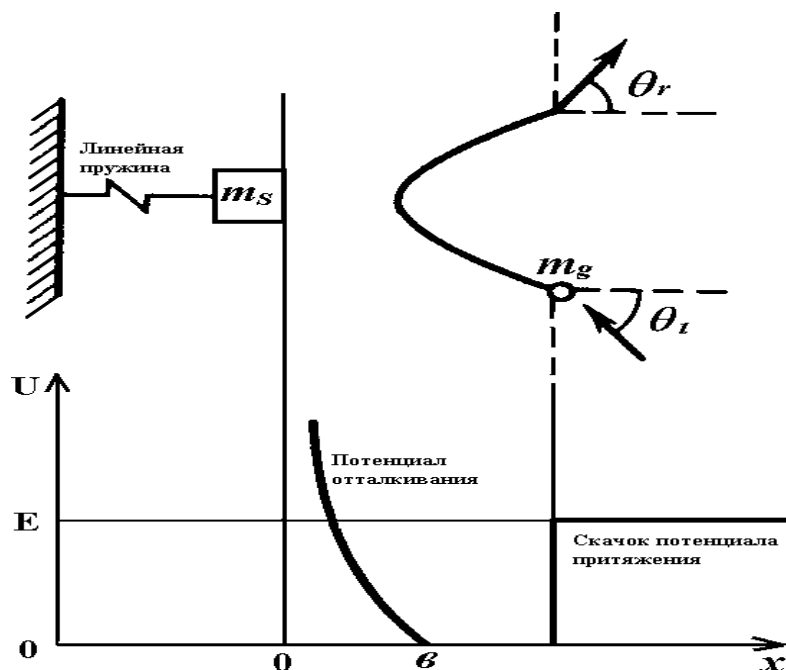


Рис. 4.12. Модель мягких кубов

В этой модели, получившей название модели мягких кубов, принимается, что поверхностный атом связан с фиксированной решеткой одной пружиной. Такое допущение, являющееся вторым главным отличием от модели жестких кубов, позволяет ввести силовую постоянную связи решетки с поверхностным атомом (аналогично модели цепочки линейных осцилляторов, где силовая постоянная, как отмечалось, может играть важную роль при описании взаимодействия).

Модель имеет три подгоночных параметра: глубину потенциальной ямы  $E$ , которую можно определить по экспериментальным теплотам адсорбции;

область действия потенциала отталкивания  $b$  ; частоту осциллятора  $\omega$  , которая является функцией силовой постоянной линейной пружины и массы поверхностного атома.