

12. Грановский В. Л. Электрический ток в газе. Установившийся ток. М.: Наука, 1971.
13. Божко И. В. Об изменении удельного сопротивления воздуха при температуре до 1900 К.— В сб.: Электрофизические исследования по МГД-методу преобразования энергии. Киев: Наукова думка, 1977.
14. Ушаков Б. А., Никитин В. Д., Емельянов И. Я. Основы термоэмиссионного преобразования энергии. М.: Атомиздат, 1974.
15. Добрецов Л. Н. Электронная и ионная эмиссия. М.—Л.: ГИТТЛ, 1950.
16. Божко И. В., Дудко Д. Я., Фальковский Н. И. Исследование электрической прочности нагретого кислорода.— Техн. электродинамика, 1980, № 5.

УДК 533.583.2 : 533.6

КИНЕТИКА СТОЛКНОВЕНИЯ МЕДЛЕННЫХ АТОМОВ С НАГРЕТОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ

А. С. Долгов
(Харьков)

Интерес к особенностям процесса взаимодействия атомных частиц малых (порядка электронвольт) энергий определяется необходимостью прогнозирования изменения свойств поверхностей, подверженных бомбардировке относительно медленными атомами и ионами. Запросы практики и эксперимента ставят перед теорией задачи определения вероятностей осаждения либо отражения атома в акте его соударения с поверхностью и коэффициентов распыления атомов поверхности. Имеются обширные исследования отклика кристаллической поверхности на первичный толчок, передаваемый налетающим атомом [1—4]. Особый интерес представляет вопрос о бомбардировке нагретой поверхности. Имеются работы, где с различных точек зрения трактуются те или иные особенности взаимодействия атомных частиц с термически возбужденными поверхностями (например, [5—8]). Ниже приводятся некоторые приближенные построения применительно к данной проблеме, которые основаны на сопоставлении вкладов отклика решетки на первичный толчок и теплового движения ее атомов и не связаны с какой-то одной формой кристаллической структуры. Конкретные особенности бомбардируемого образца фигурируют в качестве параметров или соотношений, которые вычисляются независимо.

Физическая сущность акта соударения медленного атома с нагретой поверхностью состоит в наложении условно детерминированного процесса, стимулированного толчком налетевшего атома, и определяемых статистическими закономерностями колебаний атомов. Применительно к высоким температурам можно ввести некоторые общие соотношения, представляющие закономерности движения атомов, которые по мере роста температур асимптотически приближаются к точным.

Как правило, слой кристалла, непосредственно примыкающий к поверхности, является наиболее дефектным. В силу этого в приповерхностном слое возникает большое число сугубо локальных колебательных состояний, каждое из которых принадлежит в основном самому дефектному атому. Квадрат амплитуды колебаний такого атома в направлении α определяется выражением $\gamma_\alpha \hbar \omega_\alpha n_\alpha$, где пропорциональность квантовому числу n_α следует из принципа соответствия в области высоких температур, а значение γ_α для каждого из таких атомов зависит от конкретных условий, в которых он находится; ω_α — частота локального колебания. Функция распределения смещений и скоростей такого атома приближенно представляется выражением

$$(1) \quad f(\dots x_\alpha, v_\alpha \dots) = \prod_\alpha \frac{1 - e^{-\frac{\hbar \omega_\alpha}{T}}}{\pi} \sum_{n_\alpha} \frac{\exp\left(-\frac{\hbar \omega_\alpha n_\alpha}{T}\right)}{\sqrt{\gamma_\alpha \hbar \omega_\alpha n_\alpha - x_\alpha^2}} \times \\ \times \delta\left\{v_\alpha - \omega_\alpha \sqrt{\gamma_\alpha \omega_\alpha \hbar n_\alpha - x_\alpha^2}\right\}, \quad n_\alpha > \frac{x_\alpha^2}{\gamma_\alpha \hbar \omega_\alpha}.$$

Замена в соотношении (1) суммирования интегрированием дает

$$(2) \quad f(\dots x_\alpha, v_\alpha \dots) = \frac{\exp \left\{ - \sum_{\alpha} \frac{1}{\gamma_{\alpha} T} \left(x_{\alpha}^2 + \frac{v_{\alpha}^2}{\omega_{\alpha}^2} \right) \right\}}{\pi^3 T^3 \prod_{\alpha} \gamma_{\alpha} \omega_{\alpha}},$$

т. е. получается гауссово распределение смещений и скоростей, причем $f(x_{\alpha}, v_{\alpha}) = f_1(x_{\alpha})f_2(v_{\alpha})$, что соответствует отсутствию «в среднем» корреляции между смещениями и скоростями.

Аналогичным образом либо путем вычисления соответствующих корреляционных функций устанавливается, что факторизация координатно-скоростной функции распределения имеет место и для зонных колебаний, т. е. является общим свойством высокотемпературных колебаний атомов.

Изложенные соображения позволяют ввести в рассмотрение простую функцию распределения смещений налетевшего атома относительно его положения, определяемого развитием процесса после начала взаимодействия этого атома с поверхностью. Названная функция представляет собой наложение распределений, задаваемых динамическим влиянием всех атомов кристалла, и записывается в виде

$$(3) \quad f(x) = \exp \left(- \frac{x^2}{2 \langle x^2 \rangle} \right) \sqrt{2\pi \langle x^2 \rangle}.$$

Средний квадрат $\langle x^2 \rangle$ зависит от времени и вычисляется следующим образом:

$$(4) \quad \langle x^2(t) \rangle = \sum_{\mathbf{p}, \alpha} \{ \langle x_{\mathbf{p}\alpha}^2 \rangle \Phi_{\mathbf{p}\alpha}^2 + \langle v_{\mathbf{p}\alpha}^2 \rangle \Psi_{\mathbf{p}\alpha}^2 \}.$$

Здесь суммирование по \mathbf{p} соответствует перечислению всех атомов кристалла; величины $\langle x_{\mathbf{p}\alpha}^2 \rangle$ и $\langle v_{\mathbf{p}\alpha}^2 \rangle$ — средние квадраты смещений и скоростей атома \mathbf{p} , вычисляемые известными методами [9]; функции $\Phi_{\mathbf{p}\alpha}$ и $\Psi_{\mathbf{p}\alpha}$ описывают динамическое влияние начального сдвига и начальной скорости соответственно на движение налетевшего атома по нормали к поверхности, т. е. представляют законы движения интересующего атома при единичных сдвигах и скоростях, иначе говоря, те функции, отыскание которых было целью ряда публикаций ([1—4] и др.).

С ростом t квадратичная дисперсия возрастает от нуля при $t = 0$ до некоторого предельного значения, что соответствует процессу «термализации» налетевшего атома. Длительность этапа «термализации» порядка времени одного цикла для конденсации на собственной решетке и может быть довольно большой, если конденсирующийся атом значительно отличается от атомов кристалла. Величина $\langle x^2(t) \rangle$ играет роль «температуры» (в соответствующем масштабе).

Формулы (3), (4) позволяют найти некоторые закономерности столкновения медленных атомных частиц с поверхностями, общие для различных кристаллических структур. Если энергия тепловых колебаний значительно меньше энергии налетающего атома и энергии отключения взаимодействия, то отрыв атома будет происходить в некоторой временной окрестности того момента t_i , когда смещение на отрыв рассматриваемого атома, рассчитанное в пренебрежении тепловым движением, максимально (вклад могут давать несколько максимумов). В окрестности указанного максимума движение атома относительно его номинальной позиции подобно гармоническому с частотой ω , уступающей, но того же порядка, что и предельная частота колебаний атома (такое поведение определяется анализом ряда нестационарных задач). Этот же гармонический закон можно условно распространить и на моменты времени, далекие от t_i , т. е. не дающие заметного вклада в вероятность отрыва. Составляющая суммарного движения, определяемая тепловым движением кристалла,

также имеет колебательный характер и может быть аппроксимирована синусоидальной зависимостью приблизительно такой же частоты со случайной амплитудой a , случайным фазовым сдвигом β относительно выше-названной функции. Акту отрыва атома отвечает превышение амплитуды результирующего колебания над некоторой величиной b , соответствующей отключению потенциала, или, иначе, условной границе области взаимодействия налетевшего атома с поверхностью кристалла, причем в силу сказанного выше фазовый сдвиг результирующего колебания относительно вынужденного начальным толчком не должен быть большим. Элементарные операции дают

$$(5) \quad x_m^2 + 2x_m a \cos \beta + a^2 > b^2.$$

Неравенство (5) выполняется вообще для ограниченного диапазона изменения β . Отношение этого диапазона к 2π и есть вероятность отрыва для заданных значений x_m , a , b . Таким образом, имеем

$$(6) \quad W = 0, \quad a < b - x_m,$$

$$W(a) = \frac{1}{\pi} \arccos \frac{b^2 - a^2 - x_m^2}{2x_m a}, \quad b + x_m > a > b - x_m,$$

$$W(a) = 1, \quad a > b + x_m$$

(последний из указанных трех случаев не вполне соответствует оговоренным выше предположениям, однако диапазон весьма больших значений a в условиях проводимого рассмотрения практически не дает вклада).

Условная вероятность отрыва вблизи i -й «опасной точки» находится осреднением зависимости $W(a)$ (6), т. е.

$$(7) \quad W_i = \sqrt{\frac{K\pi}{2\langle E_i \rangle}} \int_0^{\infty} W(a) \exp\left(-\frac{Ka^2}{2\langle E_i \rangle}\right) da,$$

где K — эффективная константа жесткости, $\langle E_i \rangle = K\langle x^2(t_i) \rangle$.

Вычисление по формуле (7) в приближении, соответствующем условию

$$\langle E_i \rangle \ll \frac{K}{2} (b - x_{mi})^2, \quad \frac{K}{2} x_{mi}^2,$$

приводит к результату

$$(8) \quad W_i = \frac{1}{\pi K} \left(\frac{b}{x_{mi}}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\langle E_i \rangle}{(b - x_{mi})^2} e^{-\frac{K(b-x_{mi})^2}{2\langle E_i \rangle}}.$$

Аналогично для случая $x_{mi} > b$ получаем

$$(9) \quad W_i = 1 - \frac{1}{\pi K} \left(\frac{b}{x_{mi}}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{\langle E_i \rangle}{(x_{mi} - b)^2} e^{-\frac{K(x_{mi}-b)^2}{2\langle E_i \rangle}}.$$

Если же $x_{mi} \simeq b$, то

$$(10) \quad 1 > W_i \geq 1/2.$$

Соотношения (7)–(10) позволяют определить условные вероятности для всех экстремальных удалений налетевшего атома от номинальной поверхности кристалла. Если определяющий вклад связан с одним каким-то максимумом, то вероятность отрыва при заданном параметре удара W совпадает с соответствующим значением W_i . Если же существенны вклады нескольких максимумов, то

$$(11) \quad W = \sum_{i=1}^{\infty} W_i \prod_{j=1}^{i-1} (1 - W_j).$$

Формулы (7)—(11) определяют непрерывное изменение вероятности W с изменением скорости падающей частицы и изменением температуры. Видно также, что при относительно малых скоростях падения ($x_m < b$) нагрев поверхности увеличивает вероятность отрыва, а при относительно больших ($x_m > b$) — уменьшает и что роль температуры является наиболее значительной, когда конденсирующийся атом идентичен атомам кристалла. Наблюдаемая вероятность отрыва находится осреднением (11) по распределению параметров соударений.

Стоит подчеркнуть, что применяемый выше подход вовсе не игнорирует коллективный характер колебательных возбуждений кристалла.

Функции φ , $\dot{\varphi}$, входящие в выражение (4), — некоторые суммы по нормальным как коротковолновым, так и длинноволновым колебаниям. Однако явное представление временных зависимостей φ , $\dot{\varphi}$ в форме разложения по колебаниям с фиксированной частотой не является здесь необходимым. Указанные зависимости могут быть найдены самостоятельно (см., например, [1—4]).

Отрыв атома от поверхности приводит к искажению особенностей распределения скоростей и смещений атомов в окрестности точки отрыва. В силу этого приводимые формулы справедливы только в том временном интервале, когда налетевший атом взаимодействует с поверхностью. Таким образом, возможность повторного захвата оторвавшегося атома предполагается несущественной. Для трехмерной среды, где атомы поверхности удерживаются не только продольными, но и поперечными силами, повторный захват маловероятен.

Названное обстоятельство предполагает также, что другой атом не вступает в контакт с каким-либо участком поверхности, прежде чем там не восстановится термодинамически равновесное распределение. Приняв во внимание, что времена релаксации по порядку величины сравнимы с периодом колебаний атомов ($\sim 10^{-13}$ с), можно заключить, что при всяких разумных предположениях об интенсивностях бомбардировки система успевает релаксировать к равновесному состоянию. Условия применимости формулы (11) также не связаны с особенностями движения атомов после отрыва в каком-то цикле колебаний.

Следует указать также, что формулы (8), (9), записанные в предположении о малости тепловых смещений сравнительно с максимальным сдвигом, стимулированным толчком налетевшего атома, имеют более широкую область применимости, нежели допускается гармоническим приближением. Закон движения налетевшего атома по направлению нормали к поверхности в общем случае описывается некоторой функцией

$$(12) \quad x(t) = F\{t, x_0(0), \dots, x_{p\alpha}(0), v_{p\alpha}(0)\dots\},$$

где $x_0(0)$ — комплекс начальных данных, определяющих движение интересующего атома $x_0(t)$ в пренебрежении тепловыми колебаниями. С учетом относительной малости вклада начальных тепловых смещений атомов кристалла для моментов времени вблизи «опасной точки» соотношение (12) можно переписать в виде

$$(13) \quad x(t) = x_0(t) + \sum_{p,\alpha} \left\{ \frac{\partial F(t, x_0(0), \dots, 0, 0 \dots)}{\partial x_{p\alpha}(0)} x_{p\alpha}(0) + \frac{\partial F(t, x_0(0), \dots, 0, 0 \dots)}{\partial v_{p\alpha}(0)} v_{p\alpha}(0) \right\}.$$

Сравнение (13) с соответствующим точным гармоническим выражением

$$(14) \quad x(t) = x_0(t) + \sum_{p,\alpha} \{ \Phi_{p\alpha} x_{p\alpha}(0) + \Psi_{p\alpha} v_{p\alpha}(0) \}$$

показывает, что формулы (13) и (14) различаются лишь некоторыми функциями, определяемыми самостоятельно. Таким образом, в рассматриваемом

мой ситуации ангармонизм приводит лишь к перенормировке функций Φ , φ , Γ . е. в конечном счете к изменению масштаба используемых выше величин $\langle x^2(t_i) \rangle$, $\langle E_i \rangle$ с сохранением всех зависимостей, содержащих эти величины. Подчеркнем, что слабость ангармонических эффектов предполагается при этом только для равновесных тепловых колебаний; движение атомов после сильного толчка налетевшего атома может быть при этом сильноангармоническим.

Изложенные в работе соображения пригодны как к конденсации, так и к распылению атомов относительно медленными атомными частицами, причем в последнем случае вместо $\langle \bar{E}_i \rangle$ следует принять константу, в гармоническом пределе совпадающую с T . Формулы (8), (9) определяют роль энергии падающих частиц x_m , характеристик бомбардируемой поверхности K , b , температуры $\langle E_i \rangle$ и могут быть использованы для широкого круга реальных физических ситуаций.

Поступила 11 XI 1980

ЛИТЕРАТУРА

1. Zwanzig R. W. Collision of a gas atom with a solid surface.— J. Chem. Phys., 1960, vol. 32, N 4.
2. Пярнпуу А. А. Взаимодействие молекул газа с поверхностями. М.: Наука, 1974.
3. Баранцев Р. Г. Взаимодействие разреженных газов с обтекаемыми поверхностями. М.: Наука, 1975.
4. Гудман Ф., Вахман Г. Динамика рассеяния газа поверхностью. М.: Мир, 1980.
5. Strijenov D. S. Influence of thermal motion in a solid on the interaction of an atom colliding with the solid surface.— Fluid Dynam. Trans., 1971, vol. 5, pt II.
6. Тамбовцев Ю. П. Неравновесная классическая теория взаимодействия атомов газа с поверхностью твердого тела. ВИНТИ 7189 — 73 деп., ВИНТИ 7319 — 73 деп., 1973.
7. Галанов А. Е. Модель неупругого рассеяния атома на поверхности кристалла в импульсном приближении.— ПМТФ, 1976, № 6.
8. Жук В. И. О захвате атомов газа на поверхности твердого тела.— ПМТФ, 1979, № 1.
9. Марадудин А., Монтроли Э., Вейсс Дж. Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении. М.: Мир, 1965.

УДК 533.72

К ВОПРОСУ О ТЕПЛООБМЕНЕ ЭЛЛИПТИЧЕСКИХ ЦИЛИНДРОВ С ОБТЕКАЮЩИМ ИХ ГАЗОВЫМ ПОТОКОМ ПРИ МАЛЫХ ЧИСЛАХ ПЕКЛЕ

И. М. Скачков, Е. Р. Шукин, Ю. И. Яламов
(Москва)

В работах [1—3] подробно рассмотрен теплообмен кругового цилиндра, обтекаемого газовым потоком. В [2, 3] в случае малых конечных чисел Пекле и Рейнольдса получены распределение температуры и число Нуссельта с точностью до Re^2 . Теплообмен некруговых цилиндров ранее в литературе не рассматривался. В данной работе теоретически рассмотрен теплообмен эллиптического цилиндра с газовым потоком, перпендикулярным образующей цилиндра.

Распределение температуры T_i вдоль поверхности цилиндра будем считать однородным ($T_i = \text{const}$). Рассматривается случай $Pe \ll 1$ и малых относительных перепадов температуры T в системе цилиндр — газовый поток ($|T_i - T|/T \ll 1$).

При нахождении распределения температуры T в газовом потоке будем решать уравнение Озеена, которое, как показано в [2, 3], дает верное нулевое приближение для T :

$$(1) \quad u \text{ grad } T = \chi \text{ div grad } T$$

с граничными условиями

$$(2) \quad \begin{aligned} T &= T_i && \text{на поверхности цилиндра,} \\ T &= T_\infty && \text{на бесконечности,} \end{aligned}$$