

О ЗАХВАТЕ АТОМОВ ГАЗА НА ПОВЕРХНОСТИ ТВЕРДОГО ТЕЛА

В. И. Жук

(Москва)

Захват частиц газа обычно рассматривается в предположении, что столкновения с атомами поверхности происходят на фоне одномерного стационарного потенциала притяжения, обусловленного эффектами коллективного взаимодействия. Если отражение непосредственно от твердой стенки не зависит от наличия поверхностного потенциала, то полная функция рассеяния легко выражается через функцию рассеяния в отсутствие поля [1].

Захват имеет место, если энергия частицы газа после столкновения с атомами поверхности меньше, чем глубина потенциальной ямы E_D . Как следствие одномерности потенциала притяжения реализация захвата определяется только энергией движения частицы по нормали $E_{\perp} = E \cos^2 \theta_{rD}$, где θ_{rD} — угол отражения непосредственно от элемента поверхности. Если $E_{\perp} < E_D < E$, то частица называется прыгающей или полужащенной. Такие частицы отражаются от потенциального барьера и испытывают повторные столкновения с поверхностью тела.

При вычислении вероятности захвата различие между захваченными и прыгающими атомами обычно игнорируется. В частности, принято считать, что те и другие атомы вылетают затем из зоны притяжения в соответствии с диффузным законом при температуре поверхности.

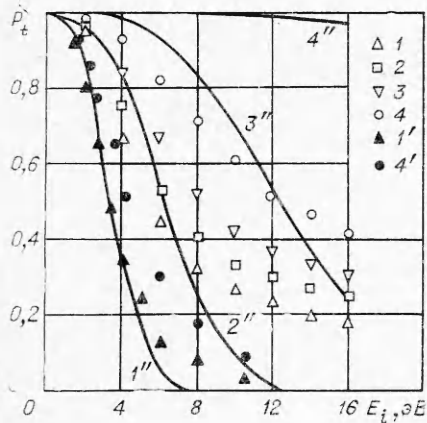
Однако следует отметить, что отказ от учета эффекта полужащенных атомов в теоретических моделях может приводить к противоречию с экспериментальными данными для больших энергий набегающего потока и больших углов падения. Это противоречие особенно наглядно проявляется в получившей довольно широкое распространение теории кубов [2]. Сохранение тангенциального импульса при столкновении частицы газа с колеблющимся гладким кубом приводит к тому, что вероятность захвата зависит только от $E_{\perp} = E_i \cos^2 \theta_i$, где θ_i — угол падения. Другими словами, при сколь угодно большой энергии набегающего потока E_i найдется такой угол падения θ_i , что все частицы газа с подавляющей вероятностью будут захвачены (эффективная энергия частицы становится сколь угодно малой). Этот результат, бессмысленный с физической точки зрения, не подтверждается и экспериментальными данными, по которым зависимость коэффициента захвата P_t от угла падения не превышает 30—50%, причем для больших энергий захват отсутствует при любых θ_i [3, 4].

Моделирование поверхности в виде массива несвязанных гармонических осцилляторов, колеблющихся по нормали, приводит к следующему выражению для вероятности захвата [3]:

$$(1) \quad P_t = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \operatorname{erf} \left[\frac{1+\mu}{2\mu^{1/2}} \left(\frac{E_D}{kT_s} \right)^{1/2} \left(1 - \frac{1-\mu}{1+\mu} \left(1 + \frac{E_i \cos^2 \theta_i}{E_D} \right)^{1/2} \right) \right] \right\},$$

где $\mu = m_a/m_s$, m_a , m_s — массы атомов газа и поверхности; T_s — температура поверхности.

Сравнение экспериментальных данных [3] по рассеянию атомов калия поликристаллической поверхностью вольфрама с результатами теории кубов на фиг. 1 показывает, что вероятность захвата удовлетворительно



Фиг. 1

описывается формулой (1) только при малых углах падения атомарного пучка. Результаты измерений [3] на фиг. 1 отмечены точками 1' для $\theta_i = 16,5^\circ$ и 4' для $\theta_i = 75^\circ$; данные по модели кубов (1) иллюстрируются кривыми 1''—4'' для углов падения $16,5; 45; 60; 75^\circ$ соответственно.

Обобщение теории кубов с целью учета потери тангенциального импульса при столкновениях газ — твердое тело предлагается в [5], где поверхность строится из частично затененных сферических шапок. В [4] явление захвата изучается в предположении, что адсорбированный атом взаимодействует с двухатомной молекулой поверхности.

В данной работе неоднородность взаимодействия учитывается с помощью моделирования поверхности тела случайным полем с некоторой флуктуацией наклона. Рассматривается влияние следующих факторов:

1) крупномасштабная шероховатость; 2) шероховатость атомного масштаба; 3) эффект прыгающих атомов.

Необходимость статистического описания поверхности обусловлена наличием пространственной структуры кристаллической решетки и температурными колебаниями атомов твердого тела. По оценке [3] средняя амплитуда тепловых колебаний составляет $0,6 \text{ \AA}$, что вполне сравнимо с радиусом атома вольфрама ($R_W \simeq 1,35 \text{ \AA}$). Для реальных поверхностей характерна также шероховатость с размерами, существенно превышающими межатомные расстояния в твердом теле, причем крупномасштабная статистическая неоднородность может служить имитацией поликристаллической структуры поверхности.

Рассмотрим сначала случай, когда размер неоднородностей много больше постоянной кристаллической решетки. Предположим, что модель кубов справедлива только локально, т. е. при отражении атомов от участка поверхности, малого по сравнению с размером неоднородности. Направление действующих на падающий атом газа сил коллективного притяжения и отталкивания от колеблющегося куба определяется локальной нормалью к поверхности. В качестве конкретного примера шероховатой поверхности выберем случайное поле, реализуемое с помощью спектральных разложений [6].

Типичные результаты расчетов, выполненных методом прямого численного моделирования [6,7], представлены на фиг. 1 в сравнении с теорией кубов и данными измерений [3]. Вероятность захвата P_t вычислена усреднением по 10 000 розыгрышей (численные результаты на фиг. 1 обозначены точками 1—4 для углов падения $16,5; 45; 60; 75^\circ$ соответственно). Глубина потенциальной ямы $E_D = 2,3 \text{ эВ}$, отношение масс $\mu = 0,21$, температура тела $T_S = 1200 \text{ К}$ соответствуют рассеянию атомов калия на поверхности вольфрама в условиях эксперимента [3]. Крутизна шероховатости является свободным параметром рассматриваемой модели. Расчетные данные на фиг. 1 получены для $\sigma = \langle \text{tg}^2 \varphi \rangle^{1/2} = 1$, где φ — случайный угол наклона элемента поверхности. Наличие крупномасштабных флуктуаций значительно улучшает угловую зависимость коэффициента захвата. Однако принятая модель взаимодействия лишь качественно

верно описывает поведение P_t по энергиям и нуждается в дальнейшем уточнении. Шероховатость увеличивает угол встречи набегающего атома с элементарной площадкой в случае нормального падения и уменьшает его для скользящих траекторий. При этом вероятность захвата быстрых частиц остается нереально высокой. Варьированием σ не удастся приблизить P_t к экспериментальным данным в области больших энергий атомарного пучка E_i .

Численные исследования показали, что отмеченный выше характер зависимости коэффициента захвата от θ_i и E_i сохраняется и при учете шероховатости атомного уровня. Одна из причин завышения P_t заключается в неверной фиксации акта захвата по энергии в направлении силового поля без учета прыгающих атомов.

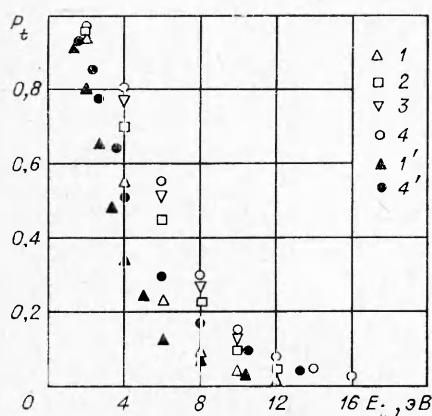
Для оценки влияния эффектов полузахвата и шероховатости атомарного масштаба примем следующую схему взаимодействия. Поверхность твердого тела строится как двуразмерная случайная функция. Притягивающее поле, моделируемое прямоугольной потенциальной ямой, будем считать действующим в направлении нормали к среднему уровню поверхности. Атом набегающего потока, достигая участка поверхности с локальной нормалью n , претерпевает соударение с атомом тела. Удар предполагается гладким, причем изменение импульса происходит в направлении n

$$v_{1n} = \frac{2u_{0n}}{\mu+1} + \frac{\mu-1}{\mu+1} v_{cn},$$

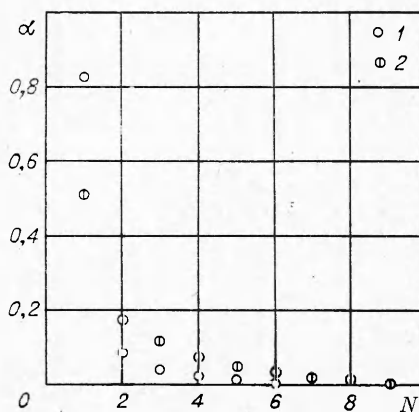
где v_{0n} , v_{1n} — компоненты скорости частицы газа по локальной нормали до и после столкновения; u_{0n} — случайная скорость атома тела с дисперсией $(kT_S/m_S)^{1/2}$, характеризующая тепловые колебания при температуре T_S . Заметим, что после отражения от элементарной площадки атом газа, прежде чем выйти на границу силового поля, может испытать повторные столкновения с телом.

Частица считается захваченной, если ее полная энергия $E < E_D$, и полузахваченной, если $E_{\perp} < E_D < E$, $E_{\perp} = E \cos^2 \theta_{rD}$, θ_{rD} — угол отражения от элемента поверхности. Траектории полузахваченных атомов прослеживаются до тех пор, пока они не переходят в класс захваченных или рассеянных частиц. Поверхность моделировалась в виде плоских четырехугольников со случайным наклоном [7].

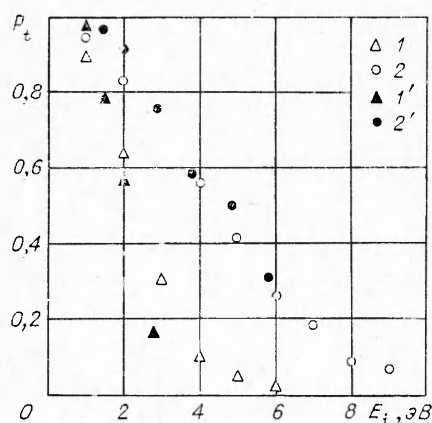
На фиг. 2 представлены вероятность захвата атомов К на поверхности W, вычисленная для $\sigma = 0,2$ (обозначения те же, что и на фиг. 1). Относи-



Ф и г. 2



Ф и г. 3



Ф и г. 4

гократные столкновения с поверхностью, не выходя из притягивающего поля. Полузахват с последующим испусканием не сопровождается релаксацией поступательной энергии атома, поскольку время нахождения атома в полузахваченном состоянии (по данным на фиг. 3) превышает время соударения с отдельным атомом решетки не более чем на порядок и оценивается как 10^{-14} — 10^{-13} с. Измеренное в [3] время жизни полностью захваченного атома составляет 10^{-4} с.

Для рассеяния атомов натрия на поверхности вольфрама численные результаты отображены на фиг. 4 ($\mu = 0,125$, $\sigma = 0,2$, точки 1, 2 соответствуют углам падения 10° ; 70°). Экспериментальные данные [4] по захвату Na на поверхности W (110) для этих же углов падения обозначены точками 1', 2'. Из анализа экспериментов в [4] получено значение глубины потенциальной ямы $E_D = 2,6$ эВ, которое использовалось в расчетах.

При отражении атомов Na и K от поверхности вольфрама происходит их полная ионизация, с чем связана сравнительно большая величина потенциала притяжения. В [4] отмечается значительное различие вероятности захвата при рассеянии на поликристаллической поверхности и на монокристалле. Предложенная модель позволяет описать экспериментальные результаты с помощью выбора параметра σ , характеризующего структуру поверхности.

Поступила 13 II 1978

ЛИТЕРАТУРА

1. Баранцев Р. Г. Взаимодействие разреженных газов с обтекаемыми поверхностями. М., «Наука», 1975.
2. Logan R. M., Keck J. C. Classical theory for the interaction of gas atoms with solid surfaces.— «J. Chem. Phys.», 1968, vol. 49, N 2, p. 860.
3. Hurkmans A., Overbosch E. G., Olander D. R., Los J. The trapping of potassium atoms by a polycrystalline tungsten surface as a function of energy and angle of incidence.— «Surface Science», 1976, vol. 54, N 1, p. 154.
4. Hurkmans A., Overbosch E. G., Los J. The trapping of K and Na atoms by a clean W (110) surface; trajectory calculations.— «Surface Science», 1977, vol. 62, N 2, p. 621.
5. Hurkmans A., Trilling L. The scattering of ions from a clean solid surface in the 1 to 10 eV range.— «Surface Science», 1976, vol. 59, N 2, p. 361.
6. Ерофеев А. И., Жук В. И. О рассеянии потока разреженного газа на шероховатой поверхности.— ЖВМ МФ, 1977, № 2.
7. Жук В. И. Трехмерная задача о взаимодействии потока газа с шероховатой поверхностью.— В кн.: Численные методы в динамике разреженных газов. Вып. 2. М., изд. ВЦ АН СССР, 1975.