

УДК 533.6.011.8 : 533.722

О МОДЕЛИРОВАНИИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМНЫХ ЧАСТИЦ С ПОВЕРХНОСТЬЮ ТВЕРДОГО ТЕЛА

А. И. ЕРОФЕЕВ

(Москва)

Проводится анализ применимости упрощенных моделей для описания взаимодействия атомов газа с поверхностью твердого тела в случае, когда время взаимодействия мало по сравнению с характерным временем колебания атомов в твердом теле. Для произвольной величины времени взаимодействия в квазиодномерном случае дано сравнение результатов взаимодействия атома газа с поверхностью твердого тела, моделируемого полубесконечной решеткой упругосвязанных атомов, с взаимодействием атома газа с гармоническим осциллятором. В предельном случае, когда отношение времени взаимодействия к характерному времени колебания атомов в решетке стремятся к нулю, показано влияние ангармоничности сил, действующих между атомами твердого тела, на взаимодействие атома газа с поверхностью.

1. Теоретическое рассмотрение задачи о взаимодействии потока газа с поверхностью твердого тела имеет ряд трудностей, одни из которых обусловлены недостаточным знанием параметров, определяющих состояние взаимодействующей системы, а другие вызваны сложностью описания коллективного взаимодействия частиц на границе фаз. Поэтому при решении задачи прибегают к моделированию явления упрощенными схемами, область применимости которых ограничена определенными интервалами изменения параметров. Так, например, если плотность потока газа достаточно мала или если «время жизни» молекул газа на поверхности мало, то можно пренебречь взаимным влиянием молекул газа на процесс столкновения с поверхностью.

Упрощения могут быть сделаны и при описании твердого тела (предполагается описание на основе классической механики). Если отношение времени взаимодействия атома газа с поверхностью твердого тела τ к характерному времени колебаний атомов в решетке T мало, т. е. $\tau/T \ll 1$, то атомы твердого тела в процессе взаимодействия можно считать свободными [1].

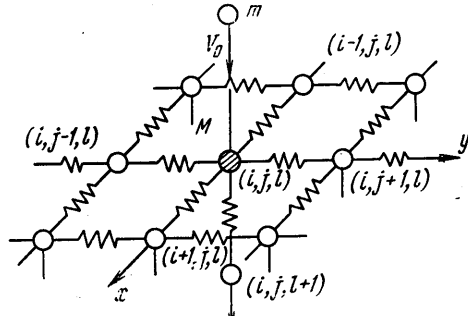
При увеличении времени взаимодействия необходимо учитывать связи между атомами твердого тела. Следует отметить, что время взаимодействия τ и количество учитываемых связей зависят от параметров задачи. В качестве упрощенных схем, описывающих движение атомов в твердом теле, применяются модель независимых гармонических осцилляторов (например, [1-4]) и модели, в которых твердое тело заменяется конечным блоком связанных между собой атомов (например, [2, 4-6]). Наиболее полный учет движения атомов твердого тела дан в моделях полубесконечной решетки связанных атомов (например, [7-9]). В этом случае рассматриваются простейшие схемы — простая кубическая решетка, между ближайшими атомами которой действуют упругие силы.

Рассмотрение взаимодействия атома газа с поверхностью твердого тела при больших скоростях, когда $\tau/T \ll 1$ (или $\omega\tau \ll 1$, где ω — характерная частота), было проведено в [10, 11] для квазиодномерного случая, т. е. когда атом газа движется по нормали к поверхности и взаимодействует только с одним поверхностным атомом с прицельным расстоянием, равным нулю.

Это рассмотрение показало, что в нулевом приближении по $\omega^2\tau^2$ атом твердого тела, с которым взаимодействует атом газа, движется как свободный; в первом — в движение вовлекаются ближайшие к этому атому соседние атомы решетки, но их движение не оказывает влияние на движение выделенного атома решетки. В этом приближении уравнения аналогичны уравнениям, описывающим взаимодействие атома газа с независимым осциллятором. С учетом следующих приближений в движение вовлекаются все новые слои атомов решетки.

Рассмотрим теперь более общий случай взаимодействия атома газа с поверхностью твердого тела, которое будем моделировать полубесконечной решеткой упругосвязанных атомов (фиг. 1). Уравнения движения и начальные условия имеют вид

$$\begin{aligned}
 m\ddot{\mathbf{r}} &= \sum_N \mathbf{f}_N, \\
 M\ddot{\rho}_N &= \sum_L \kappa_{NL}(\rho_L - \rho_N) - \mathbf{f}_N \\
 \mathbf{r}(-\infty) &= -V_0, \quad \rho_N(-\infty) = \rho_N^*, \\
 \rho_N(-\infty) &= \rho_N^* \quad (1.1)
 \end{aligned}$$



Фиг. 1

Здесь m , \mathbf{r} — масса и радиус-вектор атома газа, M — масса атома решетки, ρ — отклонение атома решетки от положения равновесия, N, L — трехмерный индекс (i, j, l) , определяющий положение атома в решетке, κ_{NL} — упругие постоянные, \mathbf{f}_N — сила, действующая между атомом газа и N -м атомом решетки. Время $t = -\infty$ означает, что атом газа находится на достаточно большом расстоянии от поверхности, так что сила взаимодействия равна нулю.

Приведем систему (1.1) к безразмерному виду. Пусть в потенциале взаимодействия атом газа — атом твердого тела имеется два параметра: линейный s и энергетический D . Введем новые переменные следующим образом:

$$t' = tV_0/c, \quad r' = r/c \quad (1.2)$$

Тогда вместо (1.1) получаем в безразмерном виде (опуская штрихи)

$$\begin{aligned}
 \ddot{\mathbf{r}} &= \varepsilon \sum_N \varphi_N, \quad \ddot{\rho}_N = \sum_L K_{NL}^2(\rho_L - \rho_N) - \mu \varepsilon \varphi_N \\
 \mathbf{r}(-\infty) &= -V_0/V_0, \quad \rho_N(-\infty) = \rho_N^*, \quad \dot{\rho}_N(-\infty) = \dot{\rho}_N^* \quad (1.3) \\
 \varepsilon &= D/mV_0^2, \quad \mu = m/M, \quad K_{NL}^2 = (\omega_{NL}c/V_0)^2, \quad \omega_{NL}^2 = \kappa_{NL}/M \\
 \varphi_N &= \mathbf{f}_N/D
 \end{aligned}$$

Предположим теперь, что упругие силы действуют только между ближайшими соседями, причем упругие постоянные есть величины одного порядка. Это предположение обычно принимается в микроскопической теории упругих свойств кристаллов (см., например, [12]). Итак, имеем

$$K_{NL}^2 = K^2\lambda_{NL}, \quad \lambda_{NL} = O(1) \quad (1.4)$$

и рассмотрим случай, когда $K^2 \ll 1$. Это неравенство выражает тот факт, что время взаимодействия $\tau \sim c/V_0$ много меньше характерного времени

колебания атомов в решетке $T \sim \omega^{-1}$. Будем искать решение в виде

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}^{(0)} + K\mathbf{r}^{(1)} + K^2\mathbf{r}^{(2)} + \dots, \quad \rho_N = \rho_N^{(0)} + K\rho_N^{(1)} + K^2\rho_N^{(2)} + \dots \quad (1.5)$$

Подставляя (1.5) в (1.3) и обозначая коэффициент при K^n в разложении Φ_N в ряд по K через $\Phi_N^{(n)}$ получаем в нулевом приближении

$$\ddot{\mathbf{r}}^{(0)} = \varepsilon \sum_N \Phi_N^{(0)}, \quad \ddot{\rho}_N^{(0)} = -\mu\varepsilon\Phi_N^{(0)} \quad (1.6)$$

в первом приближении

$$\ddot{\mathbf{r}}^{(1)} = \varepsilon \sum_N \Phi_N^{(1)}, \quad \ddot{\rho}_N^{(1)} = -\mu\varepsilon\Phi_N^{(1)} \quad (1.7)$$

во втором приближении

$$\ddot{\mathbf{r}}^{(2)} = \varepsilon \sum_N \Phi_N^{(2)}, \quad \ddot{\rho}_N^{(2)} = \sum_L \lambda_{NL}(\rho_L^{(0)} - \rho_N^{(0)}) - \mu\varepsilon\Phi_N^{(2)} \quad (1.8)$$

и т. д.

Необходимо отметить, что системы уравнений (1.6)–(1.8) описывают движение частиц во «внутренней области», связанной с масштабом c и c/V_0 . Чтобы определить константы, получающиеся в этом решении, его надо сростить с решением задачи во внешней области (в рассматриваемом случае — с решением в масштабе, связанным с ω). Отметим также, что вид разложения зависит от того, каким образом малый параметр входит в уравнения и начальные условия. Например, при рассмотрении квазиодномерной задачи [10, 11] с нулевыми начальными условиями для ρ_N и ρ_N решение получено в виде ряда по K^2 , разложение по целым степеням параметра K получается при рассмотрении задачи о взаимодействии атома газа с осциллятором, совершающим тепловые колебания.

Обратимся теперь к физическому смыслу различных приближений. Очевидно, что уравнения (1.6) и (1.7) соответствуют уравнениям, описывающим движение свободных частиц, в то время как уравнения (1.8) и следующие, в которых имеется член $\sum_L \lambda_{NL}(\rho_L^{(a)} - \rho_N^{(a)})$, соответствуют

уравнениям, описывающим движение с учетом связей между атомами твердого тела. Существенно здесь отметить, что в общем случае уравнения (1.8) отличаются от уравнений того же приближения, получающихся при рассмотрении задачи о взаимодействии атома газа с ансамблем независимых гармонических осцилляторов. Действительно, в этом случае вместо (1.3) имеем следующие уравнения:

$$\ddot{\mathbf{r}} = \varepsilon \sum_N \Phi_N, \quad \ddot{\rho}_N = -K^2\rho_N - \mu\varepsilon\Phi_N \quad (1.9)$$

Полагая снова $K^2 \ll 1$ и раскладывая \mathbf{r} и ρ в ряд по K , получаем для нулевого и первого приближений те же уравнения, что и (1.6), (1.7), а для второго приближения

$$\ddot{\mathbf{r}}^{(2)} = \varepsilon \sum_N \Phi_N^{(2)}, \quad \ddot{\rho}_N^{(2)} + \rho_N^{(0)} = -\mu\varepsilon\Phi_N^{(2)} \quad (1.10)$$

Таким образом, из (1.6)–(1.9) следует, что уравнения движения свободных частиц, а значит и модель свободных атомов твердого тела, являются асимптотическим решением рассмотренной выше задачи о взаимодействии атома газа с поверхностью при $K \rightarrow 0$ с погрешностью $O(K^2)$. При учете членов более высокого порядка оказывается, что в общем случае модель независимых осцилляторов не является каким-либо асимптотическим приближением решения задачи о взаимодействии атома газа с полубесконечной решеткой упругосвязанных атомов — схемы, которая в гармоническом приближении наиболее полно учитывает динамику атомов твердого тела.

2. Проведем теперь сравнение результатов решения задачи о взаимодействии атома газа с гармоническим осциллятором с результатами расчета взаимодействия атома газа с поверхностью твердого тела, моделируемого полубесконечной трехмерной решеткой упругосвязанных атомов при любых значениях параметра K . Ограничимся квазиодномерным случаем и рассмотрим сначала вторую задачу при следующих предположениях [8]:

1) между ближайшими атомами решетки действуют центральные и нецентральные силы с упругими постоянными κ и $\lambda\kappa$ соответственно;

2) атом газа взаимодействует только с одним поверхностным атомом, и это взаимодействие описывается потенциалом Морзе

$$U(r) = D[e^{-2(\tau-b)c^{-1}} - 2e^{-(\tau-b)c^{-1}}] \quad (2.1)$$

где r — расстояние между частицами, D , c , b — параметры;

3) тепловое движение атомов в твердом теле не учитывается, т. е. температура твердого тела полагается равной нулю.

В этих предположениях задача сводится к решению следующих уравнений [13] (в безразмерном виде):

$$\ddot{z}(t) = -1/2 \varepsilon_1 \mu^{-1} f, \quad z^{(0)}(t) = \frac{1}{2} \varepsilon_1 \int_0^t f(t-\tau) g(\tau) d\tau \quad (2.2)$$

$$\dot{z}(0) = \sqrt{\varepsilon_2/2\mu}, \quad z(0) = -R, \quad \varepsilon_1 = D/\kappa c^2, \quad \varepsilon_2 = E_0/\kappa c^2, \quad \mu = m/M$$

Здесь $z(t)$, $z^{(0)}(t)$ — координаты атома газа (масса m) и атома поверхности (масса M) соответственно, E_0 — кинетическая энергия налетающего атома, R — расстояние между атомом газа и поверхностным атомом в начальный момент времени, величина R выбирается такой, чтобы $f(R) \cong 0$

$$g(\tau) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \iiint_{-\pi}^{\pi} (1 + \cos \theta_z) \frac{\sin \omega_z \tau}{\omega_z} d\theta_x d\theta_y d\theta_z$$

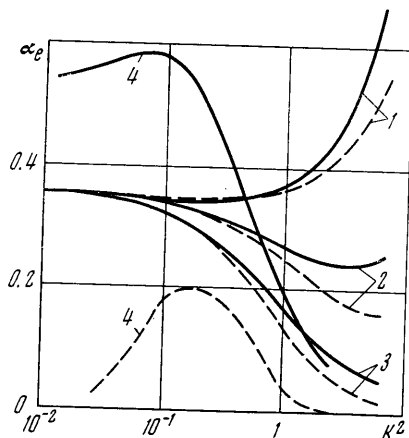
$$\omega_z^2 = \sin^2 1/2 \theta_z + \lambda (\sin^2 1/2 \theta_x + \sin^2 1/2 \theta_y) \quad (2.3)$$

$$f = \exp(-2|z - z^{(0)}|) - \exp(-|z - z^{(0)}|)$$

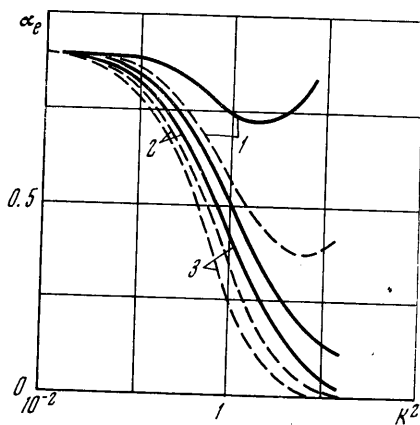
Решение системы (2.2) проводилось следующим образом: дифференциальное уравнение решалось методом Адамса с постоянным шагом по трехточечной схеме, вычисление интеграла проводилось по методу прямоугольников, функция $g(\tau)$ табулировалась в интервале $0 \leq \tau \leq 30$ с шагом $\Delta\tau = 0.2$. За единицу шага интегрирования уравнений принималась величина $h_0 = 0.2$, однако фактический шаг интегрирования изменялся в пределах $h_0 \geq h \geq h_0/16$. Коэффициент аккомодации энергии определялся по формуле

$$\alpha_e = 1 - \dot{z}_f^2 / V_0^2 \quad (2.4)$$

где \dot{z}_1 — скорость атома газа после столкновения на некотором расстоянии R_1 от поверхности, для которого $f(R_1)$ практически равна нулю. Если в ре-



Фиг. 2



Фиг. 3

зультате столкновения с поверхностным атомом атом газа терял большую часть кинетической энергии и не мог преодолеть потенциальный барьер, то α_e полагался равным единице.

Погрешность вычислений коэффициента аккомодации определялась по сходимости результатов при дроблении шага интегрирования. Ниже представлены некоторые данные о влиянии шага интегрирования на величину α_e для $\mu = 0.11$ и 0.5 соответственно, $\lambda = 1$, $\varepsilon_1 = 0.0058$.

ε_2	$h_0/4$	$h_0/8$	$h_0/16$	ε_2	h_0	$h_0/4$	$h_0/8$
10	0.4239	0.3648	0.3554	10	0.7490	0.8738	0.8719
5	0.3797	0.3545	0.3510	1	0.6282	0.6235	0.6234
2	0.3498	0.3425	0.3415	0.1	0.1257	0.1247	—
1	0.3314	0.3285	0.3282	0.01	0.02059	0.02040	—
				0.001	0.02788	0.02761	—

Окончательный шаг интегрирования выбирался таким, чтобы при последующем уменьшении шага в 2 раза величина $\delta\alpha = |\alpha_h - \alpha_{h/2}| / \alpha_h$ не превышала 2–3%.

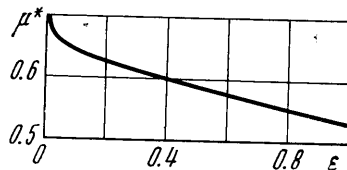
На фиг. 2, 3 представлены результаты расчета α_e для описанной выше модели (сплошные кривые) и результаты расчета при взаимодействии атома газа с гармоническим осциллятором (пунктирные кривые). Собственная частота осциллятора принята равной

$$\omega^2 = \kappa M^{-1}(1 + 4\lambda) \quad (2.5)$$

где κ — упругая постоянная решетки. Для полубесконечной решетки это соответствует приближению, когда рассматривается движение только одного поверхностного атома, а остальные атомы решетки закреплены в положениях равновесия. На фиг. 2, 3 по оси абсцисс отложена величина $K^2 = \mu / 2\varepsilon_2$. Представленные результаты соответствуют следующим условиям на фиг. 2: $\mu = 0.11$; $\lambda = 0.25$, кривая 1 — $\varepsilon_1 = 0.0169$, 2 — $\varepsilon_1 = 0.00845$, 3 — $\varepsilon_1 = 0.00169$; 4 — $\mu = 1$, $\lambda = 1$, $\varepsilon_1 = 0.0058$; на фиг. 3: $\mu = 0.5$, $\lambda = 0.25$, кривая 1 — $\varepsilon_1 = 0.042$, 2 — $\varepsilon_1 = 0.00845$, 3 — $\varepsilon_1 = 0.00169$.

Из приведенных данных следует, что для отношения масс не слишком близкого к единице, обе модели дают одинаковую качественную зависимость α_e от параметров задачи, но количественные расхождения могут быть

существенными. Эти различия проявляются в большей степени с уменьшением начальной скорости атома газа, т. е. при увеличении времени взаимодействия, когда существенным становится влияние связей в решетке. При больших начальных скоростях атома газа коэффициент аккомодации стремится к величине, определяемой однократным столкновением свободных частиц.



Фиг. 4

При $\mu = 1$ результаты существенно расходятся и в области больших начальных скоростей атома газа. Это может быть объяснено тем, что не выполняется условие «однократного» столкновения атома газа с поверхностным атомом или с осциллятором. Действительно, в пределе больших скоростей для квазиоднормерной задачи предположение об однократном столкновении выполняется при $\mu < \mu^*$. При этом для взаимодействия с гармоническим осциллятором $\mu^* = 0.697$ [11, 14], а для модели полубесконечной решетки упруго-связанных атомов величина μ^* зависит от λ следующим образом [8, 11]:

$\lambda = 1$	0.5	0.25	0
$\mu^* = 0,84$	0.846	0.885	1

3. Из проведенного выше рассмотрения ясно, что параметр μ^* определяет границу применимости модели свободных частиц при лобовом ударе при $K \rightarrow 0$. Величины μ^* были определены для случаев, когда между атомами решетки действуют упругие силы и при взаимодействии атома газа с гармоническим осциллятором. Выясним, какое влияние окажут связи более высокого порядка, нежели гармонические, на величину μ^* . Проведем такое рассмотрение для двух случаев: а) взаимодействие атома газа с атомом, связанным с положением равновесия силой, описываемой потенциалом Морзе (2.1); б) учет ангармоничности сил, связывающих атом поверхности, с которым непосредственно взаимодействует атом газа, с его ближайшими соседями. Как и в п. 2, ограничимся квазиоднормерным случаем. Будем предполагать также, что взаимодействие между атомом газа и поверхностным атомом описывается законом столкновения твердых сфер.

Случай а). Рассмотрение этой задачи вызвано тем, что в ряде случаев в модели твердого тела связи между атомами описывают силами другого вида, нежели упругие (потенциалы Морзе, Леннарда — Джонса) [5, 15, 16]. Поскольку взаимодействие с атомом газа будем описывать законом твердых сфер, то движение атома газа известно и надо определить движение осциллятора, которое описывается следующим уравнением и начальными условиями (в безразмерном виде):

$$\ddot{x} = e^{-2x} - e^{-x}, \quad x(0) = 0, \quad \dot{x}(0) = -2\mu(1 + \mu)^{-1} \sqrt{\varepsilon_1 / \mu} \quad (3.1)$$

где $\varepsilon_1 = E_0 / D$ есть отношение начальной кинетической энергии атома газа к глубине потенциальной ямы, $\mu = m / M$ — отношение масс атома газа и осциллятора. Вид решения уравнения (3.1) зависит от знака параметра A , который равен

$$A = 4\mu(1 + \mu)^{-2} \varepsilon_1 - 1 \quad (3.2)$$

При $A < 0$ атом будет совершать колебания около положения равновесия, при $A > 0$ атом преодолет потенциальный барьер и при удалении от положения равновесия будет двигаться как свободный.

Рассмотрим случай $A < 0$. Решение (3.1) имеет вид

$$x(t) = \ln \{ [1 - \sqrt{\varepsilon} \sin(t\sqrt{1-\varepsilon} + \varphi)] / (1 - \varepsilon) \} \quad (3.3)$$

$$\varepsilon = 4\mu(1 + \mu)^{-2}\varepsilon_1, \quad \varphi = \arcsin \sqrt{\varepsilon}$$

В рассматриваемых переменных движение атома газа будет описываться соотношением

$$x_1(t) = 1/2(1 - \mu)\mu^{-1}\sqrt{\varepsilon}t \quad (3.4)$$

Граничное отношение масс μ^* , для которого столкновение еще однократно, получим из следующих равенств:

$$x(t) = x_1(t), \quad \dot{x}(t) = \dot{x}_1(t) \quad (3.5)$$

которые в рассматриваемом случае сводятся к соотношениям

$$\ln \frac{1 - \sqrt{\varepsilon} \sin(T_0 + \varphi)}{1 - \varepsilon} = -T_0 \frac{\sqrt{\varepsilon} \cos(T_0 + \varphi)}{1 - \sqrt{\varepsilon} \sin(T_0 + \varphi)} \quad (3.6)$$

$$\frac{1 - \mu^*}{2\mu^*} = \frac{\sqrt{1 - \varepsilon} \cos(T_0 + \varphi)}{1 - \sqrt{\varepsilon} \sin(T_0 + \varphi)}, \quad T_0 = t_0\sqrt{1 - \varepsilon}$$

где t_0 — временная координата в точке касания траекторий. Результат решения уравнений (3.6) представлен на фиг. 4, из которой видно, что с увеличением энергии, переданной осциллятору, величина μ^* уменьшается (если амплитуда осциллятора увеличивается в сторону, где происходит движение атома газа, а именно такой случай и рассматривается). При $\varepsilon \rightarrow 0$ из (3.6) получаем

$$\mu^* = \mu_0^*(1 - 0.229\sqrt{\varepsilon} + 0.0186\varepsilon + \dots) \quad (3.7)$$

где μ_0^* есть граничное значение отношения масс при взаимодействии с гармоническим осциллятором.

Случай б). Рассмотрим движение атомов в простой кубической полубесконечной решетке в следующих предположениях:

1) атомы в решетке связаны со своими ближайшими соседями упругими центральными и нецентральными силами с упругими постоянными κ и $\lambda\mu$ соответственно. Атом решетки $(0, 0, 0)$, на который действует возмущающая сила в начальный момент времени, связан со своими ближайшими соседями также и неупругими силами;

2) до момента действия возмущающей силы атомы решетки покоятся в положениях равновесия;

3) возмущающая сила действует только на атом $(0, 0, 0)$ решетки в направлении нормали к поверхности и сообщает ему начальную скорость $V = 2\mu(1 + \mu)^{-1}V_0$, где V_0 — скорость атома газа до столкновения.

Уравнения движения имеют вид (см. фиг. 1)

$$M\ddot{z}_{0,0,0} = \kappa(z_{0,0,1} - z_{0,0,0}) + \lambda\mu(z_{0,1,0} + z_{0,-1,0} + z_{1,0,0} + z_{-1,0,0} - 4z_{0,0,0}) +$$

$$+ \beta(z_{0,0,1} - z_{0,0,0})^2 + \gamma[(z_{0,1,0} - z_{0,0,0})^2 + (z_{0,-1,0} - z_{0,0,0})^2 +$$

$$+ (z_{1,0,0} - z_{0,0,0})^2 + (z_{-1,0,0} - z_{0,0,0})^2] \quad (3.8)$$

$$M\ddot{z}_{0,1,0} = \kappa(z_{0,1,1} - z_{0,1,0}) + \lambda\mu(z_{1,1,0} + z_{-1,1,0} + z_{0,2,0} + z_{0,0,0} - 4z_{0,1,0}) -$$

$$- \gamma(z_{0,1,0} - z_{0,0,0})^2$$

аналогичные уравнения для $z_{0,-1,0}$, $z_{1,0,0}$, $z_{-1,0,0}$

$$M\ddot{z}_{0,0,1} = \kappa(z_{0,0,2} + z_{0,0,0} - 2z_{0,0,1}) + \\ + \lambda\kappa(z_{1,0,1} + z_{-1,0,1} + z_{0,1,1} + z_{0,-1,1} - 4z_{0,0,1}) - \beta(z_{0,0,1} - z_{0,0,0})^2$$

Правые части остальных уравнений для $z_{i,j,l}$ содержат только линейные члены, которые в дальнейшем будем обозначать $L_{i,j,l}(z)$. В уравнениях (3.8) $z_{i,j,l}$ есть смещение атома решетки относительно положения равновесия.

Начальные условия имеют вид

$$z_{i,j,l}(0) = 0, \quad \dot{z}_{i,j,l}(0) = V\delta_{0i}\delta_{0j}\delta_{0l}, \quad V = 2\mu(1 + \mu)^{-1}V_0$$

Коэффициент γ нецентральных неупругих сил примем равным $\gamma = \lambda\beta$ (по аналогии с упругими силами). Будем в дальнейшем рассматривать случай, когда влияние неупругих членов проявляется так, что амплитуда колебаний поверхностного атома $(0, 0, 0)$ уменьшается при его движении внутрь решетки и увеличивается при его движении от решетки. Для системы координат, изображенной на фиг. 1, параметры β и γ должны быть отрицательными. Переходя в (3.8) к безразмерным переменным $\tau = \omega_0 t$, $u = z\omega_0 / V$ где $\omega_0^2 = 4\kappa / M$, получим

$$\ddot{u}_{0,0,0} = 1/4(u_{0,0,1} - u_{0,0,0}) + 1/4\lambda(u_{0,1,0} + u_{0,-1,0} + u_{1,0,0} + \\ + u_{-1,0,0} - 4u_{0,0,0}) + \delta(u_{0,0,1} - u_{0,0,0})^2 + \lambda\delta[(u_{0,1,0} - u_{0,0,0})^2 + \\ + (u_{0,-1,0} - u_{0,0,0})^2 + (u_{1,0,0} - u_{0,0,0})^2 + (u_{-1,0,0} - u_{0,0,0})^2] \\ \dots$$

$$u_{i,j,l}(0) = 0, \quad \dot{u}_{i,j,l}(0) = \delta_{0i}\delta_{0j}\delta_{0l}, \quad \delta = \beta V / M\omega_0^3$$

Рассмотрим случай, когда $\delta \ll 1$, и будем искать решение в виде ряда по δ

$$u_{i,j,l} = u_{i,j,l}^{(0)} + \delta u_{i,j,l}^{(1)} + \dots \tag{3.10}$$

Подставляя (3.10) в (3.9), имеем в нулевом приближении

$$\ddot{u}_{i,j,l}^{(0)} = L_{i,j,l}(u^{(0)}), \quad u_{i,j,l}^{(0)}(0) = 0 \tag{3.11}$$

$$\dot{u}_{i,j,l}^{(0)}(0) = \delta_{0i}\delta_{0j}\delta_{0l}$$

в первом приближении

$$\ddot{u}_{0,0,0}^{(1)} = L_{0,0,0}(u^{(1)}) + (u_{0,0,1}^{(0)} - u_{0,0,0}^{(0)})^2 + \lambda[(u_{1,0,0}^{(0)} - u_{0,0,0}^{(0)})^2 + (u_{-1,0,0}^{(0)} - u_{0,0,0}^{(0)})^2 + \\ + (u_{0,1,0}^{(0)} - u_{0,0,0}^{(0)})^2 + (u_{0,-1,0}^{(0)} - u_{0,0,0}^{(0)})^2] \\ \dots \tag{3.12}$$

$$u_{i,j,l}^{(1)}(0) = \dot{u}_{i,j,l}^{(1)}(0) = 0$$

Для решения уравнений (3.11), (3.12) применим метод работы [8]. Опуская промежуточные выкладки, получаем

$$z_{0,0,0}^{(0)}(\tau) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \iiint_{-\pi}^{\pi} (1 + \cos \theta_z) \frac{\sin \omega_z \tau}{\omega_z} d\theta \tag{3.13}$$

$$\omega_z^2 = \sin^2 1/2\theta_z + \lambda(\sin^2 1/2\theta_x + \sin^2 1/2\theta_y), \quad d\theta = d\theta_x d\theta_y d\theta_z$$

$$z_{0,0,0}^{(1)}(t) = \int_0^t [F_1(t-\tau)g_1(\tau) + F_2(t-\tau)g_2(\tau)] d\tau$$

$$g_1(\tau) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \iiint_{-\pi}^{\pi} 2 \sin^2 \theta_z \frac{\sin \omega_z \tau}{\omega_z} d\theta \quad (3.14)$$

$$g_2(\tau) = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^3 \iiint_{-\pi}^{\pi} (1 + \cos \theta_z)(1 - \cos \theta_z) \frac{\sin \omega_z \tau}{\omega_z} d\theta$$

$$F_1(t) = g_1^2(t), \quad F_2(t) = g_2^2(t)$$

Интегралы в формулах (3.13), (3.14) вычислялись методом Гаусса. Зная $u_{0,0,0}(t)$ и уравнение движения атома газа $u_1(t)$, величину μ^* можно найти, используя соотношения (3.5). Однако это проще сделать геометрически, проведя касательную из начала координат к кривой $u_{0,0,0}(t)$. При $\delta = -0.1$ имеем

$$\lambda = 1, \quad \mu^* \approx 0.81; \quad \lambda = 0.25, \quad \mu^* \approx 0.83$$

Сравнение полученных значений μ^* с величинами, полученными в случае действия только упругих сил ($\lambda = 1; \mu^* = 0.834; \lambda = 0.25; \mu^* = 0.885$), показывает, что учет ангармоничности приводит к уменьшению значений μ^* , т. е. к уменьшению области применимости (по μ) модели свободных частиц при $K \rightarrow 0$ для лобового столкновения.

Автор благодарит М. Н. Когана и В. В. Михайлова за обсуждение данной работы.

Поступила 30 III 1971

ЛИТЕРАТУРА

1. Френкель Я. И. К теории явления аккомодации и конденсации. Усп. физ. н., 1938, т. 20, № 1.
2. Oman R. A., Vogan A., Weiser C. H., Li C. H. Interaction of gas molecules with an ideal crystal surface. AIAA Journal, 1964, vol. 2, No. 10.
3. Рыжов Ю. А., Стриженов Д. С. О взаимодействии атомов с поверхностью твердого тела. ПМТФ, 1967, № 4.
4. Пярнпуу А. А. О вычислении коэффициентов аккомодации Инж. ж. 1965, т. 5, № 5.
5. Ерофеев А. И. Об обмене энергией и импульсом между атомами и молекулами газа и поверхностью твердого тела. ПМТФ, 1967, № 2.
6. Lorenzen J., Raff L. M. Theoretical investigation of gas solid interaction phenomena. II. Three-dimensional treatment. J. Chem. Phys., 1966, vol. 49, No. 3.
7. Zwanzig R. W. Collision of a gas atom with a cold surface J. Chem. Phys., 1960, vol. 32, No. 4.
8. Goodman F. O. The dynamics of a simple cubic lattics. I. Application to the theory of thermal accomodation coefficients. J. Phys. Chem. Solids, 1962, vol. 23, No. 9.
9. Chambers C. M., Kinzer E. T. Higher dimensional models: a theory of thermal accomodation coefficients. Surface Sci., 1966, vol. 4, No. 1.
10. Goodman F. O. Classical perturbation theory of the thermal accomodation coefficient inndimensions. Surface Sci., 1968, vol. 11, No. 2.
11. Ерофеев А. И. О взаимодействии быстрых частиц с поверхностью твердого тела. Уч. зап. ЦАГИ, 1970, т. 1, № 4.
12. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М., Гостехиздат 1957.
13. Goodman F. O. On the theory of accomodation coefficients V. Classical theory of thermal accomodation and trapping Rarefied Gas Dynamics, suppl. 3. vol. 2, New York — London, Acad. Press., 1966.
14. Secret D. Linear collision of a classical harmonic oscillator with a particle at high energies. J. Chem. Phys., 1969, vol. 51, No. 1.
15. Hurlbut F. C. Current developments in the study of gas-surface interactions. Rarefied Gas Dynamics, suppl. 4, vol. 1, New York — London, Acad. Press., 1967.
16. Пярнпуу А. А. Расчет взаимодействия моноэнергетического пучка атомов газа с трехмерным кристаллом., ПМТФ, 1970, № 2.