

## Моделирование структуры рельефа реальных поверхностей на основе теории фракталов для определения скоростей гетерогенных реакций

А.Л. Кусов, Ю.В. Брылкин

Центральный научно-исследовательский институт машиностроения (ЦНИИмаш),  
г. Королёв  
kusov\_al@mail.ru

Скорости гетерогенных реакций зависят от площади, доступной для взаимодействия атомов и молекул с поверхностью. Существует ГОСТ 2789-73, в котором шероховатость поверхности предлагается описывать 6-ю параметрами, что делает его фактически бесполезным для использования при численном моделировании взаимодействия молекул с поверхностью. Фрактальная теория предлагает красивый и изящный способ описания шероховатости всего одним параметром – фрактальной размерностью  $D$ . Площадь фрактальной поверхности  $S$  определяется выражением

$$S/S_0 = (b/b_0)^{-D+2},$$

где  $S_0$  – площадь при максимальном размере  $b_0$ ,  $b$  – минимальный масштаб, при котором поверхность можно рассматривать как гладкую. В работе на основе измерения топологии поверхности сканирующим туннельным микроскопом показано, что структура реальных поверхностей является фракталоподобной.

Расчёты методом прямого статистического моделирования Монте-Карло (ПСМ) показали, что в условиях, когда размер шероховатости меньше длины свободного пробега, среднее число столкновений  $M$  молекул с поверхностью пропорционально площади поверхности

$$M = S/S_1,$$

где  $S_1$  – площадь проекции поверхности на подстилающую плоскость. Вероятность гетерогенной реакции  $\alpha$ , например, ударной рекомбинации, зависит от среднего числа столкновений  $M$  как

$$\alpha_e = 1 - (1 - \alpha_{e0})^{[M]} + \alpha_{e0}(1 - \alpha_{e0})^{[M]}(M - [M]),$$

где  $[M]$  – целая часть от  $M$ ,  $\alpha_{e0}$  – вероятность реакции при однократном столкновении.