

ИССЛЕДОВАНИЕ РАССЕЙЯНИЯ ГАЗА НА ПОВЕРХНОСТИ С ПОМОЩЬЮ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ И СРАВНЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ С ТЕОРЕТИЧЕСКИМИ МОДЕЛЯМИ

В.Л. Ковалев, А.Н. Якунчиков

МГУ им. М.В.Ломоносова, Москва, 119991, ГСП-1, Ленинские горы, МГУ, д. 1

Аннотация

Проведено сравнение результатов молекулярно-динамического моделирования рассеяния молекул водорода на поверхности графита с моделями рассеяния Максвелла, Эпштейна и Черчиньяни – Лэмпис. Проанализированы достоинства и недостатки перечисленных моделей при различных условиях. Предложено новое ядро рассеяния, являющееся комбинацией моделей Эпштейна и Черчиньяни – Лэмпис, которое лучше согласуется с результатами траекторных расчетов.

INVESTIGATION OF GAS-SURFACE SCATTERING THROUGH MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION AND RESULTS COMPARISON WITH ANALYTICAL MODELS

Valery L. Kovalev, Artem N. Yakunchikov

Lomonosov Moscow State University, Russia, Moscow, 119991

The paper is devoted to the comparison of different scattering models for molecular hydrogen interacting with a graphite surface. Such problems occur in many applications related to gas–solid problems in highaltitude-vehicle thermodynamics and nanotechnologies. The scattering kernels by Maxwell, Epstein and Cercignani – Lampis are analyzed for different conditions. A new analytical scattering kernel based on the combination of Epstein and Cercignani – Lampis models is proposed for better agreement with the trajectory computational results.

1. ВВЕДЕНИЕ

Постоянно развивающиеся технологии обработки поверхности открыли возможности создания наноструктурированных материалов для современных микро- и наноразмерных газодинамических систем, таких как транспирационные и аккомодационные вакуумные насосы, мембраны и покрытия со специальными свойствами. Характеристики рассеяния таких материалов существенно отличаются от соответствующих характеристик технических поверхностей. Поэтому при постановке граничных условий в задачах о внутренних течениях или обтекании требуется обращаться к более сложным моделям, чем зеркально-диффузная модель Максвелла.

Первоначально исследование законов рассеяния было связано с развитием высотной аэродинамики и необходимостью описывать потоки основных термодинамических величин к поверхности тела в задачах обтекания в свободномолекулярном или переходном режиме [1–5], а также для определения граничных условий скольжения. При этом обычно вводятся макроскопические коэффициенты обмена или соответствующие им коэффициенты аккомодации, характеризующие обмен энергией и импульсом между газовым потоком и телом. Выбор этого способа описания поверхностного взаимодействия делался в предположении того, что зависимости коэффициентов обмена более консервативны, чем зависимости самих потоков импульса или энергии для отраженного потока. Однако большинство экспериментов по рассеянию свидетельствуют о существенной зависимости коэффициентов аккомодации от энергии пучка молекул до отражения.

Задача детального описания взаимодействия молекул газа с атомной структурой твердого тела успешно решается с помощью метода молекулярно-динамического моделирования [6–9]. Основной целью таких исследований является определение функции распределения скоростей отраженных от поверхности молекул в зависимости от направления и величины скорости падающих молекул с учетом атомной структуры твердого тела и ее теплового движения. Другими словами, с помощью расчета большого количества траекторий отражения газовых молекул от поверхности твердого тела определяется ядро рассеяния. Получаемые ядра существенно отличаются от существующих аналитических моделей рассеяния, при этом имеет место значительная зависимость коэффициентов аккомодации от энергии падающей молекулы и температуры тела [8, 9].

В настоящей работе проведено сравнение результатов молекулярно-динамических расчетов рассеяния водорода на графите с моделями рассеяния Максвелла, Эпштейна и Черчиньяни – Лэмпис. Предложена новая обобщенная форма ядра рассеяния, лучше согласующаяся с результатами траекторных расчетов.

2. АНАЛИТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ РАССЕЙЯНИЯ

2.1. Граничное условие для функции распределения скоростей

Граничное условие для функции распределения скоростей $f(v)$ имеет вид [10]

$$|u_n| f(u) = \int_{u'_n < 0} R(u', u) |u'_n| f(u') du',$$

где u' , u – скорости падающих и отраженных молекул соответственно. Ядро рассеяния $R(u', u)$ должно быть неотрицательным и удовлетворять условиям нормировки и взаимности:

$$R(u', u) \geq 0 \quad u' : u'_n < 0, \quad u : u_n > 0$$

$$\int_{u'_n > 0} R(u', u) du = 1, \quad u' : u'_n < 0;$$

$$|u'_n| M_w(u') R(u', u) = |u_n| M_w(u) R(-u, -u')$$

Здесь $M_w(u)$ – максвелловская функция распределения, соответствующая температуре стенки T_w

$$M_w(u) = \left(\frac{\beta_w}{\sqrt{\pi}} \right)^3 \exp(-\beta_w^2 |u|^2), \quad \beta_w = \sqrt{\frac{m}{2kT_w}},$$

где m – масса молекулы, k – константа Больцмана.

Рассмотрим наиболее известные аналитические модели рассеяния.

2.2. Ядро Максвелла

Первая из них – модель зеркально-диффузного отражения, предложенная Максвеллом [11]. В рамках этой модели считается, что часть $(1 - \varepsilon_0)$ молекул отражается от поверхности зеркально (скорость параллельная поверхности сохраняется, а нормальная меняется на противоположную), а другая часть (ε_0) рассеивается в соответствии с равновесным максвелловским распределением $M_w(u)$ с температурой поверхности. В этом случае ядро рассеяния записывается в виде суммы равновесной максвелловской функции и дельта-функции с соответствующими коэффициентами

$$R_M(u', u) = 2\varepsilon_0 \beta_w^4 u_n \exp(-\beta_w^2 u^2) / \pi + (1 - \varepsilon_0) \cdot \delta[u' - (u - 2u_n n)],$$

где ε_0 – постоянная величина, называемая коэффициентом «диффузности». Для молекул, имеющих до столкновения касательную скорость u' и кинетическую энергию $e' = m|u'|^2/2$, средняя касательная скорость после столкновения будет $u''_\tau = (1 - \varepsilon_0)u'_\tau$, а средняя кинетическая энергия $-e'' = \varepsilon_0 e_w + (1 - \varepsilon_0)e'$, где $e_w = m/\beta_w^2$ – энергия, соответствующая температуре поверхности T_w . Поэтому коэффициент аккомодации касательного импульса и коэффициент аккомодации энергии для любой начальной скорости u' будут

$$\alpha_\tau = (u''_\tau - u'_\tau) / u'_\tau = \varepsilon_0,$$

$$\alpha_E = (e' - e'') / (e' - e_w) = \varepsilon_0.$$

Таким образом, коэффициент ε_0 является одновременно коэффициентом аккомодации касательного импульса и энергии. При этом функция распределения для каждой из компонент скорости не зависит от других компонент скорости до отражения, т.е. рассеяние различных компонент скорости является независимым.

2.3. Ядро Эпштейна

Обобщением зеркально-диффузной модели на случай, когда имеется зависимость коэффициентов аккомодации от параметров, падающих на поверхность молекул, является модель Эпштейна [12]. Ядро Эпштейна

$$R_{Ep}(u', u) = \varepsilon(u') \left(\int_{v_n > 0} v_n \exp(-\beta_w^2 v^2) \cdot \varepsilon(v) dv \right)^{-1} \times u_n \exp(-\beta_w^2 u^2) \cdot \varepsilon(u) + [1 - \varepsilon(u')] \cdot \delta[u' - (u - 2u_n n)],$$

где $\varepsilon(u')$ – коэффициент аккомодации, в качестве которого выбирается любая четная функция, удовлетворяющая условию $0 \leq \varepsilon(u') \leq 1$. Эпштейном предложен следующий вид зависимости коэффициента аккомодации:

$$\varepsilon(u') = \exp(-\beta_1^2 u'^2) + \varepsilon_\infty [1 - \exp(-\beta_2^2 u'^2)],$$

где β_1 , β_2 , ε_∞ – свободные параметры.

Как видно из записи $R_{Ep}(u', u)$, функции распределения для различных компонент скорости в общем случае не являются независимыми, т.е. распределение нормальной компоненты скорости после отражения зависит от значения касательных компонент скорости до столкновения и наоборот.

2.3. Ядро Черчиньяни – Лэмпис

В отличие от ядер Максвелла и Эпштейна, которые являются комбинацией моделей полностью зеркального и полностью диффузного отражения, в модели Черчиньяни – Лэмпис [13] предполагается, что компоненты скорости отраженных молекул имеют максвелловское распределение с некоторым математическим ожиданием и дисперсией:

$$R_{CL}(u', u) = \frac{2\beta_w^4 u_n}{\pi} \frac{1}{\alpha_n} \frac{1}{\alpha_\tau (2 - \alpha_\tau)} \times \exp\left[-\beta_w^2 \frac{1}{\alpha_n} (u_n^2 + (1 - \alpha_n) u_n'^2)\right] \times \exp\left[-\beta_w^2 \frac{1}{\alpha_\tau (2 - \alpha_\tau)} (u_\tau - (1 - \alpha_\tau) u'_\tau)^2\right] \times J_0\left(\frac{\sqrt{1 - \alpha_n}}{\alpha_n} 2\beta_w^2 u_n u'_n\right),$$

где α_n – коэффициент аккомодации кинетической энергии в нормальном направлении; α_τ – коэффициент аккомодации касательного импульса; $J_0(x)$ – модифицированная функция Бесселя 1-го типа 0-го порядка

$$J_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp(x \cdot \cos \phi) d\phi.$$

Видно, что $R_{CL}(u', u)$ представляет собой произведение трех независимых распределений – одного для нормальной компоненты скорости и двух для касательных компонент.

Для касательных компонент имеем максвелловское распределение с математическим ожиданием $(1-\alpha_\tau)u'_\tau$. При стремлении $\alpha_\tau \rightarrow 0$ распределение будет стремиться к зеркальному, а $\alpha_\tau = 1$ соответствует полной диффузии.

Для записи распределения нормальной компоненты скорости использована функция $J_0(x)$. С помощью такой конструкции удается сохранить возможность аналитического интегрирования $R_{CL}(u',u)$. Нетрудно показать, что при $\alpha_n \rightarrow 0$ это распределение стремится к зеркальному, а при $\alpha_n = 1$ оно является равновесным максвелловским для температуры поверхности.

3. МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ

В работе [9] изучалось взаимодействие молекулярного водорода с поверхностью графита. Проводились молекулярно-динамические расчеты траекторий столкновения молекул газа со структурой из атомов углерода без учета внутренних степеней свободы в молекуле водорода.

Для каждой температуры поверхности $T_w = 87, 283, 1120$ К было рассчитано порядка 10^7 траекторий для различных начальных скоростей u . Было установлено, что при перечисленных выше T_w и модуле начальной скорости молекулы водорода до 10^4 м/с направление касательной составляющей скорости слабо влияет на среднюю касательную скорость частицы после отражения, т.е. рассеяние можно считать изотропным [9].

Анализ результатов расчетов показывает, что при низких начальных скоростях падающих молекул функции распределения скоростей отраженных молекул близки к равновесным максвелловским, соответствующим температуре поверхности. При увеличении начальных скоростей появляется зависимость функций распределения скоростей отраженного потока от начальной скорости.

На рис. 1, 2 представлены функции распределения скоростей отраженных молекул при $T_w = 283$ К и $T_w = 87$ К в случае, когда $\beta_w |u'| = 2.5$, т.е. для достаточно больших начальных скоростей по отношению к средним тепловым скоростям.

Видно, что при $T_w = 87$ К (рис. 2) и при больших углах θ функция распределения касательной скорости имеет два максимума при $u_\tau = 0$ и $u_\tau \approx u'_\tau$. При $T_w = 283$ К функции распределения имеют вид нормального распределения с различными для каждого θ математическими ожиданиями и дисперсиями. В этих случаях единственный максимум достигается при $u_\tau \approx u'_\tau$, т.е. соответствует частичной аккомодации с поверхностью.

На рис. 3 представлена зависимость коэффициентов аккомодации касательного импульса от касательной компоненты начальной скорости u'_τ при фиксированном модуле начальной скорости $|u'|$. Коэффициенты α_τ , полученные при $\beta_w |u'| = 0.6$ (кривые 1 и 3), значительно выше соответствующих им коэффициентов при $\beta_w |u'| = 2.5$ (кривые 2 и 4), что свидетельствует о существенной зависимости α_τ от величины вектора начальной скорости молекулы.

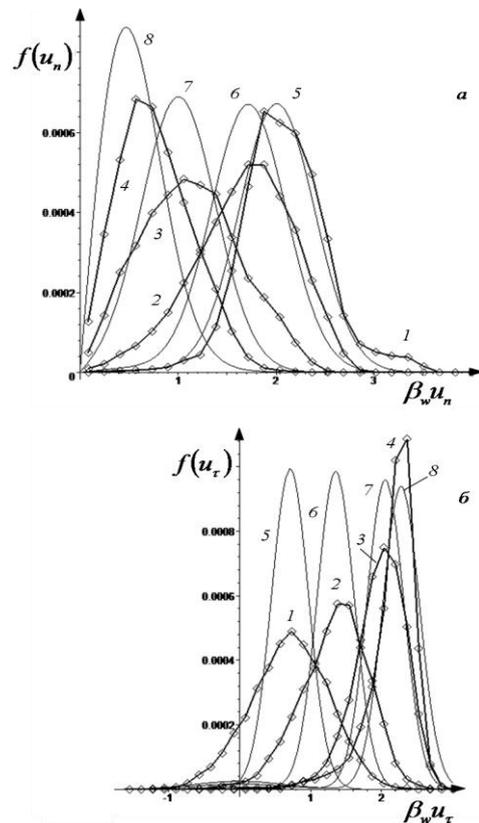


Рис.1. Функция распределения нормальной (а) и касательной (б) компоненты скорости при $\beta_w |u'| = 2.5$: 1–4 – траекторные расчеты при $\theta = 2 \cdot \pi/20, 4 \cdot \pi/20, 7 \cdot \pi/20, 9 \cdot \pi/20$; 5–8 – ядро $R_s(u',u)$ при тех же θ ; $T_w = 283$ К

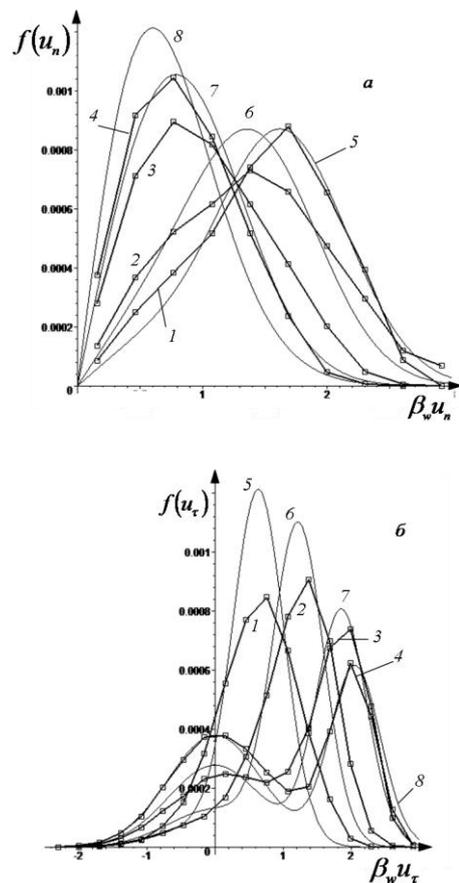


Рис.2. То же, что на рис. 1: $T_w = 87$ К

Кроме того, представленные результаты показывают, что при низких температурах кроме зависимости от модуля начальной скорости $|u'|$, коэффициент α_τ существенно зависит от направления u' , т.е. от угла падения θ (см. кривые 1, 2 рис. 3). При комнатной температуре зависимость α_τ от угла падения незначительная (см. кривые 3, 4 рис. 3).

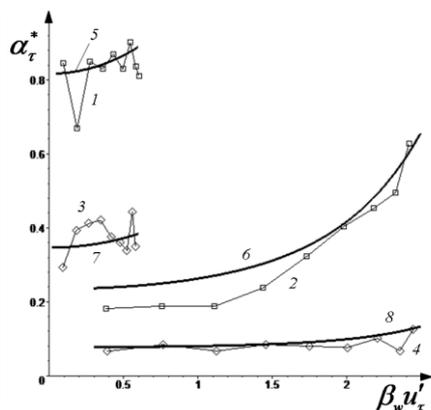


Рис.3. Коэффициент аккомодации касательного импульса в зависимости от касательной компоненты начальной скорости u'_τ : 1–4 – траекторные расчеты; 5–8 – ядро $R_*(u', u)$; $T_w = 87$ К (1, 2, 5, 6) и 283 К (3, 4, 7, 8); $\beta_w |u'| = 0.6$ (1, 3, 5, 7) и 2.5 (2, 4, 6, 8)

4. АНАЛИЗ МОДЕЛЕЙ

Так как коэффициенты аккомодации существенно зависят от энергии падающей молекулы [9], то с результатами траекторных расчетов качественно согласуется только модель Эпштейна. В других двух моделях коэффициенты аккомодации постоянны и не зависят от величины скорости падающей молекулы. Это является достаточно грубым допущением для водорода на графите.

По результатам траекторных расчетов при низких температурах поверхности $T_w = 87$ К (см. рис. 2) функция распределения скорости имеет два максимума. Первый из них соответствует полной аккомодации, а второй достигается в u_τ , близких к начальной касательной скорости u'_τ . Объясняется это тем, что часть молекул физически адсорбировалась на поверхности, при этом произошла практически полная аккомодация с поверхностью. Следовательно, после десорбции функцию распределения скорости для таких молекул можно считать полностью равновесной с поверхностью, чему и соответствует максимум в нуле. Второй максимум соответствует случаю, когда адсорбция не произошла и имела место частичная аккомодация с поверхностью. Такие распределения скоростей качественно можно описать с помощью модели Максвелла или ее обобщения – модели Эпштейна, в которых часть молекул рассеивается диффузно, а часть зеркально. Отличием является только то, что закон отражения молекул, с которыми адсорбция–десорбция не произошла (второй максимум), не является полностью зеркальным.

Следовательно, и с точки зрения распределения скорости в отраженном потоке, и с точки зрения описания обмена импульсом и энергией, модель Эпштейна

на лучше всех из рассмотренных аналитических моделей рассеяния согласуется с результатами молекулярно-динамических расчетов. Но даже при использовании этой модели имеются существенные отличия в функции распределения скоростей после отражения, поскольку рассеяние молекул, отразившихся «без адсорбции», происходит с некоторым ненулевым коэффициентом аккомодации.

Анализ распределений скоростей и коэффициентов аккомодации показывает, что рассеяние следует описывать с помощью комбинации полной диффузии, моделирующей высокую аккомодацию, связанную с эффектом физической адсорбции, и некоторого ядра, аналогичного по форме ядру Черчиньяни – Лэмпис.

5. ПРЕДЛАГАЕМАЯ МОДЕЛЬ

5.1. Оформление рисунков

Запишем ядро рассеяния, комбинируя модель Эпштейна и Черчиньяни – Лэмпис

$$R_*(u', u) = \int R_{Ep}(u', u'') R_{CL}(u'', u) du''.$$

Физический смысл данного выражения состоит в том, что сначала в зависимости от начальной скорости падающей молекулы рассматривается возможность физической адсорбции, чему соответствует ядро Эпштейна. Если молекула адсорбируется, то после десорбции скорость u'' будет иметь распределение, соответствующее равновесному взаимодействию с поверхностью. Когда адсорбция не произошла, молекула рассеивается в соответствии с моделью Черчиньяни – Лэмпис.

Аналогичный подход был использован в работе [8], где функции распределения скоростей для азота на платине представлены с помощью ядра, представляющего собой сумму равновесной максвелловской и функции типа Черчиньяни – Лэмпис с переменным коэффициентом. Зависимость этого коэффициента от начальной скорости была подобрана с помощью аппроксимации. При этом условию взаимности удалось удовлетворить только численно.

Нетрудно убедиться, что предложенная выше функция $R_*(u', u)$ удовлетворяет всем трем необходимым для ядра условиям – неотрицательности, нормировки и взаимности.

Получим выражение для $R_*(u', u)$ в явном виде, взяв промежуточный интеграл по u'' . В качестве коэффициента $\varepsilon(u')$ в ядре Эпштейна будем использовать следующую обобщенную зависимость:

$$\varepsilon_*(u') = \varepsilon_0 \exp\left(-\beta_{1n}^2 u_n'^2 - \beta_{1\tau}^2 |u'_\tau|^2\right) + \varepsilon_\infty \left[1 - \exp\left(-\beta_{2n}^2 u_n'^2 - \beta_{2\tau}^2 |u'_\tau|^2\right)\right],$$

где $\beta_{1n}, \beta_{1\tau}, \beta_{2n}, \beta_{2\tau}, \varepsilon_0, \varepsilon_\infty$ – свободные параметры.

В этом случае

$$R_*(u', u) = \varepsilon_*(u') \frac{\varepsilon_0 R_1(u) + \varepsilon_\infty (R_0(u) - R_2(u))}{\varepsilon_0 \gamma_1 + \varepsilon_\infty (1 - \gamma_2)} + (1 - \varepsilon_*(u')) R_{CL}(u', u),$$

$$R_0(u) = \frac{2\beta_w^4}{\pi} u_n \exp(-\beta_w^2 |u|^2),$$

$$R_i(u) = \frac{2\beta_w^4}{\pi} \lambda_{i,n} \lambda_{i,\tau} u_n \exp \left(\begin{array}{l} -\lambda_{i,n} (\beta_w^2 + \beta_{i,n}^2) u_n^2 \\ -\lambda_{i,\tau} (\beta_w^2 + \beta_{i,\tau}^2) |u_\tau|^2 \end{array} \right) \quad i=1,2$$

$$\lambda_{i,n} = \frac{\beta_w^2}{(\beta_w^2 + \alpha_n \beta_{i,n}^2)}, \quad \lambda_{i,\tau} = \frac{\beta_w^2}{(\beta_w^2 + \alpha_\tau (2 - \alpha_\tau) \beta_{i,\tau}^2)},$$

$$\gamma_i = \frac{\beta_w^4}{(\beta_w^2 + \beta_{i,n}^2)(\beta_w^2 + \beta_{i,\tau}^2)}$$

Рассмотрим предельные случаи для построенного ядра:

1. $R_*(u', u) \rightarrow R_M(u', u)$ при

$$\beta_{1n} = \beta_{1\tau} = \beta_{2n} = \beta_{2\tau} = 0, \quad \alpha_n \rightarrow 0, \quad \alpha_\tau \rightarrow 0$$

2. $R_*(u', u) \rightarrow R_{Ep}(u', u)$ при $\beta_{1n} = \beta_{1\tau}$,

$$\beta_{2n} = \beta_{2\tau}, \quad \varepsilon_0 = 1, \quad \alpha_n \rightarrow 0, \quad \alpha_\tau \rightarrow 0$$

3. $R_*(u', u) = R_{CL}(u', u)$ при $\varepsilon_0 = \varepsilon_\infty = 0$

Рассеяние нормальной и касательной компоненты скорости в общем случае зависимы, поскольку $\varepsilon_*(u')$ может зависеть от всех компонент начальной скорости.

Коэффициент аккомодации касательного импульса α_τ^* для падающих частиц с начальной скоростью u'

$$\alpha_\tau^* = (1 - \alpha_\tau) \varepsilon_*(u') + \alpha_\tau$$

Полученные при молекулярно-динамическом расчете функции распределения скоростей для отраженных молекул и рассчитанные по ним коэффициенты аккомодации использовались для нахождения параметров β_{1n} , $\beta_{1\tau}$, β_{2n} , $\beta_{2\tau}$, ε_0 , ε_∞ , α_n , α_τ . При этом удалось добиться удовлетворительного согласия построенной модели и траекторных расчетов даже в случае, если упростить $\varepsilon_*(u')$ и пренебречь в нем вторым слагаемым, т.е. при $\varepsilon_\infty = 0$. В этом случае в качестве свободных параметров остаются только ε_0 , $\beta_{1\tau}$, β_{1n} , α_n , α_τ .

При подборе параметров наибольшее внимание уделялось согласованию макрохарактеристик, таких как зависимости касательного импульса и энергии после столкновения от величины и направления начальной скорости падающей на поверхность молекулы. Из рис. 3 видно, что с помощью построенного ядра рассеяния $R_*(u', u)$ удалось хорошо описать результаты по обмену касательным импульсом, полученные в траекторных расчетах. Данные зависимости α_τ^* получены при $\varepsilon_0 = 0.9$, $\beta_{1\tau} = 1.2 \times 10^{-7}$ c/м, $\beta_{1n} = 5.5 \times 10^{-7}$ c/м, $\alpha_n = 0.55$, $\alpha_\tau = 0.15$ для низкой температуры поверхности $T_w = 87$ К и при $\varepsilon_0 = 0.37$, $\beta_{1\tau} = 1.2 \times 10^{-7}$ c/м, $\beta_{1n} = 2.7 \times 10^{-7}$ c/м, $\alpha_n = 0.3$, $\alpha_\tau = 0.07$ для $T_w = 283$ К.

На рис. 1 и 2 представлено сравнение функций распределения скорости после отражения для $R_*(u', u)$ и траекторных расчетов при $T_w = 283$ и 87 К. Кривые 1–4 соответствуют траекторным расчетам, а 5–8 – ядру $R_*(u', u)$ для приведенных выше значений ε_0 , $\beta_{1\tau}$, β_{1n} , α_n , α_τ . Как видно, при $T_w = 283$ К (рис. 1) имеются заметные отличия в дисперсии функций распре-

деления касательной скорости. При $T_w = 87$ К (рис. 2) результаты траекторных расчетов хорошо описываются с помощью $R_*(u', u)$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате анализа функций распределения скоростей и коэффициентов аккомодации, полученных с помощью молекулярно-динамических расчетов траекторий отражения молекул водорода на графите, показано, что коэффициенты аккомодации энергии и импульса существенно зависят от величины и направления начальной скорости падающей молекулы. При низких температурах поверхности часть молекул водорода физически адсорбируется на графите, некоторое время находится вблизи поверхности и впоследствии десорбируется. Распределение скоростей таких молекул после отражения можно считать равновесным максвелловским, соответствующим температуре стенки. Другая часть молекул рассеивается без адсорбции с некоторыми ненулевыми коэффициентами аккомодации. Из трех рассмотренных аналитических моделей рассеяния (Максвелла, Эпштейна и Черчиньяни – Лэмпис) для описания результатов траекторных расчетов наиболее пригодна модель Эпштейна, которая, в отличие от остальных, допускает зависимость коэффициентов аккомодации от начальной скорости падающей молекулы. При этом сами распределения скоростей отраженных молекул удовлетворительно описать с ее помощью не удается.

Основываясь на полученных результатах, предложена новая модель ядра рассеяния, являющаяся комбинацией моделей Эпштейна и Черчиньяни – Лэмпис. Преимуществом такого ядра перед использованием численных аппроксимаций результатов траекторных расчетов является возможность аналитического интегрирования и нахождения потоков термодинамических величин в явном виде. Показано, что построенное ядро качественно и количественно согласуется с результатами траекторных расчетов.

Расчеты проведены на суперкомпьютерном комплексе СКИФ-МГУ «Чебышев». Работа выполнена при поддержке РФФИ (№ 11-01-00280 а, № 12-01-31450 мол_а).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Коган М.Н. Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967. 440с.
2. Ерофеев А.И. О влиянии шероховатости на взаимодействия потока газа с поверхностью твердого тела // Изв. АН СССР. МЖГ. 1967. №6. с.82–89.
3. Пярнпуу А.А. Взаимодействие молекул газа с поверхностями. М.: Наука, 1974. 190 с.
4. Баранцев П.Г. Взаимодействие разреженных газов с обтекаемыми поверхностями. М.: Наука, 1975. 344с.
5. Борисов С.Ф., Балахонов В.А., Губанов В.А. Взаимодействие газов с поверхностью твердых тел. М.: Наука, 1988. 200 с.
6. Cao B., Sun J., Chen M. Molecular momentum transport at fluid-solid interfaces in MEMS/NEMS: a review // Int. J. Mol. Sci. 2009. V. 10. № 11. Pp. 4638–4706.
7. Yamaguchi H., Shobatake K., Niimi T. Molecular dynamic study on rare gas-graphite (0001) surface scattering // Rarefied Gas Dynam.: 26th Int. Symp. 2008. Pp. 647–652.

8. Yamamoto K., Takeuchi H., Hyakutake T. Scattering properties and scattering kernel based on the molecular dynamics analysis of gas-wall interaction // *Phys. Fluids*. 2007. V. 19, 087102.
9. Ковалев В.Л., Якунчиков А.Н. Коэффициенты аккомодации для молекулярного водорода на поверхности графита // *Изв. РАН. МЖГ*. 2010. № 6. С. 158–165.
10. Cercignani C. *The Boltzmann Equation and its Application*. N.Y.: Springer, 1988.
11. Maxwell J.C. On stresses in rarefied gases arising from inequalities of temperatures // *Philos. T. Roy. Soc.* 1879. 170. Pp. 231–256.
12. Epstein M. A model of the wall boundary condition in kinetic theory // *AIAA*. 1967. V.5. №10. Pp.1797–1800.
13. Cercignani C., Lampis M. Kinetic model for gas-surface interaction // *Transp. J. Theory and Stat. Phys.* 1971. V.1, Pp.101–114.