01;03 Прямое статистическое моделирование процессов образования и роста кластеров при расширении пара от внезапно включенного сферического источника. I. Истечение в вакуум

© Г.А. Лукьянов, О.И. Симакова, Н.Ю. Быков

Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, 195251 Санкт-Петербург, Россия e-mail: luk@spbcas.ru

(Поступило в Редакцию 6 марта 2007 г.)

Рассмотрены процессы образования кластеров кремния при расширении пара в вакуум от внезапно включенного сферического источника. Для описания разлета пара и процесса конденсации использовался метод прямого статистического моделирования. Модель кластеризации включает описание процессов роста и распада кластеров, а также процессов энергообмена, сопровождающих указанные процессы. Рассмотрены основные закономерности образования и роста кластеров при разлете пара в вакуум. Данная модель и полученные результаты представляют существенный интерес для решения задач, связанных с испарением быстро нагретых малых частиц.

PACS: 51.10.+y

Введение

Как объект исследования процесс образования и роста кластеров при расширении пара в вакуум или газ низкого давления представляет интерес для многих приложений. К ним относятся, например, технологии синтеза кластеров и кластерных материалов из пара, получаемого в результате интенсивного испарения конденсированных веществ [1-3]. Большой интерес, в частности, представляют задачи, связанные с разлетом и конденсацией пара, образующегося при лазерном испарении малых твердых частиц аэрозолей [4-6]. В общем случае подобные задачи оказываются весьма сложными для теоретического исследования, поскольку требуют описания совокупности большого числа разнообразных и взаимосвязанных физических процессов, включая поглощение излучения, нагрев, плавление и испарение вещества, разлет образующегося пара с учетом процессов кластерообразования. Сложность и многопараметричность таких задач, как правило, затрудняет исследование общих закономерностей, присущих процессам образования кластеров при интенсивном расширении пара. Поэтому наряду с решением сложных реалистических задач необходимы более простые модельные постановки, в рамках которых возможно рассмотрение общих закономерностей кластерообразования при различных законах расширения пара.

В настоящей работе рассмотрена задача образования кластеров при расширении пара в вакуум от сферического внезапно включенного источника (ВВИ). Модель ВВИ является одной из простейших моделей нестационарной газовой динамики и достаточно широко используется при исследовании хода релаксационных процессов в импульсных струйных течениях [7,8]. Возможности детального изучения процессов образования и роста кластеров в условиях интенсивного неравновесного расширения пара до недавнего времени сдерживались отсутствием соответствующих моделей процесса кластерообразования, которые могли бы физически адекватно описывать эти процессы в целом, начиная с процесса образования димеров, и с учетом всей совокупности упругих и неупругих процессов взаимодействия частиц пара. В последнее время появились первые варианты таких моделей [9-11]. Эти модели базируются на методе прямого статистического моделирования (ПСМ) и включают описание процессов столкновения частиц и энергообмена между ними с той или иной степенью приближенности. В настоящей работе для моделирования процесса кластрообразования используется модель, аналогичная описанной в работе [9].

Метод и постановка задачи

Для моделирования течения конденсирующегося пара использован метод ПСМ в версии Берда [12]. В программе расчета реализована схема столкновений без временно́го счетчика (NTC-схема). Область моделирования представляет собой пространство между испаряющейся поверхностью и внешней границей, находящейся на достаточно большом расстоянии L от поверхности сферы $(L = R_{\infty} - R_w, R_w - радиус сферы, R_{\infty} - радиус$ внешней границы). Начальные и граничные условияформулируются следующим образом. В начальный момент времени <math>(t = 0) в области моделирования $(r > R_w)$ частицы отсутствуют. При t = 0 с испаряющейся поверхности $(r = R_w)$ начинается истечение газа. Для описания испарения используется закон Герца-Кнудсена, в соответствии с которым поток испаряющихся атомов равен

$$F^{+} = \frac{1}{4} n_s u_{\rm av} = \frac{p_s(T_w)}{(2\pi m k_B T_w)^{1/2}}.$$
 (1)

Здесь n_s и p_s — концентрация и давление насыщенного пара при температуре поверхности T_w , m — масса атома, $u_{av} = (8k_BT_w/\pi m)^{1/2}$ — средняя тепловая скорость испаряющихся частиц, k_B — постоянная Больцмана. Для определения давления $p_s(T_w)$ используется уравнение Клайперона-Клаузиуса.

Предполагается, что функция распределения по скоростям для испаряющихся с поверхности частиц при t > 0 постоянна во времени и является полумаксвелловской:

$$f_{w}^{+} = \frac{F^{+}}{2\pi} \left(\frac{1}{RT_{w}}\right)^{2} \exp\left(-\frac{v_{r}^{2} + v_{\varphi}^{2} + v_{\theta}^{2}}{2RT_{w}}\right)$$
$$= \frac{n_{s}}{(2\pi RT_{w})^{3/2}} \exp\left(-\frac{v_{r}^{2} + v_{\varphi}^{2} + v_{\theta}^{2}}{2RT_{w}}\right), \quad v_{r} > 0. \quad (2)$$

Здесь v_r , v_{φ} , v_{θ} — компоненты тепловой скорости частиц, R — газовая постоянная. Частицы, возвращающиеся на поверхность источника, исключаются из процесса моделирования, что соответствует условию их полной конденсации. Частицы, достигающие внешней границы области моделирования $r = R_{\infty}$, также исключаются из расчета (сверхзвуковая выходная граница).

Модель кластеризации предполагает, что все частицы являются нейтральными. Кластеры образуются в результате столкновений частиц. При этом учитываются следующие процессы:

упругое столкновение	$A + A \longrightarrow A' + A',$	(3)
атомов		

рекомбинация атомов $A + A + A \longrightarrow A'_2 + A'$, (4)

ассоциация кластера $A_i + A \longrightarrow A'_k (k = i + 1),$ (5) и атома

ассоциация кластеров $A_i + A_j \longrightarrow A'_k (k = i + j),$ (6)

испарение мономера $A_k \longrightarrow A_{k-1}' + A'.$ из кластера

Индекс ' относится к частицам после столкновения.

Для описания столкновений частиц используется модель твердых шаров. Кластер A_k характеризуется числом атомов k, массой m_k , радуисом r_k , поступательной скоростью v_k , внутренней энергией $E_{int,k}$ и энергией связи $E_b(k)$. Радиус кластера определяется в соответствии с моделью жидкой сферической капли [1]

$$r_k = r_w k^{1/3}, \quad r_w = \left(\frac{3m}{4\pi\rho}\right)^{1/3},$$
 (8)

(7)

где r_w — радиус Вигнера-Зейтса, ρ — плотность кремния. В рассматриваемой модели кластеры обладают

полностью возбужденными вращательными и колебательными степенями свободы. Внутренняя энергия кластера A_k представляется в виде

$$E_{\text{int},k} = E_{r,k} + E_{v,k},\tag{9}$$

$$E_{r,k} = \frac{\xi_r}{2} k_B T_{r,k}, \quad E_{v,k} = \xi_v k_B T_{v,k}.$$
 (10)

Здесь $E_{r,k}$ и $E_{v,k}$ — энергии вращательных и колебательных степеней свободы, ξ_r и ξ_v — числа вращательных и колебательных степеней свободы, $T_{r,k}$ и $T_{v,k}$ — вращательная и колебательная температуры кластера. Для димера $\xi_r = 2$ и $\xi_v = 1$, для других кластеров — $\xi_r = 3$ и $\xi_v = 3k - 6$. Предполагается, что $T_{r,k} = T_{v,k} = T_{int,k}$, $T_{int,k}$ — внутренняя температура кластера A_k .

Для определения энергии связи $E_b(k)$ были использованы данные [13], полученные с помощью "приближения локальной плотности" (*LDA*-приближения). Данные [13] были аппроксимированы формулой

$$E_b(k)/k = 4.5 - 12.384 \exp(-k^{2/3}) \,\mathrm{eV}.$$
 (11)

При описании энергообмена в случае тройного столкновения с последующим образованием димера рассматривались две стадии процесса. На первой в результате парного столкновения атомов образуется метастабильный комплекс. На второй стадии происходит столкновение метастабильного комплекса с третьим телом (мономером), забирающим избыточную энергию. Результатом второй стадии процесса является образование димера. Колебательно-вращательно-поступательный (VRT) обмен на второй стадии описывается моделью Ларсена-Боргнакке [12] с учетом выделения энергии связи при стабилизации димера. При этом полная энергия, подлежащая распределению между кинетической энергией относительного поступательного движения димера и третьего тела и внутренней энергией димера, равна

$$E = E_{t1} + E_{t2} + E_b(2), \tag{12}$$

где E_{t1} — энергия относительного движения метастабильного комплекса и третьего атома, E_{t2} — энергия относительного движения атомов на первой стадии процесса (парное столкновение с образованием метастабильного комплекса).

При ассоциации частиц в результате столкновений атом-кластер (5) или кластер-кластер (6) полагалось, что поступательная скорость нового кластера есть скорость центра масс сталкивающейся пары, а его внутренняя энергия равна

$$E_{\text{int},k} = E_{t,1-2} + E_{\text{int},1} + E_{\text{int},2} + \Delta E_b,$$
 (13)

$$\Delta E_b = E_b(k_1 + k_2) - E_b(k_1) - E_b(k_2).$$
(14)

Здесь индексы "1" и "2" относятся к первой и второй сталкивающимся частицам, $E_{t,1-2}$ — энергия относительного движения частиц.

Модель испарения базируется на использовании приближенной (оценочной) формулы теории РРК (Райса– Рамспергера–Касселя), определяющей скорость распада многоатомных молекул в процессе (7). В соответствии с этой формулой частота испарения атома из кластера определяется как:

$$v = v_0 k_s \exp\left[-\frac{\xi_v \Delta E_b}{2E_{v,k}}\right],\tag{15}$$

где v_0 — характерная частота колебаний, k_s — число поверхностных атомов. В наших расчетах $k_s = k$ (ввиду малого размера получаемых кластеров), $v_0 = 10^{13} \text{ s}^{-1}$.

Энергообмен при испарении атома из кластера (7) также описывается с помощью модели Ларсена-Боргнакке с учетом энергии, поглощающейся при распаде. При этом полная энергия, подлежащая распределению между соответствующими модами нового кластера и атома, равна

$$E = E_{\text{int},k} - \Delta E_b. \tag{16}$$

Энергия ΔE_b определяется по формуле (14). Скорость центра масс пары кластер A_{k-1} и атом A равна поступательной скорости начального кластера A_k .

В данной задаче в качестве характерного линейного размера естественно принять радиус сферы R_w . Для анализа и представления результатов моделирования будем использовать безразмерные параметры

$$\frac{n}{n_s}, \quad \frac{u}{(2RT_w)^{1/2}} = \beta u, \quad \frac{T}{T_w}, \quad c_k = \frac{n_k}{\sum_{k=1}^{\infty} kn_k}, \quad \tau = \frac{t}{t_0}.$$
(17)

Здесь *и* — средняя скорость потока, β — величина, обратно пропорциональная наиболее вероятной скорости частиц пара, c_k — объемная доля кластера k, $t_0 = R_w / \sqrt{2RT_w} = \beta R_w$ — характерное "газодинамическое" время.

Данное течение (поле относительных параметров) при выбранном начальном составе пара и заданной начальной функции распределения по скоростям (2) однозначано определяется двумя параметрами:

— числом Кнудсена

$$\mathrm{Kn} = \frac{\lambda_e}{R_w},\tag{18}$$

где $\lambda_e = 1/\sqrt{2}n_s\sigma$ — средняя длина свободного пробега атомов, определенная по плотности насыщенного пара n_s у поверхности, σ — сечение столкновения для атомов;

— безразмерным временем τ , которое связано с величиной $t_e = \beta \lambda_e$, характеризующей время между столкновениями атомов у поверхности, формулой

$$\tau = t/(\beta R_w) = t/t_e \mathrm{Kn} = \tau_e \mathrm{Kn}.$$
 (19)

Заметим, что задание величины температуры поверхности T_w определяет концентрацию насыщенного пара у

поверхности, а следовательно, и длину свободного пробега λ_e . Таким образом, при фиксированном значении T_w число Кнудсена напрямую определяется радиусом источника R_w .

Модель ВВИ можно рассматривать как приближенную модель начальной стадии испарения малой сферической частицы, быстро нагретой до температуры T_w . Характерное время испарения частицы радиусом R_w равно

$$t_{\rm ev} = \frac{k_p}{F^+ 4\pi R_w^2} = \frac{k_p}{\pi n_s u_{\rm av} R_w^2},$$
 (20)

где $k_p = (R_w/r_w)^3$ — число атомов в частице. Характерный размер облака пара, возникающего в процессе испарения частицы, равен $L = u_{av}t_{ev}$. С помощью (20) получаем

$$\frac{L}{R_w} = \frac{1}{\pi r_w^3 n_s}.$$
(21)

Из (21) следует, что относительный характерный размер облака пара L/R_w зависит только от величины n_s и не зависит от радиуса частицы. Значение $L/R_w = 1$ соответствует $n_s = 1/\pi r_w^3$. Для кремния $r_w = 1.65 \cdot 10^{-10}$ m, $L/R_w = 1$ — при $n_s = 7 \cdot 10^{28}$ m⁻³. Для частицы кремния с $R_w = 10^{-6}$ m и $T_w = 6000$ К при $n_s = 2.8 \cdot 10^{28}$ m⁻³ имеем $L/R_w = 2.5 \cdot 10^2$. Модель ВВИ приближенно верно описывает разлет пара в вакуум от быстро нагретой частицы на начальной стадии испарения, соответствующей $\tau \ll t_{ev}/(\beta R_w)$, когда можно пренебречь изменением радиуса частицы. При не слишком больших n_s размер образующегося облака пара даже на этой начальной стадии испарения значительно превосходит радиус частицы.

Результаты моделирования и их анализ

Моделирование выполнено для сферического источника атомарного пара кремния при $T_w = 6000$ К. Представленные результаты соответствуют режимам с Kn = 0.01 ($R_w = 10^{-6}$ m) и 0.001 ($R_w = 10^{-5}$ m).

Рассмотрим газодинамическую структуру течения и особенности хода процесса образования кластеров при Кп = 0.001. На рис. 1 приведены профили относительных концентрации n/n_s , скорости βu и температуры T/T_w смеси в моменты времени $\tau = 0.1$, 1 и 5 при наличии конденсации (пунктир) и без конденсации (сплошные линии). Как известно [7,8], при истечении пара от ВВИ в вакуум у поверхности источника с течением времени формируется область стационарного течения. Размер этой области увеличивается с ростом τ . В рассматриваемом случае при $\tau = 0.1$ область стационарного течения практически отсутствует, при $\tau = 1$ положение внешней границы этой области r_{st}/R_w примерно соответствует величине 0.5. При $\tau \ge 3$ имеем $r_{st}/R_w \cong \tau$.

Зависимость $r_{\rm st}/R_w$ от τ приведена на рис. 2. В области $r > r_{\rm st}$ течение является нестационарным. Характер изменения параметров пара в областях стационарного и нестационарного течения существенно различен (рис. 1). Для области нестационарного течения характерны значительно бо́льшие градиенты параметров. Расчеты показали, что все компоненты пара (атомы и кластеры) имеют практически одинаковые средние скорости и поступательные температуры.

При $\tau = 0.1$ влияние конденсации на газодинамические профили относительно невелико. Это прежде



Рис. 1. Профили концентрации n/n_s (*a*), скорости βu (*b*) и температуры T/T_w (*c*) смеси для Kn = 0.001 в моменты времени $\tau = 0.1$, 1 и 5; при наличии конденсации в потоке (пунктир), без конденсации (сплошные линии).



Рис. 2. Зависимости $r_{\rm st}/R_w$ и r_f/R_w от τ (Kn = 0.001).

всего относится к профилям n/n_s и βu (рис. 1, a и b). Влияние конденсации на профиль T/T_w значительно. Образование кластеров и сопровождающее конденсацию тепловыделение приводят к повышению поступальной температуры пара около поверхности источника.

С ростом τ влияние конденсации на процесс разлета пара возрастает. При $\tau \geq 1$ наличие конденсации в потоке приводит к уменьшению концентрации n/n_s (рис. 1, a) и увеличению температуры T/T_w смеси (рис. 1, c). Давление в потоке при этом возрастает по сравнению со случаем расширения атомарного пара, в результате чего разлетающийся пар приобретает бо́льшую скорость (рис. 1, b). Средняя температура T на некотором удалении от поверхности достигает максимума порядка $1.25T_w$. Положение этого максимума примерно соответствует внешней границе кнудсеновского слоя. Влияние конденсации на толщину кнудсеновского слоя в этом варианте расчета относительно невелико. Значительный нагрев газа у поверхности источника приводит к понижению числа Маха.

В таблице приведены данные о положении звуковой поверхности и значения основных газодинамических параметров на ней при Kn = 0.001 и τ = 5 для случаев, когда конденсация отсутствует и при наличии конденсации. Данные таблицы показывают, что влияние конденсации на параметры на звуковой поверхности весьма значительно. Толщина дозвукового слоя возрастает примерно в пять раз.

Сравнение профилей газодинамических параметров для вариантов расчета с учетом и без учета конденсации (рис. 1) показывает, что влияние конденсации

Положение звуковой поверхности и значения основных газодинамических параметров на ней (Kn = 0.001, τ = 5)

Вариант расчета	$r/R_w \ (M=1)$	n/n_s	βи	T/T_w
Без конденсации	1.016	0.387	0.638	0.670
С конденсацией	1.081	0.150	0.987	1.193



Рис. 3. Внутренние энергии кластеров k = 2, 3 и 10 в момент времени $\tau = 5$ (Kn = 0.001).

при $\tau = 1$ и 5 на процесс расширения пара ограничено областью стационарного течения и прилежащей к ней частью области нестационарного течения. Приближенно граница влияния конденсации на процесс расширения соответствует радиусу $r = r_f$, где $\beta u = 2.5$ (рис. 1). Зависимость $r_j(\tau)$ приведена на рис. 2. Отсутствие влияния конденсации на разлет пара при $r \ge r_f$ объясняется тем, что в этой области двигается пар, вылетевший с поверхности источника сразу после включения источника. Его разлет происходит практически бесстолкновительно.

На рис. 3 представлены радиальные профили средней внутренней энергии кластеров k = 2, 3 и 10 при $\tau = 5$. Величина E_{int} максимальна у поверхности источника и монотонно падает с ростом r. Около поверхности источника E_{int} равна примерно 1.4, 3.6 и 25 eV для k = 2, 3 и 10, что соответствует внутренней температуре *T*_{int} = 3170, 3620 и 4450 К. В процессе расширения пара до $r = 10R_w$ величина E_{int} для указанных кластеров уменьшается примерно в 4-5 раз. Кластеры k = 2, 3и 10 на внешней границе расчетной области имеют $T_{\rm int} = 680, 805$ и 1120 К соответственно, т.е. разлетаются в вакуум достаточно холодными. Основным механизмом уменьшения внутренней энергии кластеров является процесс испарения, поскольку при испарении кластер теряет весьма значительную энергию, затрачиваемую на отрыв каждого атома от кластера.

Рассмотрим теперь ход процессов образования кластеров. В начальный момент времени с поверхности источника начинается испарение атомов, тройные столкновения между которыми приводят к тому, что на некотором расстоянии от источника весьма быстро появляются димеры. К моменту времени $\tau = 0.1$ их массовая доля вблизи поверхности уже значительна и достигает 0.07 (рис. 4, *a*). Максимум kc_k для тримеров расположен примерно на том же расстоянии от источника и равен 0.045. Появляются и более крупные кластеры. Заметим, что рост кластеров происходит в основном в плотной области течения, прилегающей к поверхности источника. С течением времени и ростом облака пара область, где происходит генерация кластеров и их рост, постепенно увеличивается. Столкновения кластеров с атомами и другими кластерами приводят к их укрупнению. На рис. 4, *b* и *c* представлены радиальные профили $kc_k(r/R_w)$ для k = 2, 3, 10 и 20 при $\tau = 5$. К этому моменту времени вблизи поверхности источника димеры остаются основными кластерами. Ниже по течению массовые доли кластеров k = 3-40 оказываются сравнимыми по порядку величины.



Рис. 4. Профили массовой доли $kc_k(r/R_w)$ для кластеров k = 2, 3, 10 и 20 в моменты времени $\tau = 0.1$ (*a*) и 5 (*b*, *c*) (Kn = 0.001).

На рис. 5 представлена эволюция распределения $kc_k(k)$ (осредненного по всему объему) во времени для Kn = 0.01 и 0.001. В случае Kn = 0.01 (рис. 5, *a*) массовая доля кластеров быстро и монотонно убывает с ростом k, максимальный размер получаемых кластеров не превышает 15. С ростом т вид распределения качественно не изменяется. Величина kck растет с течением времени для всех $k \ge 3$. Совершенно иная картина наблюдается в случае более плотного режима разлета. Разлет пара при Kn = 0.001 сопровождается образованием значительно более крупных кластеров (до k = 50 и более). Вид распределения $kc_k(k)$, наблюдаемый при Kn = 0.01, здесь реализуется только при малых τ (кривая *1* на рис. 5, *b*). При $\tau \ge 1$ массовая доля малых кластеров с ростом τ уменьшается, а крупных кластеров — возрастает.

Как показывают расчеты, при достаточно больших значениях Кп (Кп ≥ 1) разлет пара происходит практически в бесстолкновительном режиме, поэтому конденсации пара отсутствует. С уменьшением чисел Кп и возрастанием количества столкновений между частицами степень конденсации (или массовая доля кластеров) $\alpha = \sum_{k=2} kc_k$ возрастает. На рис. 6 представлено изменение во времени суммарной (по объему облака пара) массовой доли α_v и среднего размера кластера



Рис. 5. Эволюция массового спектра кластеров по объему во времени для Kn = 0.01 (*a*) и Kn = 0.001 (*b*): $1 - \tau = 0.1$, 2 - 1, 3 - 5.



Рис. 6. Зависимости от времени τ степени конденсации $\alpha_v(a)$ и среднего размера кластеров $k_{av}(b)$: пунктир — Kn = 0.01, сплошные линии — 0.001.

 $k_{\rm av} = \sum_{k=2} kn_k/N_c \ (N_c$ — суммарное число кластеров в облаке в момент времени τ) при Kn = 0.01 и 0.001. Связь между $k_{\rm av}$ и α_v определяется соотношением $k_{\rm av}N_c = \alpha_v \sum_{k=1} kn_k$. Значения α_v и $k_{\rm av}$ возрастают с ростом τ . В данном случае при $\tau = 5$ массовая доля кластеров в облаке пара достигает значений $\alpha_v = 0.12$ и 0.28 при Kn = 0.01 и 0.001 соответственно, т.е. уменьшение числа Кнудсена в 10 раз приводит к увеличению α_v примерно в 2 раза. С ростом τ наблюдается постепенное "замораживание" процесса конденсации пара. Это является следствием падения плотности и прекращения столкновений частиц. Генерация кластеров происходит в основном в пределах наиболее плотной области течения $r \leq (3-4)R_w$, прилежащей к источнику.

Работа выполнена при финансовой поддержке INTAS (грант № 03-51-5208).

Список литературы

- [1] Смирнов Б.М. // УФН. 1997. Т. 167. № 11. С. 1169–1200.
- [2] Смирнов Б.М. // УФН. 2003. Т. 173. № 6. С. 609-648.
- [3] Афанасьев Д.В., Блинов И.О., Богданов А.А. и др. // ЖТФ. 1994. Т. 64. Вып. 10. С. 76–90.

- [4] Копытин Ю.Д., Протасевич Е.Т., Чистякова Л.К., Шишковский В.И. Воздействие лазерного и ВЧ-излучений на воздушную среду. Новосибирск: Наука, 1992. 190 с.
- [5] Lukyanov G.A., Khag Y., Leshchev D.V. et al. // Fullerenes, Nanotubes, and Carbon Nanostructures. 2006. Vol. 14. N 2/3. P. 507–512.
- [6] Lukyanov G.A., Volkov A.N., Khang Y. et al. // Book of Abstracts of 8th Int. Conf. Laser Ablation (September 11–16, 2005, Banff, Canada). 2005. P. 112.
- [7] Чекмарев С.Ф. Импульсные течения газа в сверхзвуковых соплах и струях. Новосибирск: ИТФ СО РАН, 1989. 342 с.
- [8] Дулов В.Г., Лукьянов Г.А. Газодинамика процессов истечения. Новосибирск: Наука, 1984. 234 с.
- [9] Быков Н.Ю., Лукьянов Г.А. // Теплофизика и аэродинамика. 2006. Т. 13. № 4. С. 569–582.
- [10] Itina T.E., Sentis M., Marine W. // Appl. Surf. Sci. 2006. Vol. 252. P. 4433–4438.
- [11] Zeifman M.I., Garison B.J., Zhigilei L.V. // J. Appl. Phys. 2002. Vol. 92. N 4. P. 2181–2193.
- [12] Bird G.A. Molecular gas dynamics and direct simulation of gas flows. Oxford: Clarendon Press, 1994. 456 p.
- [13] Bei Liu, Zhong-Yi Lu, Bicai Pan et al. // J. of Chem. Phys. 1998. Vol. 109. N 21. P. 9401–9409.