

О ВЗАИМОДЕЙСТВИИ МОЛЕКУЛ С ПОВЕРХНОСТЬЮ
ТВЕРДОГО ТЕЛА

А. И. Ерофеев

(Москва)

Рассматривается взаимодействие молекул и атомов с поверхностью твердого тела на основе классической механики. В качестве модели для описания твердого тела взята двухмерная квадратная решетка, в узлах которой располагаются атомы. Предполагается, что в твердом теле взаимодействуют только ближайшие атомы, а молекулы газа взаимодействуют с атомами тела, расположенными в поверхностном слое.

В результате «столкновения» с поверхностью молекула газа теряет часть кинетической энергии, этот процесс характеризуется коэффициентом аккомодации энергии. Кроме того, вводится также коэффициент, учитывающий ту часть энергии поступательного движения, которая перешла в энергию внутреннего движения молекулы (колебание и вращение). Возможность возникновения неупругих потерь и некоторые особенности этого явления иллюстрируются процессом взаимодействия двухатомной молекулы с изолированным атомом.

Имеющиеся экспериментальные данные по взаимодействию частиц газа с поверхностью твердого тела в основном относятся к низкоэнергетической области (температура газа меньше или порядка нескольких сотен градусов). Одним из предметов исследования является нахождение функции распределения частиц, отраженных от поверхности; в частности, проверяется гипотеза диффузно-зеркального отражения [1-3]. Однако немногочисленные результаты экспериментов скорее свидетельствуют о влиянии большого числа факторов на характер взаимодействия, чем позволяют установить строгие закономерности процесса.

Теоретические исследования ведутся в направлении усовершенствования простых моделей: вместо моделирования твердого тела одномерной цепочкой атомов [4, 5] вводятся двух- и трехмерные решетки [6-8]. В работе [6] отмечается, что взаимодействие частицы газа с одномерной цепочкой отличается от взаимодействия с трехмерной решеткой, и это обстоятельство может привести к значительным расхождениям в значениях коэффициента аккомодации, когда масса налетающей молекулы сравнима с массой атома твердого тела. Из работы [6] также следует, что если описывать взаимодействие между атомами газа и твердого тела потенциалом Морзе, то можно так подобрать параметры потенциала, чтобы имело место совпадение расчетных данных с экспериментальными. Более того, неплохие результаты получаются при использовании параметров потенциала, определенных на основе комбинационного правила [7].

В работе [8] рассмотрено взаимодействие атомов газа с трехмерной решеткой конечной протяженности. Между атомами газа и атомами твердого тела действуют силы с потенциалом Леннарда — Джонса. Классические уравнения движения всех частиц решались численно на ЭВМ.

В указанных работах частица газа (молекула или атом) рассматривается как целое; интересен, однако, и вопрос о влиянии внутренних степеней свободы молекулы на коэффициенты обмена энергией и импульсом между частицами газа и твердым телом. В настоящей работе делается попытка учета этого влияния на основе классической механики.

1. О неупругих потерях. Рассмотрим вначале взаимодействие молекулы с изолированным атомом. На фиг. 1 представлена схема такого взаимодействия: молекула с атомами массы m налетает на атом массы M ; ось молекулы на большом расстоянии от атома составляет с начальным направлением вектора скорости угол φ_0 . Будем предполагать, что движение всех частиц системы может быть описано уравнениями классической механики. В аналогичной постановке в работах [9-12] изучались: а) химические реакции типа $P + CH_3I \rightarrow CH_3 + PI$, где P — атом щелочного металла [10, 11];

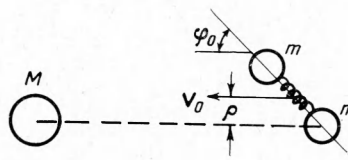
б) диссоциация молекул O_3 и N_2O [9]; в) возбуждение энергии внутреннего движения при коллинеарном столкновении молекул и молекулы с атомом [12].

В работах [10, 11] потенциальная энергия взаимодействующих частиц имела вид не просто суммы потенциальных энергий парных взаимодействий, но вводился дополнительный член для уменьшения энергии связи молекулы (CH_3I) при приближении атома (Р). Показано, что введением такого рода дополнительных членов можно приблизить результаты расчета к результатам экспериментов [11].

Ниже будем рассматривать чисто парные взаимодействия. В качестве примера возьмем молекулу азота (N_2), находящуюся в основном состоянии, и тяжелый атом ($M=184$). Потенциальные энергии взаимодействия запишем в виде

$$U(r) = D [e^{-2c(r-b)} - 2e^{-c(r-b)}] \quad (1.1)$$

Здесь D — глубина потенциальной ямы, b — расстояние между частицами, на котором потенциальная энергия имеет минимум.



Фиг. 1

Параметры для взаимодействия атомов азота известны [13] ($D = 9.904$ эв, $c = 2.85 \cdot 10^8$ см $^{-1}$, $b = 1.08 \cdot 10^{-8}$ см), а параметры N — M-взаимодействия были приняты следующими: $U_1 - D_1 = 5$ эв, $c_1 = 3 \cdot 10^8$ см $^{-1}$, $b_1 = 1.5 \cdot 10^{-8}$ см; $U_2 - D_2 = 0.5$ эв, $c_2 = 5.0 \cdot 10^8$ см $^{-1}$, $b_2 = 1.5 \cdot 10^{-8}$ см; $U_3 = D_3 e^{-c_3 r} - D_3 = 5.4 \cdot 10^3$ эв, $c_3 = 4.16 \cdot 10^8$ см $^{-1}$.

Первый из этих потенциалов качественно соответствует сильной химической связи между взаимодействующими частицами; третий потенциал близок к потенциалам взаимодействия атомов инертных газов; второй — занимает промежуточное положение. Хотя выбор параметров потенциала был в значительной мере произволен, но он позволяет проследить качественные отличия в характере взаимодействия молекулы с атомом для этих случаев.

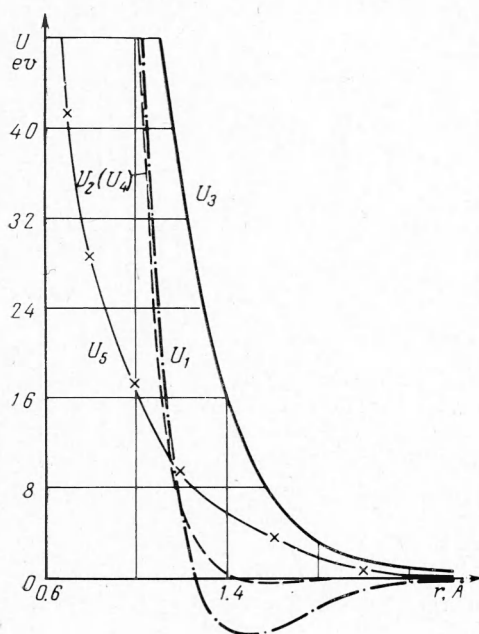
Различие между этими потенциалами видно из фиг. 2.

Результаты расчета уравнений движения частиц для плоского случая показывают, что столкновение молекулы с атомом приводит к следующим состояниям системы.

1°. После столкновения молекула остается как целое образование, но возбуждена (колебание и вращение). Для этого случая обмен поступательной энергии молекулы, перешедшую в энергию внутреннего движения, характеризуется коэффициентами α^* и α_+ , определим так:

$$\alpha^* = \frac{E^*}{E_0}, \quad \alpha_+ = \frac{E^0 + U^* - U_0}{E_0} \quad (1.2)$$

Здесь E^* , E_0 — кинетическая энергия молекулы после и до столкновения, E^0 — кинетическая энергия относительного движения атомов в мо-



Фиг. 2

лекуле, U_0 , U^* — потенциальная энергия атомов в молекуле до и после столкновения.

2°. В результате столкновения молекула диссоциирует. В этом случае

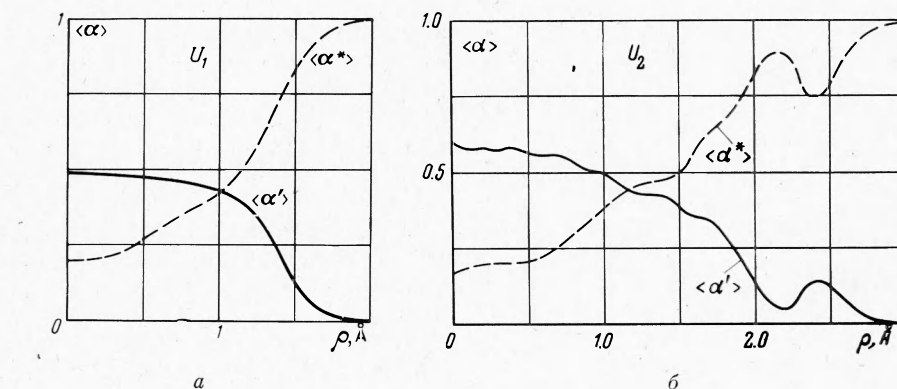
$$\alpha^* = \frac{E_1 + E_2}{E_0}, \quad \alpha_d = \frac{D}{E_0} \quad (1.3)$$

Здесь E_1 , E_2 — кинетическая энергия разлетающихся атомов молекулы, α_d — коэффициент, учитывающий долю поступательной энергии, затраченную на диссоциацию.

3°. Молекула диссоциирует, причем один из ее атомов образует соединение с атомом М. Тогда

$$\alpha^* = \frac{E_i}{E_0}, \quad \alpha_{d1} = \frac{D - |U''|}{E_0} \quad (1.4)$$

Здесь E_i — кинетическая энергия того атома, который избежал захвата, U'' — внутренняя энергия системы «захваченный» атом N — атом М, состоящая из кинетической энергии относительного движения и потенциальной энергии этой системы.



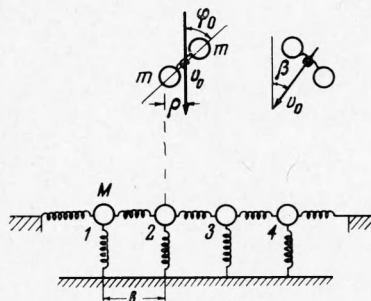
Фиг. 4

Таким образом, только в первом случае часть энергии поступательного движения перешла в энергию внутреннего движения молекулы, так как в двух последних случаях молекула как таковая перестала существовать. Обозначим, далее, через α' коэффициент, характеризующий часть энергии поступательного движения, ушедшей на возбуждение молекулы (вплоть до развала).

Все перечисленные случаи имели место при взаимодействии с потенциалом U_1 ; в качестве примера на фиг. 3 представлены результаты расчетов коэффициентов α^* и α' в зависимости от прицельного расстояния ρ при $v_0 = 10^6$ см/сек, $\varphi_0 = 45^\circ$; на фиг. 3 зона 1 соответствует случаю 3° (диссоциация с захватом одного атома молекулы атомом М) а зона 2 — случаю 2° (диссоциация молекулы). При взаимодействии с потенциалом U_2 и $v_0 = 10^6$ см/сек были замечены только два первых случая. Наконец, при взаимодействии с потенциалом U_3 неупругие потери в основном обусловлены вращением молекулы, а сильные колебания (и диссоциация) были возможны при большей, нежели 10^6 см/сек, начальной скорости молекулы. На фиг. 4 представлены результаты расчета $\langle \alpha^* \rangle$ и $\langle \alpha' \rangle$ в зависимости от ρ для потенциалов U_1 и U_2 и $v_0 = 10^6$ см/сек.

$\langle \alpha^* \rangle$, $\langle \alpha' \rangle$ суть осредненные по начальным ориентациям φ_0 значения α^* и α' (осреднение $\langle \rangle$ проведено по двенадцати значениям угла φ_0 , изменявшегося от 0 до 180° с интервалом в 15°).

2. Столкновение молекулы с поверхностью. На фиг. 5 приведена схема модели, принятая при изучении взаимодействия частиц газа (атомов и молекул) с поверхностью твердого тела. Четыре атома М, расположенные в узлах двумерной квадратной решетки, моделируют поверхность тела. Относительно всех других атомов тела предполагается, что за время взаимодействия они остаются неподвижными, поэтому взаимодействие выбранных четырех атомов с остальными заменено взаимодействием с неподвижными центрами, расположенными в узлах решетки. Справедливость такого предположения может быть обоснована при помощи критериев Френкеля [14], однако эти критерии носят оценочный характер, поэтому принятое предположение проверялось для каждого конкретного вида потенциала взаимодействия молекулы с «поверхностью» тела. Предполагалось также, что: а) в твердом теле взаимодействуют только ближайшие соседи; б) в начальный момент времени все атомы твердого тела неподвижны и находятся в положении равновесия; в) атомы молекулы взаимодействуют с каждым из выбранных атомов, расположенных на поверхности.



Фиг. 5

В качестве потенциальной функции взаимодействия бралась функция Морзе (1.1).

Рассмотрим взаимодействие молекулы азота, находящейся в начальный момент времени в основном состоянии, с «поверхностью» вольфрама. Параметры потенциала взаимодействия атомов азота были приведены выше, а параметры потенциала N—W-взаимодействия выбирались двух типов: $U_4 — D_4 = 0.5 \text{ эв}$, $b_4 = 1.5 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, $c_4 = 5 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}$; $U_5 — D_5 = 0.0535 \text{ эв}$, $b_5 = 3.0 \cdot 10^{-8} \text{ см}$, $c_5 = 1.47 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}$ (фиг. 2). Параметры потенциала U_5 определялись с привлечением комбинационного принципа (см., например, [15]), используя данные по W—W и $N_2 — N_2$ -взаимодействию [16, 17]. Параметры для W—W-взаимодействия (U_6) выбирались отличными от [16], поскольку рассматривался плоский случай. Так как учитывалось взаимодействие только ближайших соседей, то $D_6 = \frac{1}{3}H = 2.9 \text{ эв}$, здесь для величины H взято значение энергии сублимации атома вольфрама с поверхности по данным работы [18] ($H = 8.741 \text{ эв}$).

Для параметра решетки была взята величина $b_6 = (M / \rho_1)^{1/3} = 2.5 \cdot 10^{-8} \text{ см}$; значение $c_6 = 3 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1}$ выбрано так, чтобы периоды колебаний атомов в направлении, нормальном к поверхности, мало различались для двумерной и трехмерной решеток.

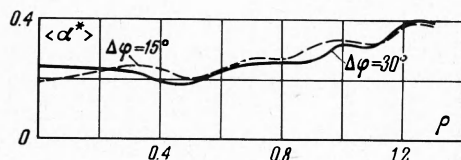
После выбора параметров потенциалов взаимодействия необходимо было решить систему, состоящую из двенадцати обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка. Решение системы уравнений проводилось методом Рунге — Кутты на ЭВМ. Шаг интегрирования системы выбирался постоянным и равным $h = k(a_0 / v_0)$, где $a_0 = 10^{-8} \text{ см}$, v_0 — начальная скорость молекулы. Коэффициент k выбирался так, чтобы выполнялась заданная степень точности решения системы. Обычно $k = 0.02 \div 0.05$, при этом погрешность в законе сохранения энергии составляла $0.1 \div 0.01\%$. Прицельный параметр ρ (фиг. 5) изменялся через 0.1 Å . Начальное расстояние молекулы от поверхности бралось так, чтобы потенциальная энергия взаимодействия молекулы с атомами тела была много меньше ее кинетической энергии.

Для двух значений параметров потенциалов (U_4 , U_5) были рассчитаны коэффициенты обмена поступательной энергии между молекулой и поверхностью α^* и коэффициенты, учитывающие долю энергии поступательного движения, перешедшую во внутреннюю энергию и затраченную на диссоциацию — α_+ , α_d , определенные по формулам (1.2) — (1.4). Атомы твердого тела при этом либо были связаны потенциалом U_6 , либо связь между ними была разорвана ($D_6 = 0$) — это случай изолированного атома. В таблице представлены значения коэффициентов $\langle \alpha \rangle$, осредненные по углам φ_0 и по ρ . Осреднение по углам проведено для случая, когда φ_0 изменялся от 0 до 180° с интервалом в 30° (изменение с интервалом в 15° увеличивает время счета в два раза, а средние значения $\langle \alpha \rangle$ при $\Delta\varphi_0 = 15^\circ$ близки к средним значениям при $\Delta\varphi_0 = 30^\circ$, что иллюстрируется фиг. 6 для случая $v_0 = 10^6$ см / сек, $D_6 \neq 0$, U_4).

v_0 см/сек	$U_N - W$	U_{W-W}	$\langle \alpha^* \rangle$	$\langle \alpha_+ \rangle$	$\langle \alpha_d \rangle$	$\langle \alpha_1 \rangle$
10^6	U_4	$D_6 \neq 0$	0.278	0.315	0.045	0.362
		$D_6 = 0$	0.246	0.299	0.041	0.414
	U_5	$D_6 \neq 0$	0.576	0.076	—	0.348
		$D_6 = 0$	0.490	0.079	—	0.431
$5 \cdot 10^5$	U_4	$D_6 \neq 0$	0.328	0.236	—	0.436
	U_5	$D_6 \neq 0$	0.652	0.095	—	0.253

Величина $\langle \alpha_1 \rangle = 1 - \langle \alpha^* \rangle - \langle \alpha_+ \rangle - \langle \alpha_d \rangle$ характеризует долю энергии, переданную телу.

Расчет показывает, что средние значения $\langle \alpha \rangle$ при N — W-взаимодействии, описываемом потенциалом U_4 , не сильно отличаются для случая $D_6 \neq 0$ и $D_6 = 0$ при $v_0 = 10^6$ см/сек; более ощутимые различия имеют место для потенциала U_5 . Однако влияние изменения потенциала N — W-взаимодействия



Фиг. 6

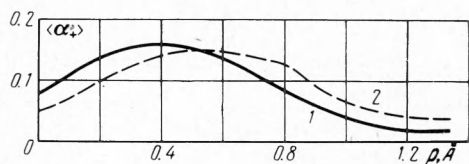
сказывается значительно сильнее на $\langle \alpha \rangle$, чем наличие или разрыв связи атомов в решетке. Поэтому при рассмотрении взаимодействия молекул с поверхностью в случаях, когда условия Френкеля выполняются или почти выполняются, требования к виду потенциала взаимодействия атомов в

решетке можно снизить. Детали взаимодействия для потенциалов U_4 и U_5 отличаются так же, как и в случае взаимодействия молекулы с изолированным атомом.

Изменение $\langle \alpha \rangle$ при уменьшении скорости v_0 неодинаково для двух потенциалов U_4 и U_5 . Возможное объяснение этого факта можно найти в изменениях соотношений между характерным временем столкновения t и характерными временами процессов возбуждения вращения τ' и колебания τ'' молекулы. Столкновение назовем импульсным при $t \ll \tau$ в противоположность адиабатическому столкновению ($t \gg \tau$). Если столкновение носит импульсный характер по отношению к какой-либо степени свободы, то возможно ее возбуждение; при нарушении условия импульсного удара вероятность возбуждения уменьшается (по отношению к вращениям столкновения при относительной скорости $v > 10^4$ см/сек носят импульсный характер, поэтому вращения легко возбуждаются; см., например, [19]). Если предположить, что для потенциала U_4 столкновение является импульсным относительно колебаний при $v_0 = 10^6$ см / сек, и условие импульсного удара нарушается при $v_0 = 5 \cdot 10^5$ см / сек, то станет понятным уменьшение доли энергии, перешедшей во внутренние степени свободы.

Для потенциала U_5 полагаем, что условие импульсного столкновения по отношению к колебаниям молекулы не выполняется при обеих величинах скорости v_0 , колебания возбуждаются слабо (как и отмечалось в п. 2). Переход энергии во внутренние степени свободы в основном связан с вращением. На фиг. 7 представлена зависимость от прицельного расстояния коэффициента α_+ , осредненного по углам φ_0 , при $v_0 = 10^6$ см / сек (кривая 1), $5 \cdot 10^5$ см / сек (кривая 2). Видно, что значения $\langle \alpha_+ \rangle$ слабо отличаются в этих двух случаях, но при $v_0 = 5 \cdot 10^5$ см / сек максимальные значения $\langle \alpha_+ \rangle$ сдвинуты в сторону больших прицельных расстояний, что и явилось причиной увеличения $\langle \alpha_+ \rangle$ при осреднении по прицельным параметрам. Осреднение по ρ проводилось следующим образом

$$\langle \alpha \rangle = \left[\int_0^{\rho_{\max}} \alpha(\rho) \rho d\rho \right] \left[\int_0^{\rho_{\max}} \rho d\rho \right]^{-1}$$



Фиг. 7

Изменение же $\langle \alpha_1 \rangle$ при $v_0 = 5 \cdot 10^5$ см / сек при переходе от потенциала U_4 к U_5 , по-видимому, связано с нарушением условий Френкеля.

3. Столкновение молекулы, рассматриваемой как целое, с поверхностью. Рассмотрим теперь столкновение молекулы N_2 с поверхностью тела, предполагая, что молекула является единым целым, а не группой, состоящей из двух атомов. Модель взаимодействия с поверхностью оставим прежней, а в качестве потенциалов N_2 —W-взаимодействия возьмем потенциалы Морзе: 1) с параметрами, определенными на основе комбинационного принципа, используя данные работ [16, 17]: $\bar{D}_7 = 0.107$ эв, $b_7 = 3.53 \cdot 10^{-8}$ см, $c_7 = 1.47 \cdot 10^8$ см $^{-1}$; 2) с параметрами потенциала U_4 . Если в качестве потенциала взаимодействия в твердом теле взять потенциал U_6 , то для коэффициентов $\langle \alpha \rangle$ получим следующие значения для случая $v_0 = 10^6$ см / сек: U_7 — $\langle \alpha^* \rangle = 0.654$, $\langle \alpha_1 \rangle = 0.346$; U_4 — $\langle \alpha^* \rangle = 0.529$, $\langle \alpha_1 \rangle = 0.471$. Эти результаты можно сравнить с результатами таблицы, относящимися к потенциалам U_5 и U_4 соответственно, поскольку, хотя суммарное взаимодействие атомов твердого тела с атомами молекулы не равно взаимодействию с молекулой как целым, характер взаимодействия для сравниваемых потенциалов сходен. Видно, что для потенциала U_4 различия в значениях $\langle \alpha^* \rangle$, $\langle \alpha_1 \rangle$ в сравниваемых случаях значительно больше, чем в случае потенциалов U_5 и U_7 ; здесь также сказывается различный характер взаимодействия, который отмечался выше в п. 2, 3.

Изменим теперь потенциал W—W-взаимодействия:

$$D_8 = 2.9 \text{ эв}, b_8 = 3.0 \cdot 10^{-8} \text{ см}, c_8 = 1.41 \cdot 10^8 \text{ см}^{-1};$$

параметры b и c этого потенциала взяты в соответствии с работой [16], глубина потенциальной ямы есть по-прежнему $\bar{D}_8 = \frac{1}{3}H$. Введение такого потенциала позволяет проследить зависимость $\langle \alpha \rangle$ от расстояния между атомами в решетке, поскольку в решетке расстояния между атомами различны для разных направлений. (Например, в решетке вольфрама ближайшее расстояние между атомами равно $2.73 \cdot 10^{-8}$ см, а постоянная решетки равна $3.16 \cdot 10^{-8}$ см.) Взаимодействие молекулы азота с атомом вольфрама будем описывать потенциалом U_7 . Увеличение расстояния между атомами тела приводит к уменьшению влияния далеких атомов тела (далеких по отношению к данному начальному прицельному расстоянию) на процесс взаимодействия, т. е. больше проявляется характер индивидуального столкновения. Поэтому $\langle \alpha^* \rangle$ должно уменьшаться. Для

этого же случая приводим результаты вычислений коэффициентов аккомодации для различных значений угла падения

β	$= 0^\circ$	15°	30°	45°	60°
$\langle \alpha^* \rangle$	$= 0.586$	0.620	0.690	0.748	0.901
$\langle \alpha_1 \rangle$	$= 0.414$	0.380	0.310	0.252	0.099

Эти данные находятся в качественном согласии с результатами, полученными для модели твердых сфер [20, 21]. Отметим, что влияние границы выбранной зоны твердого тела начинает сказываться только при больших углах падения β . Так, $\alpha^* = 0.875$ при $\beta = 60^\circ$, когда направление начального движения молекулы проходит через центр атома 2, и $\alpha^* = 0.834$, когда направление начального движения проходит через центр атома 3 (см. фиг. 5).

В заключение отметим, что в настоящей работе исследовался случай, когда условия Френкеля выполняются или почти выполняются, что обеспечивается большой скоростью налетающей частицы и малым отношением массы молекул к массе атома тела ($\kappa = 28/184 = 0.152$). Поэтому твердое тело моделировалось только поверхностным слоем. Относительно неупругих потерь следует заметить, что полученные результаты носят качественный характер; это связано, с одной стороны, с тем, что явление рассматривалось с чисто классической точки зрения, тождественность которой квантовому рассмотрению показана только для случая малых возбуждений внутренних степеней [22, 23]; с другой стороны, необходимо было выбрать потенциалы взаимодействия частиц, а имеющиеся в этой области сведения далеко неполны. Тем не менее, несмотря на указанные пробелы, можно надеяться, что результаты решения подобного рода задач на основе классической механики при соответствующем выборе параметров потенциалов взаимодействия будут давать количественное совпадение с экспериментальными данными, как отмечалось в п. 1 и 2.

Отметим также, что коэффициент аккомодации энергии во всех рассмотренных задачах не превышал значения 0.5; вместе с тем, доля энергии, переданная во внутренние степени свободы, может достигать существенной величины (от 0.1 до 0.35 — в зависимости от потенциала взаимодействия).

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

Поступила 22 IV 1965

ЛИТЕРАТУРА

1. Datz S., Moore G. E., Taylor E. H. The reflection of modulated helium and deuterium molecular beams from platinum surface. Rarefied Gas Dynamics. Proc. third internat. symposium on rarefied gas dynamics, Paris, 1962, vol. 1, p. 347.
2. Smith J. N., Fite W. L. Recent investigations of gas-surface interactions using modulated-atomic-beam techniques. Rarefied Gas Dynamics. Proc. third internat. symposium on rarefied gas dynamics, Paris, 1962, vol. 1, p. 430.
3. Smith J. N. Scattering of atomic beams by polycrystalline nickel. J. Chem. Phys. 1964, vol. 40, No. 9.
4. Zwanzig R. W. Collision of a gas atom with cold surface. J. Chem. Phys. 1960, vol. 32, p. 1173.
5. McCarroll B., Erlich G. Trapping and energy transfer in atomic collisions with a crystal surface. J. Chem. Phys., 1963, vol. 38, No. 2.
6. Goodman F. O. The dynamics of simple cubic lattices I. Applications to the theory of thermal accommodation coefficients. J. Phys. Chem. Solids, 1962, vol. 23, p. 1269.
7. Goodman F. O. On the theory of accommodation coefficients III. J. Phys. Chem. Solids, 1963, vol. 24, No. 12.
8. Oman R., Bogan A., Weiser G., Li C. Interaction of Gas molecules with an ideal crystal surface. AJAA. Journal, 1964, vol. 2, No. 10.
9. Bunker D. L. Monte Carlo calculation of triatomic dissociation rates I. N_2O and O_3 . J. Chem. Phys., 1962, vol. 37, No. 2.
10. Blais N. C., Bunker D. L. Monte Carlo calculation II. The reactions of alkali atoms with methyl iodide. J. Chem. Phys., 1962, vol. 37, No. 11.
11. Karplus M., Raff L. M. Theoretical investigations of reactive collisions in molecular beams: $K + CH_3I$. J. Chem. Phys., vol. 41, No. 5.

12. Harter R. J., Alterman E. B., Wilson D. J. Anharmonic effects in unimolecular rate theory. Vibrations and collisions of simple polyatomic systems. J. Chem. Phys., 1964, vol. 40, No. 8.
 13. Konowalow D. D., Hirschfelder J. O. Morse potential parameters for O—O, N—N and N—O interaction. Phys. Fluids, 1961, vol. 4, No. 5.
 14. Френкель Я. И. К теории явления аккомодации и конденсации. Успехи физ. наук, 1938, т. 20, № 1.
 15. Mason E. A. Forces between unlike molecules and properties of gaseous mixtures. J. Chem. Phys., 1955, vol. 23, No. 1.
 16. Girifalco L. A., Weiser V. G. Application of the Morse potential function to cubic metals. Phys. Rev., 1959, vol. 114, No. 3.
 17. Konowalow D. D., Hirschfelder J. O. Intermolecular potential function for nonpolar molecules. Phys. Fluids, 1961, vol. 4, No. 5.
 18. Brewer L. The chemistry and metallurgy of miscellaneous materials, v. 19B, No. 3.
 19. Месси Г., Бархон Е. Электронные и ионные столкновения. Изд. иностр. лит., 1958.
 20. Ерофеев А. И. О взаимодействии атомов с поверхностью твердого тела. Инж. ж., 1964, т. 4, № 1.
 21. Баранцев Р. Г. Схема изолированного отражения атомов газа от твердой поверхности. Сб. «Аэродинамика разреженных газов». Изд. ЛГУ, 1965, т. II.
 22. Parker J. G. Rotation and vibration relaxation in diatomic gases. Phys. Fluids, 1959, vol. 2, No. 4.
 23. Allen R. T., Feuer P. Vibration energy exchange for Morse potential interaction. J. Chem. Phys., 1964, vol. 40, No. 10.
-