

Секция «Математика и механика»

Рассеяние водорода на поверхности графита

Якунчиков Артем Николаевич

Кандидат наук

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,

Механико-математический факультет, Москва, Россия

E-mail: art-ya@mail.ru

Изучалось взаимодействие молекулярного водорода с поверхностью графита. Проводился молекулярно-динамический расчет траекторий столкновения молекул газа со структурой из атомов углерода [1]. Для каждой температуры поверхности $T=87\text{K}$, 283K , 1120K было получено порядка 10^6 – 10^7 траекторий для различных направлений и величин начальной скорости.

Форма полученных распределений качественно отличается от зеркально-диффузной модели Максвелла и модели Эпштейна. Ядро Черчиньяни-Лэмпис также не позволяет описать результаты траекторных расчетов, так как присутствует зависимость коэффициентов аккомодации от величины и направления начальной скорости молекулы. Предложена новая форма ядра рассеяния, хорошо согласующаяся с результатами экспериментов и молекулярно-динамических расчетов.

Для задач, в которых отличием функции распределения для падающего потока от максвелловской можно пренебречь и средние скорости течения малы по сравнению с тепловыми скоростями молекул, получены зависимости коэффициентов аккомодации касательного импульса и энергии от температуры газа и поверхности, которые удовлетворительно согласуются с экспериментами [2,3].

Расчеты показали, что при низких температурах существенно возрастает время пребывания молекулы водорода вблизи поверхности (физическая адсорбция), что согласуется с результатами [4–6]. В результате этого при низких температурах происходит более интенсивный обмен импульсом и энергией между молекулой и структурой твердого тела, что приводит к высоким значениям коэффициентов аккомодации.

Литература

1. Ковалев В.Л., Якунчиков А.Н. Коэффициенты аккомодации для молекулярного водорода на поверхности графита // Изв. РАН. МЖГ. 2010. № 6. С. 166-173.
2. Day K.L. The thermal accommodation coefficient of graphite // Proc. in IAU Symp. 52, Interstellar dust and related topics. 1973. p.311.
3. Leroy O., Perrin J., Jolly J., Pealat M., Lefebvre M. Thermal accommodation of a gas on a surface and heat transfer in CVD and PECVD experiments // J. Phys. D: Appl. Phys. 1997. 30. p.499-509
4. Ковалев В.Л., Якунчиков А.Н. Моделирование адсорбции водорода в углеродных нанотрубках // Изв. РАН. МЖГ. 2009. № 3. С. 160-164.
5. Ковалев В.Л., Якунчиков А.Н. Анализ адсорбции водорода массивами углеродных нанотрубок // Изв. РАН. МЖГ. 2009. № 6. С. 157-160.

6. V.Kovalev, A. Yankunchikov, F. Li, Simulation of hydrogen adsorption in carbon nanotube arrays // Acta Astronautica 68 (2011), pp. 681-685.

Слова благодарности

Расчеты проведены на суперкомпьютерном комплексе СКИФ-МГУ «Чебышев». Работа выполнена при поддержке РФФИ (№ 11-01-00230 а) и ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» (контракт 02.740.11.0615).