

# Adsorption of Oxygen and Nitrogen Atoms on the SiO<sub>2</sub> Surface: Molecular Dynamics Calculation Based on Quantum-Mechanical Potential

A. A. Kroupnov, M. Ju. Pogosbekian

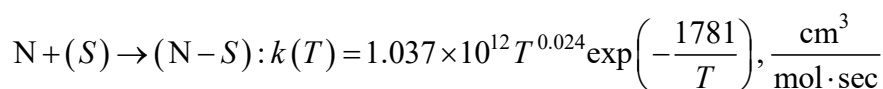
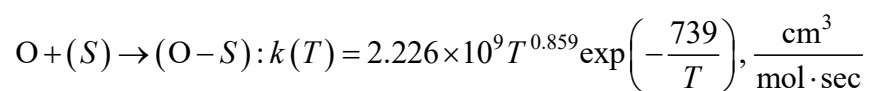
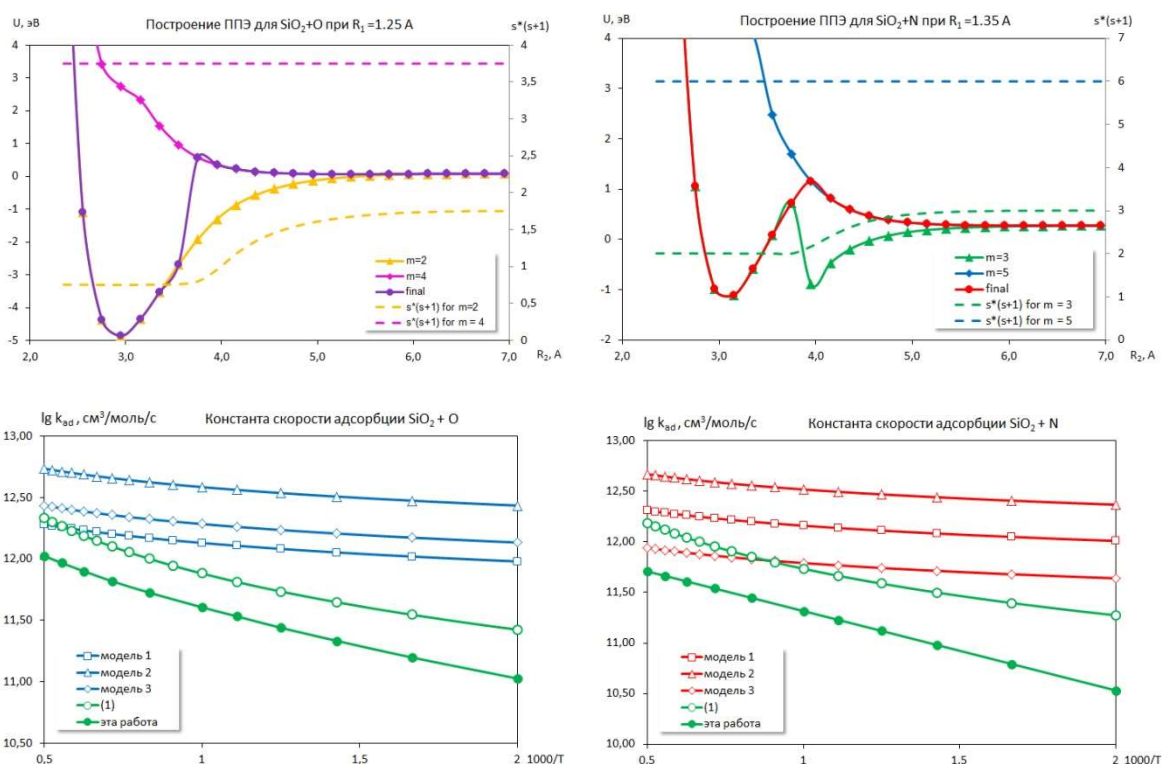
*Institute of Mechanics, Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119192, Russia*

[kroupnov@imec.msu.ru](mailto:kroupnov@imec.msu.ru), [pogosbekian@imec.msu.ru](mailto:pogosbekian@imec.msu.ru)

## Abstract

The processes of adsorption of N and O atoms on the surfaces of the thermal protection material SiO<sub>2</sub> were studied by the methods of quantum mechanics and molecular dynamics. The calculation of the potential energy surface (PES) was carried out by the method of the electron density functional theory. Based on the obtained PES, the rate constants of adsorption of N and O atoms were determined by molecular dynamics methods in a wide range of surface temperatures of 500 ÷ 2200 K and presented in the form of a generalized Arrhenius formula. The calculated rate constants have been compared with the known phenomenological models and the results of calculations based on the transition state theory.

Keywords: adsorption, heat-shielding material SiO<sub>2</sub>, quantum mechanics, DFT method, dynamics of molecular reactions.



УДК (539.196+541.127)

# Адсорбция атомов кислорода и азота на поверхности SiO<sub>2</sub>: молекулярно-динамический расчет на основе квантово-механических потенциалов

А. А. Крупнов, М. Ю. Погосбекян

*Институт механики МГУ им. М.В. Ломоносова,  
Россия, Москва, 119192, Мичуринский проспект, 1*  
[kroupnov@imec.msu.ru](mailto:kroupnov@imec.msu.ru), [pogosbekian@imec.msu.ru](mailto:pogosbekian@imec.msu.ru)

## Аннотация

В работе исследовались процессы адсорбции атомов N и O на поверхностях теплозащитного материала SiO<sub>2</sub> методами квантовой механики и молекулярной динамики. Расчет поверхности потенциальной энергии (ППЭ) проводился методом теории функционала электронной плотности. На основе полученных ППЭ методами молекулярной динамики были определены константы скорости адсорбции атомов N, O в широком диапазоне температур поверхности 500 ÷ 2200 К и представлены в виде обобщенной формулы Аррениуса. Проведено сравнение рассчитанных констант скоростей с известными феноменологическими моделями и результатами расчетов по теории переходного состояния.

Ключевые слова: адсорбция, теплозащитный материал SiO<sub>2</sub>, квантовая механика, метод DFT, динамика молекулярных реакций.

## 1. Введение

Гетерогенные процессы играют основную роль при определении тепловых потоков к поверхности многоразовых космических аппаратов при их входе в атмосферу [1]. Выявление механизмов этих процессов и определение их основных кинетических характеристик имеют решающее значение для эффективного конструирования современных теплозащитных систем. Актуальность исследований свойств теплозащитных покрытий возрастает в связи с разработкой новых материалов для перспективных высокоскоростных многоразовых летательных аппаратов, нуждающихся в эффективной тепловой защите при температурах поверхности около 2000 К. Кроме того, все более насущными становятся вопросы снижения тепловых нагрузок на поверхность космических аппаратов и зондов, предназначенных для спуска в атмосферу Марса с последующим возвращением на Землю.

Основной вклад в теплопередачу при полете многоразовых летательных аппаратов с большими скоростями в атмосфере вносят гетерогенные каталитические реакции с участием образующихся в ударной волне высокоэнергетических частиц – атомов, радикалов, ионов [2, 3]. В земной атмосфере уже при относительно низких скоростях полета главную роль играют продукты диссоциации молекулярного кислорода. На планирующих траекториях входа, когда реакции в газовой фазе заморожены, рекомбинация, сопровождающаяся выделением значительной энергии, проходит на поверхности. Это позволяет говорить о каталитической активности как одном из основных свойств покрытия, препятствующем эффективной тепловой защите.

При входе тел в атмосферу Земли перед телами формируется сильная ударная волна, за которой имеет место существенная диссоциация воздуха. Часть атомов кислорода и азота

рекомбинирует непосредственно за ударной волной по мере падения температуры, а другая часть атомов достигает поверхности и рекомбинирует на ней, что приводит к увеличению аэродинамического нагрева. Для использования в системах теплозащиты космических аппаратов представляют интерес материалы, которые имеют малые величины коэффициентов рекомбинации. Такими материалами, например, являются стекло, кремний, карбид кремния. Высоко каталитическими материалами обычно считаются металлы и окислы металлов. Применение низко каталитических материалов является эффективным способом теплозащиты многоразовых аппаратов. Однако даже слабая каталитичность таких материалов может приводить к заметному возрастанию теплового потока к телу по сравнению с тепловым потоком к некаталитической поверхности. Это предъявляет высокие требования к моделям, описывающим каталитические свойства теплозащитных покрытий.

Большой объем экспериментальных исследований по высокотемпературному катализу в диссоциированном воздухе был выполнен в связи с разработкой системы теплозащиты воздушно-космических самолетов «Буран» и «Спейс Шаттл» [2]. В теоретических моделях гетерогенный катализ первоначально описывался реакциями первого порядка с константами скоростей, определяемыми из эксперимента. Позднее были предложены более точные феноменологические модели, основанные на теориях идеального и реального адсорбированных слоев Ленгмюра. Эти модели позволили при соответствующем подборе параметров удовлетворительно описать аэродинамический нагрев наветренной поверхности многоразовых космических аппаратов вдоль всей траектории спуска в атмосфере Земли [3].

Процессы адсорбции/десорбции являются фундаментом любой системы элементарных стадий, составляющей механизм гетерогенного катализа при взаимодействии диссоциированного воздуха с теплозащитным покрытием, и определяют дальнейшее развитие всей цепи поверхностных реакций. В работе исследовались процессы адсорбции атомов N и O на поверхности теплозащитного материала SiO<sub>2</sub> методами квантовой механики и молекулярной динамики.

## 2. Моделирование поверхности β-кристобалита

Хемосорбция – это процесс образования химических связей между адсорбатом (атомом, молекулой) и адсорбентом (например, поверхностью твёрдого тела). Поскольку образование химических связей обусловлено короткодействующими силами, то для описания локальных взаимодействий при хемосорбции весьма эффективными оказываются кластерные подходы. Кластер – сравнительно небольшой фрагмент решётки твёрдого тела, составленный из конечного числа атомов поверхностного слоя и атомов приповерхностных слоёв. В таком подходе открывается возможность прямого использования в расчётах методов квантовой механики, имеющих дело с ограниченными по размеру молекулярными системами.

Для керамики SiO<sub>2</sub> принята модель β-кристобалита. Последний, как и все полиморфные модификации оксида кремния, является конхоидальным материалом (т.е. не образует монокристалла с четко выраженными поверхностными плоскостями; поверхность является «мозаичной», состоящей из фрагментов отдельных граней). Для упрощения численного моделирования в работе использовалась только одна поверхность «идеального» β-кристобалита. В расчетах использовался кластерный подход, в котором поверхность кристалла моделировалась кластером, передающим стехиометрию кристалла и валентные состояния атомов, лежащих на верхнем слое. Рассматривалась Si-терминированная грань (111) диоксида кремния в предположении гранецентрированной решетки симметрии Fd3m для его идеального кристалла, показанная на рис. 1. Задача решалась методом теории функционала электронной плотности с расширенным гибридным функционалом, совмещенным с корреляционным функционалом Lee–Yang–Parr X3LYP [4]. В качестве базисных функций использовался корреляционно-согласованный поляризованный валентный трехэкспоненциальный базисный набор cc-pVTZ.

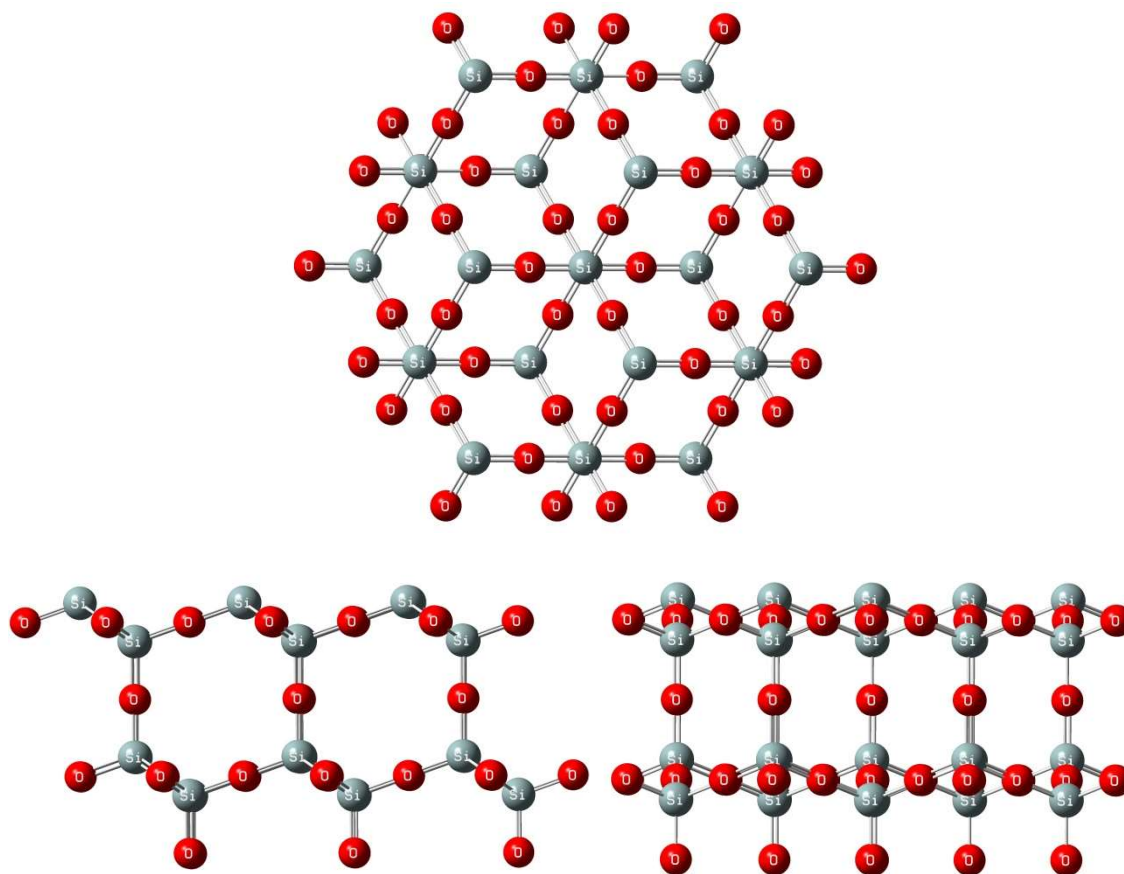


Рис. 1. Кристаллическая структура  $\beta$ -кристобалита и поверхности (111): вид сверху и с боков

Как видно из рис. 1, Si-терминированная грань (111)  $\beta$ -кристобалита состоит из равно-сторонних треугольников, объединенных в шестиугольник с другими Si атомами, расположенными на внешнем слое поверхности, в то время как атомы кремния второго слоя находятся в центре каждого треугольника. Чтобы описать адсорбцию по наружному атому, были взяты мостиковые Si-O-Si структуры с атомами кремния второго слоя, три мостика к кремнию следующего слоя с двумя Si-O связями на атом. Полученная структура, показанная на рис. 2, из 10 атомов Si, 12 атомов O и 15 атомов H, которые используются для насыщения свободных валентностей кластера. Полученный кластер имеет точечную симметрию  $C_{3v}$  и один неспаренный электрон (полный спин кластера  $S_c = 1/2$ ).

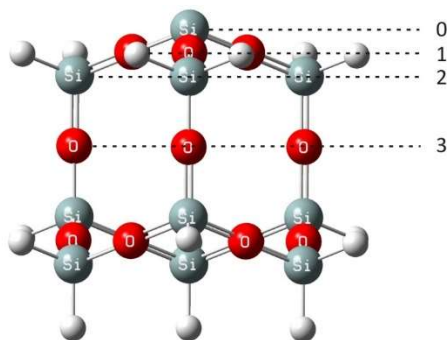


Рис. 2. Вид сбоку на кластер  $Si_{10}O_{12}H_{15}$ . Числа соответствуют  $(x, y)$  плоскостям, параллельным поверхности, атомов кремния (черные) и кислорода (серые). Свободные валентности замкнуты атомами водорода

Все расчеты проведены в рамках метода теории функционала плотности с функционалами и базовым набором, описанными выше. Для изолированного Si<sub>10</sub>O<sub>12</sub>H<sub>15</sub> кластера рассматривались две конфигурации, «кристаллическая», оптимизированная с ограничением одинаковых длин связей Si-O и «поверхностная», где четыре внутренние (Si, O, Si, O) плоскости были заморожены, Вторая Si плоскость и верхние атомы кремния могли двигаться по направлению  $z$ , перпендикулярному поверхности, а кислородные атомы, принадлежащие к 1-й плоскости, были способны двигаться согласованно по направлению  $z$  и в вертикальных плоскостях симметрии группы  $C_{3v}$ . Зафиксированные параметры были взяты из оптимизации «кристаллического» кластера. Длины и направления искусственных Si-H связей были оптимизированы для «кристаллического» кластера и замораживались во всех последних расчетах. Адсорбированный атом кислорода или азота подходил к вершине (атому Si) направления  $z$ . Оптимизация кластера в процессе адсорбции проводилась с теми же ограничениями, что «поверхностного» кластера.

Поверхность потенциальной энергии (ППЭ) рассчитывалась по двум определяющим параметрам  $R_1, R_2$  – расстояния от плоскости атомов кремния третьего уровня до соответственно атома кремния первого уровня и адсорбирующегося атома (рис. 1), которые изменялись в диапазоне  $R_1 = 0.75 \div 1.65$  с шагом 0.1 Å,  $R_2 = 2.35 \div 6.95$  с шагом 0.2 Å. Взаимодействие дублетного кластера Si<sub>10</sub>O<sub>12</sub>H<sub>15</sub> (спин  $S_c = 1/2$ ) с триплетным атомарным кислородом ( $S_O = 1$ ) или квартетным азотом ( $S_N = 3/2$ ) дают состояния дублетной и квартетной или триплетной и квинтетной мультиплетностями (полный спин  $S = 1/2$  и  $3/2$  или  $S = 1$  и  $2$ ), соответственно. Расчеты показали, что для обоих атомов оба спиновых состояния коррелируют с одним и тем же асимптотическим пределом по  $z_O$  или  $z_N \rightarrow \infty$ , причем состояние с низшим спином имеет глубокий минимум. Взаимодействия атома с кластером при высшем значении спина практически отталкивательны. По данным наших исследований, состояния с высшей мультиплетностью не дают сколько-нибудь значимого минимума, соответствующего хемосорбции.

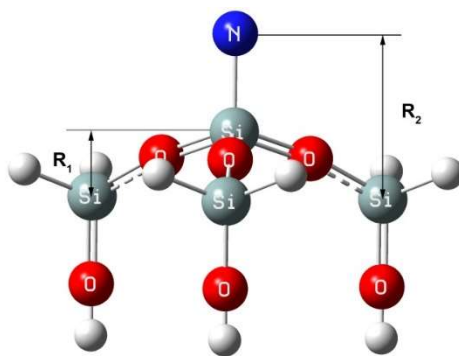


Рис. 3. Кластер, моделирующий поверхность SiO<sub>2</sub>,  
 $R_1$  и  $R_2$  – параметры сканирования поверхности  
потенциальной энергии

При приближении атома к кластеру происходит изменение мультиплетного состояния полной системы в результате спаривания валентных электронов и образования химической связи, что вызывает необходимость проведения расчетов для обоих мультиплетных состояний. Переход с одной ППЭ на другую при построении результирующей ППЭ осуществлялся на основе анализа параметра чистоты спинового состояния, что проиллюстрировано на рис. 4 при фиксированном  $R_1 = 1.25$  и  $1.35$  для атомов кислорода и азота соответственно. Этот параметр характеризует смешение высоких мультиплетных состояний при расчете конфигураций с неспаренными электронами [5], когда фактически электронная плотность рассматриваемого неспаренного электрона размывается на несколько виртуальных орбиталей. Отклонение параметра от своего стандартного значения  $S(S+1)$  указывает на то, что найденная

волновая функция не соответствует чистому спиновому состоянию, заданному при решении задачи. На рис. 4 пунктирные линии соответствуют параметру спиновой чистоты при сканировании ППЭ для различных мультиплетных состояний. Для атомов кислорода при мультиплетности  $m = 4$ , когда химическая связь с атомом кремния не образуется, для всех точек спиновая чистота не нарушается. Однако, при мультиплетности  $m = 2$ , когда должна быть химическая связь между указанными атомами, для значений координаты  $R_2$  более 3.65 ангстрем, спиновая чистота начинает превышать свое стандартное значение 0.75. Поэтому, результирующая кривая (final) при  $R_2 < 3.65$  совпадает с соответствующими значениями для  $m = 2$ , а при  $R_2 > 3.65$  с соответствующими значениями для  $m = 4$ . В случае адсорбции атомов азота ситуация аналогична ( $R_2 = 4.0$ ).

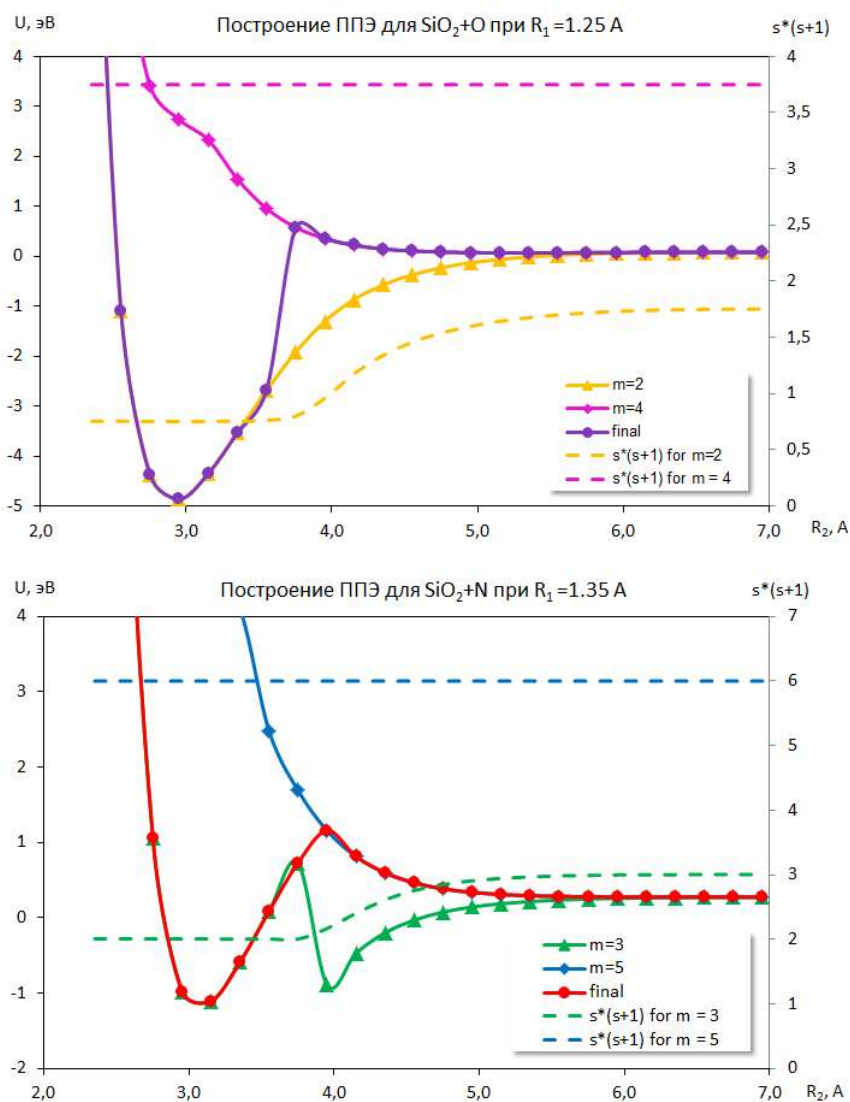
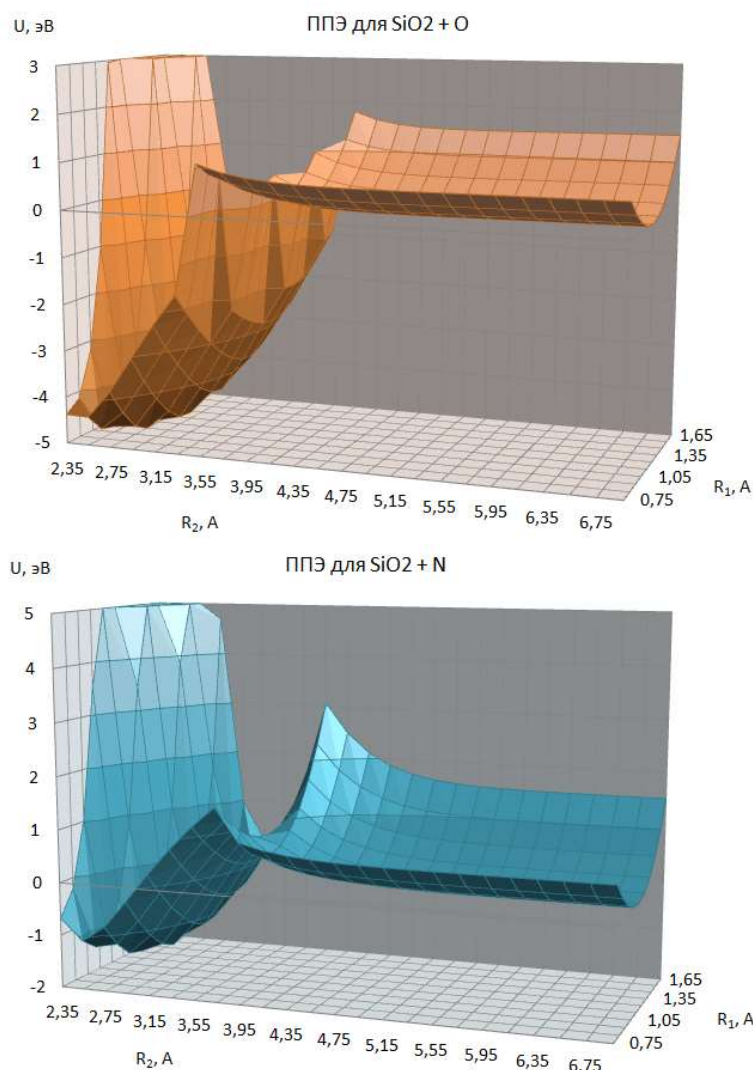


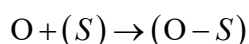
Рис. 4. Сопряжение потенциальных кривых, отвечающих разным мультиплетным состояниям для взаимодействия  $\text{SiO}_2 + \text{O}$  и  $\text{SiO}_2 + \text{N}$

Результирующие ППЭ при адсорбции/десорбции атомов кислорода и азота представлены на рис. 5. Отметим наличие барьера реакции и ярко выраженного минимума, отвечающего адсорбированному состоянию атома.

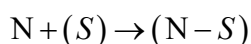
Рис. 5. ППЭ взаимодействия атомов кислорода и азота с поверхностью SiO<sub>2</sub>

### 3. Молекулярно-динамический расчет

Метод молекулярной динамики (МД) широко используется при исследовании химических реакций, как в газовой фазе, так и при взаимодействии газа с поверхностью с целью изучения механизмов реакций и определения ключевых характеристик процессов – дифференциальных сечений рассеяния, констант скоростей реакций, колебательных распределений продуктов реакций и т.п. Для проведения МД расчетов был использован авторский код “MD Trajectory”, который ранее уже применялся для исследования процессов гетерогенной рекомбинации атомов кислорода и азота по механизму Или – Ридела на различных теплозащитных покрытиях [6, 7]. Расчеты проводились в диапазоне температур от 500 до 2200 К. Для каждой температурной точки рассчитывалось более 100000 траекторий, конечным результатом которых была либо адсорбция атома на поверхности, либо его отражение от поверхности. ППЭ, полученные на основе квантовой механики, задавали силовое поле с учетом внутренней релаксации двух верхних слоев кристаллической решетки. В результате расчетов были определены константы скорости адсорбции атомов N, O в широком диапазоне температур. Рассчитанные константы скорости аппроксимированы в обобщенной форме Аррениуса:



$$k(T) = 2.226 \times 10^9 T^{0.859} \exp\left(-\frac{739}{T}\right), \frac{\text{см}^3}{\text{моль} \cdot \text{с}};$$



$$k(T) = 1.037 \times 10^{12} T^{0.024} \exp\left(-\frac{1781}{T}\right), \frac{\text{см}^3}{\text{моль} \cdot \text{с}}$$

На рис. 6 приведено сравнение констант скоростей, рассчитанных методом молекулярной динамики, с величинами, найденными по теории переходного состояния [11] и известными феноменологическими моделями различных авторов [8–10], которое показало хорошее согласие в области высоких температур 1500 ÷ 2000 К, отвечающей реальным условиям входа возвращаемого космического аппарата в атмосферу Земли. Такой результат обусловлен тем, что параметры в перечисленных феноменологических моделях были получены на основе анализа высокотемпературных экспериментов. Отметим, что результаты молекулярно-динамических расчетов достаточно близки к величинам констант скоростей адсорбции, полученных ранее авторами [11] по теории переходного состояния.

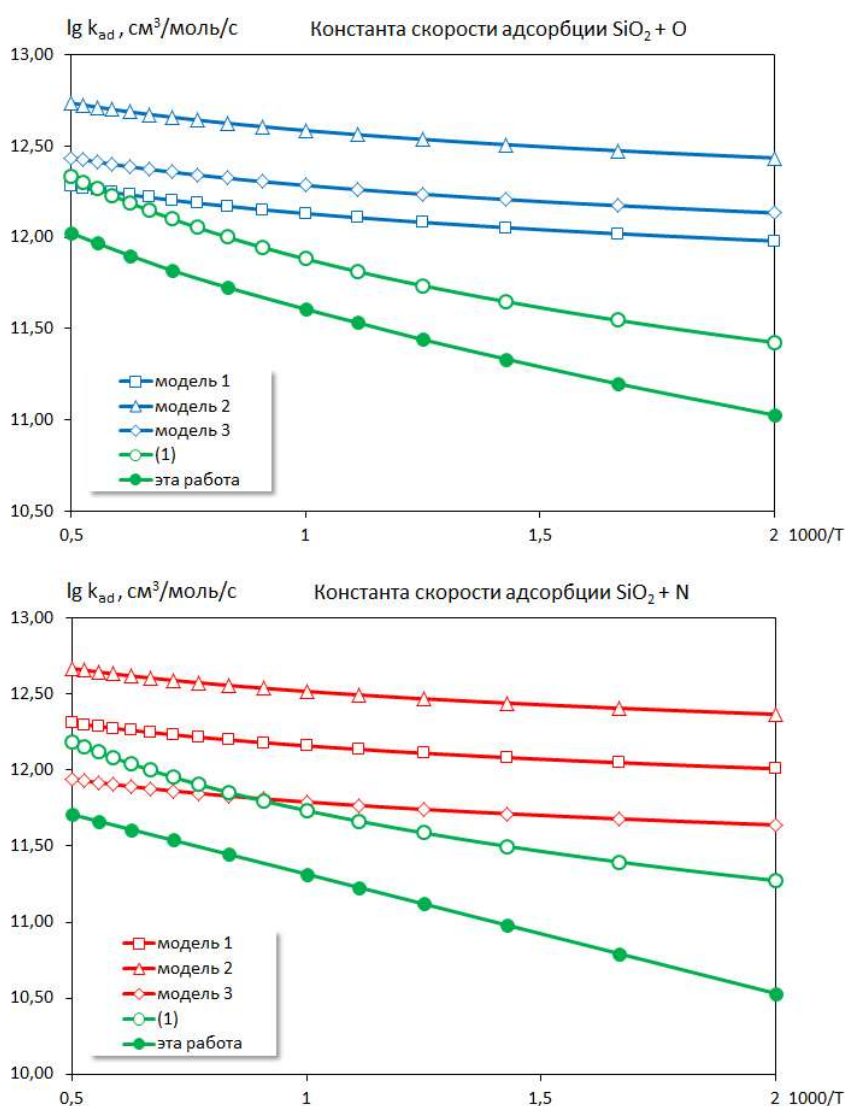


Рис. 6. Константы скорости адсорбции атомов O и N на поверхности  $\text{SiO}_2$ , сравнение результатов расчета методами молекулярной динамики, (1) – теории переходного состояния [11] с феноменологическими моделями: модель 1 [8], модель 2 [9], модель 3 [10]



## 4. Заключение

В работе исследовались процессы адсорбции атомов N и O на поверхностях теплозащитного материала SiO<sub>2</sub> (β-квистаболит) методами квантовой механики и молекулярной динамики. Для описания гетерогенных процессов использовался кластерный подход, в котором поверхность кристалла SiO<sub>2</sub> моделировалась кластером, передающим стехиометрию кристалла и валентные состояния атомов, лежащих на верхнем слое. Расчет поверхности потенциальной энергии (ППЭ) проводился методом теории функционала электронной плотности. На основе полученных ППЭ методами молекулярной динамики были определены константы скорости адсорбции атомов N, O в широком диапазоне температур поверхности 500 ÷ 2200 К и представлены в виде обобщенной формулы Аррениуса. Проведено сравнение рассчитанных констант скоростей с известными феноменологическими моделями и результатами расчетов по теории переходного состояния, которое показало хорошее согласие в области высоких температур 1500 ÷ 2000 К.

Работа проведена в соответствии с планом научных исследований НИИ механики МГУ. Работа выполнена с использованием вычислительных ресурсов ОВК НИЦ «Курчатовский институт», <http://computing.nrcki.ru/>.

## Литература

1. Hirschel E.H. Basics of Aerothermodynamics, Springer Berlin Heidelberg, Heidelberg, 2005.
2. Ковалев В. Л. Гетерогенные каталитические процессы в аэротермодинамике. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2002, 224 с.
3. Ковалев В.Л., Колесников А.Ф. Экспериментальное и теоретическое моделирование гетерогенного катализа в аэротермохимии // Известия РАН. МЖГ. 2005. № 5. С. 3 – 31.
4. M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H.P. Hratchian, A.F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J.L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J.A.J. Montgomery, J.E. Peralta, F. Ogliaro, M.J. Bearpark, J.J. Heyd, E.N. Brothers, K.N. Kudin, V.N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A.P. Rendell, J.C. Burant, S.S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J.M. Millam, M. Klene, J.E. Knox, J.B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R.E. Stratmann, O. Yazyev, A.J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J.W. Ochterski, R.L. Martin, K. Morokuma, V.G. Zakrzewski, G.A. Voth, P. Salvador, J.J. Dannenberg, S. Dapprich, A.D. Daniels, Ö. Farkas, J.B. Foresman, J. V. Ortiz, J. Cioslowski, D.J. Fox, Gaussian 09, Gaussian, Inc., Wallingford CT. 2009.
5. Кларк Т. Компьютерная химия. – М.: Мир, 1990. 383 с.
6. Kovalev V.L., Pogosbekyan M.Y. Simulation of heterogeneous atom recombination on spacecraft heat shield coatings using the methods of molecular dynamics // Fluid Dynamics. 2007. Vol. 42. No. 4. Pp. 666–672. <http://dx.doi.org/10.1134/S0015462807040163>
7. Kovalev V.L., Krupnov A.A., Pogosbekian M.J., Sukhanov L.P. Analysis of heterogeneous recombination of oxygen atoms on aluminum oxide by methods of quantum mechanics and classical dynamics // Acta Astronautica. 2011. Vol. 68. No. 7–8. Pp. 686–690. <http://dx.doi.org/10.1016/j.actaastro.2010.10.011>
8. Deutschmann O., Riedel U., Warnatz J. // ASME Journal of Heat Transfer. 1995. Vol. 117. P. 495. <https://doi.org/10.1115/1.2822549>
9. Kurotaki T. Construction of catalytic model on SiO<sub>2</sub>-based surfaces and application to real trajectory // AIAA Paper. No. 2000-2366. <https://doi.org/10.2514/6.2000-2366>
10. Nasuti F., Barbato M., Bruno C. Material-dependent catalytic recombination modeling for hypersonic flows // J. Thermophys. Heat Transf. 1996. Vol. 10. No. 1. Pp. 131–136. <https://doi.org/10.2514/3.76>

11. Kroupnov A.A., Pogosbekian M.J. Interaction of dissociated air with the surface of  $\beta$ -cristobalite material // *Acta Astronautica*. 2023. Vol. 203. No. 2. Pp. 454–468. <http://dx.doi.org/10.1016/j.actaastro.2022.12.027>

## References

1. Hirschel E. H., *Basics of Aerothermodynamics*, Springer Berlin Heidelberg, Heidelberg, 2005.
2. Kovalev V. L., *Heterogeneous catalytic processes in aerothermodynamics*, M.: FIZMATLIT, 2002, 224 p. [in Russian].
3. Kovalev V. L., Kolesnikov A. F., Experimental and theoretical simulation of heterogeneous catalysis in aerothermochemistry, *Fluid Dynamics*, 2005, vol. 40, pp. 669–693. <https://doi.org/10.1007/s10697-005-0106-4>
4. M.J. Frisch, G.W. Trucks, H.B. Schlegel, G.E. Scuseria, M.A. Robb, J.R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, B. Mennucci, G.A. Petersson, H. Nakatsuji, M. Caricato, X. Li, H.P. Hratchian, A.F. Izmaylov, J. Bloino, G. Zheng, J.L. Sonnenberg, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, J.A.J. Montgomery, J.E. Peralta, F. Ogliaro, M.J. Bearpark, J.J. Heyd, E.N. Brothers, K.N. Kudin, V.N. Staroverov, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A.P. Rendell, J.C. Burant, S.S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, N. Rega, J.M. Millam, M. Klene, J.E. Knox, J.B. Cross, V. Bakken, C. Adamo, J. Jaramillo, R. Gomperts, R.E. Stratmann, O. Yazyev, A.J. Austin, R. Cammi, C. Pomelli, J.W. Ochterski, R.L. Martin, K. Morokuma, V.G. Zakrzewski, G.A. Voth, P. Salvador, J.J. Dannenberg, S. Dapprich, A.D. Daniels, Ö. Farkas, J.B. Foresman, J.V. Ortiz, J. Cioslowski, D.J. Fox, *Gaussian 09*, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2009.
5. Clark T., *A Handbook of Computational Chemistry*, New York: Wiley-Interscience, 1985, 352 p.
6. Kovalev V. L., Pogosbekyan M. Y., Simulation of heterogeneous atom recombination on spacecraft heat shield coatings using the methods of molecular dynamics, *Fluid Dynamics*, 2007, vol. 42, no. 4, pp. 666–672. <http://dx.doi.org/10.1134/S0015462807040163>
7. Kovalev V. L., Krupnov A. A., Pogosbekian M. J., Sukhanov L. P., Analysis of heterogeneous recombination of oxygen atoms on aluminum oxide by methods of quantum mechanics and classical dynamics, *Acta Astronautica*, 2011, vol. 68, no. 7–8, pp. 686–690. <http://dx.doi.org/10.1016/j.actaastro.2010.10.011>
8. Deutschmann O., Riedel U., Warnatz J., Modeling of Nitrogen and Oxygen Recombination on Partial Catalytic Surfaces, *ASME J. of Heat Transf.*, 1995, vol. 117, p. 495. <https://doi.org/10.1115/1.2822549>
9. Kurotaki T., Construction of catalytic model on SiO<sub>2</sub>-based surfaces and application to real trajectory, AIAA Paper 2000-2366. <https://doi.org/10.2514/6.2000-2366>
10. Nasuti F., Barbato M., Bruno C., Material-dependent catalytic recombination modeling for hypersonic flows, *J. Thermophys. Heat Transf.*, 1996, vol. 10, no. 1, pp. 131–136. <https://doi.org/10.2514/3.763>
11. Kroupnov A. A., Pogosbekian M. J., Interaction of dissociated air with the surface of  $\beta$ -cristobalite material, *Acta Astronautica*, 2023, vol. 203, no. 2, pp. 454–468. <http://dx.doi.org/10.1016/j.actaastro.2022.12.027>

Статья поступила в редакцию 14 мая 2023 г.