

宏观速度对适应系数的影响规律研究

张烨 张冉 赖剑奇 李桦

Effect of macroscopic velocity on accommodation coefficients based on the molecular dynamics method

Zhang Ye Zhang Ran Lai Jian-Qi Li Hua

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 68, 224702 (2019) DOI: 10.7498/aps.68.20190987

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190987>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

速度对聚四氟乙烯摩擦系数影响的分子动力学模拟

Effect of velocity on polytetrafluoroethylene friction coefficient using molecular dynamics simulation

物理学报. 2019, 68(17): 176801-1 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190495>

气体-表面相互作用的分子动力学模拟研究

Molecular dynamics simulations on scattering of Ar molecules on smooth and rough surfaces

物理学报. 2018, 67(22): 223401 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181608>

纳米通道内气体剪切流动的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulations of surface effects on Couette gas flows in nanochannels

物理学报. 2018, 67(8): 084701 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20172706>

宏观速度对适应系数的影响规律研究*

张焱¹⁾ 张冉^{1)2)†} 赖剑奇¹⁾ 李桦¹⁾

1) (国防科技大学空天科学学院, 长沙 410073)

2) (西北核技术研究院, 激光与物质相互作用国家重点实验室, 西安 710024)

(2019年6月28日收到; 2019年7月19日收到修改稿)

适应系数是稀薄气体动力学中的重要参数, 反映了气体分子与固体表面的动量和能量适应程度, 常常用于稀薄气体数值模拟的边界条件中. 本文构建了单个气体分子 Ar 与金属 Pt 表面相互作用的物理模型, 通过 Phontom 模型来构造固体壁面以反映真实物理特性. 采用分子动力学方法模拟了气体分子在固体表面的碰撞过程, 通过速度抽样使得入射气体具有宏观速度特征, 根据入射前和反射后气体分子的平均动量和能量计算出切向动量适应系数、法向动量适应系数和能量适应系数, 分别在光滑和粗糙表面下分析了适应系数随宏观切向速度和宏观法向速度的变化规律. 结果显示, 适应系数对于气体的宏观速度和表面粗糙度均表现出了很强的相关性. 切向速度的增大使得气体分子与表面的作用时间缩短, 适应系数减小, 对于气固适应有消极的作用. 当切向速度较大时会发生动量由切向向法向转移的情况. 法向速度的增大对于光滑表面而言有助于气体分子与表面的动量和能量适应, 对于粗糙表面而言却呈现相反的规律.

关键词: 气固相互作用, 宏观速度, 适应系数, 分子动力学

PACS: 47.61.-k, 47.11.Mn, 68.47.-b, 47.45.Gx

DOI: 10.7498/aps.68.20190987

1 引言

由于稀薄气体流动在微纳机电系统、真空技术、航天工程以及过程工艺比如多相催化、气体分离薄膜等方面的广泛应用, 有关稀薄气体流动机理的研究备受重视^[1-5]. 气体与固体表面的相互作用作为稀薄气体流动的关键问题, 可以为物理吸附状态、能量转换机制以及分子碰撞的细节等稀薄气体流动边界问题提供极有价值的信息^[6]. 然而由于物理上的复杂性, 目前对气-固相互作用规律的研究还不充分, 因此有必要对其展开深入研究.

气体的稀薄程度由克努森数 ($Kn = \lambda/L$, 其中 λ 为气体分子平均自由程, L 为流动特征长度) 来量化. 随着克努森数的增大, 气体稀薄程度增加, 此时连续性假设不再适用, 必须使用动能理论来描

述分子的输运. 许多基于玻尔兹曼方程的粒子类数值方法, 比如直接模拟蒙特卡罗法 (DSMC)、网格粒子法 (PIC) 以及格子玻尔兹曼法 (LBM), 可以很好地模拟稀薄气体流动^[7-9]. 粒子类方法具备合适的处理分子间碰撞的模型, 能够模拟复杂的稀薄流动系统. 然而, 由于稀薄条件下气体分子间碰撞频率的减小, 气体与固体表面的相互作用则起主导作用^[10]. 为了模拟气体在固体边界处的散射现象, 粒子类方法中通常需引入散射核模型来描述气体在表面的散射规律. Maxwell 提出了最早的散射核模型^[11], 他认为气体分子与表面碰撞后, α 部分气体分子在表面发生漫反射, 即该部分气体与表面完全适应, 剩余的 $1 - \alpha$ 部分气体分子在表面发生镜面反射, 反射气体分子仍然保留了入射气体分子的信息. 另一个广泛使用的散射核模型为 CLL 模型^[12,13], 由 Cercignani 和 Lampis 最先提出并由 Lord 进一

* 国家自然科学基金 (批准号: 11472004) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zr07024221@126.com

步发展. CLL 模型是一种满足归一化条件和互易性原理并且恒为正的散射核模型, 包含两个独立参数, 用于反映不同方向的散射特性, 因此 CLL 模型在描述气体散射规律方面比 Maxwell 模型更为灵活. 上述散射核模型中使用的参数称为适应系数, 适应系数包括三种不同类型, 分别为切向动量适应系数 (TMAC), 法向动量适应系数 (NMAC) 以及能量适应系数 (EAC), 分别表征气体分子的切向动量、法向动量以及能量对表面的适应程度. 在稀薄气体动力学相关的各种模拟方法中, 适应系数是边界条件的核心参数^[14,15]. 不仅在散射核模型中适应系数必须给定, 在通过连续介质方程求解滑移流动时附加的滑移边界条件和温度阶跃条件中, TMAC 和 EAC 也是必须用到的参数^[16,17]. 由此可见, 适应系数在稀薄气体流动的边界条件中扮演着重要的角色, 是描述气-固相互作用的核心参数, 能否准确地模拟稀薄气体流动, 很大程度上取决于适应系数的取值是否符合气体在表面的散射规律. 然而, 由于适应系数的影响规律众多, 针对不同的问题, 适应系数的值难以确定, 很多工程问题中只是经验性地将适应系数取值为 1, 这必然会导致流场模拟结果的不精确. 为了构造更加符合物理实际的边界条件, 使得稀薄气体流动的数值模拟更加精确, 必须从气体分子与表面相互作用的微观过程展开研究, 充分了解气体分子在与表面碰撞过程中的动量和能量交换机理, 理清适应系数与来流条件和固体表面条件之间的复杂关系.

分子动力学 (MD) 方法^[18] 是研究气-固相互作用的有力手段^[19,20], 不引入任何假设, 许多学者都证实了分子动力学的结果能够很好地符合已有的实验结果^[21,22]. 此外, 分子动力学方法还可以对一些实验所不能实现的极端流场环境下的流动机理开展研究^[23]. 通过分子动力学方法, 前人开展了许多气-固相互作用以及适应系数方面的研究. Cao 等^[24] 采用 MD 方法研究了微通道内的气体流动, 发现 TMAC 随着温度升高的递减规律符合指数衰减率, 且在较低的温度下, TMAC 对于温度的敏感性更大. Finger 等^[25] 研究了 He 气体分子在金属铜表面的散射特性, 研究了气体入射角度、入射能量、表面晶体构型以及表面吸附层对气体分子散射特性和切向动量运输的影响. Sun 和 Li^[26–28] 采用二维 MD 方法, 在流动过程中对气体分子与表面的碰撞进行跟踪, 统计得到气体分子的入射及

反射速度, 从而直接计算得到气体分子对表面的适应系数, 并进一步研究了表面构型、表面温度和物理吸附等因素对适应系数的影响规律. Kovalev 和 Yakunchikov^[22] 通过 MD 方法研究了氢气在石墨表面的散射过程, 发现当气体分子温度升高时, 表面温度的影响会减弱, 当温度较低时, 由于表面的物理吸附, 适应系数会增大. Prabha 和 Sathian^[29] 基于 MD 方法模拟光滑纳米通道内的气体流动来研究气-固相互作用特性, 发现 EAC 随表面温差的变化呈现出自然对数的关系, 动量的切向分量与分子入射速度表现出很强的相关性. Pham 等^[30] 采用 Kulginov 势能函数描述 Ar 原子与金属 Pt 之间的势能相互作用, 进一步研究了表面构型、入射角度以及表面温度对 TMAC 的影响规律. Liang 和 Koblinski^[31] 采用大规模 MD 方法模拟了单原子和双原子气体在 Au 表面的流动, 研究了气固相互作用强度、气固原子质量比、固体弹性刚度对热适应系数和动量适应系数的影响规律. Reinhold 等^[32] 构建了真实气体分子 Ar, N₂ 和 CO₂ 在真实表面的散射系统, 研究了散射后的角度分布和 TMAC 的变化规律. Lim 等^[33] 采用 MD 方法研究了 He, Ne, Ar, Kr 和 Xe 等惰性气体的流动, 发现随着气体分子质量的增大, TMAC 增大或减小的情况均会出现. Yakunchikov 等^[34] 通过惰性气体在石墨表面的散射研究了气体分子质量、大小以及气-固作用势能对 TMAC 和 EAC 的影响规律. 张冉等^[35] 模拟了过渡区纳米通道内剪切力驱动的气体流动, 探究了通道高度和气-固相互作用势能系数对 TMAC 的影响规律.

总结前人的工作, 我们发现, 气体分子在固体表面的适应系数随温度、势能系数、表面构型、分子质量、分子类型、入射角度等众多因素影响, 展现出了丰富的变化规律. 然而对于具有一定宏观速度的来流条件, 其对适应系数的影响规律尚未见系统深入的研究. 事实上, 在临近空间稀薄大气环境下, 自由来流作用在航天飞行器的表面时不但有很大的宏观速度, 而且会与表面形成一定的夹角, 导致法向速度分量的影响也不容忽视. 而且真实情况下的固体表面总是具有一定的粗糙度^[36,37], 且粗糙度的尺寸相比于表面力场势阱深度并不是小量, 粗糙度的存在会大大改变表面的势能分布^[38], 因此本文还探究了宏观速度与粗糙度的耦合效应的影响. 本文构建的物理模型为单个分子与表面的相互

作用, 采用该模型只关注气体分子与表面的相互作用, 避免计算主流区的流动时占据大量计算时间, 大大提高了计算效率, 且气体分子的入射条件可以灵活控制, 气-固相互作用信息易于获得, 方便对相关问题的研究.

本文构建了单分子氩气与金属铂表面的相互作用模型, 基于 MD 方法模拟了气体分子在固体表面的散射过程, 通过速度取样法统计出气体分子入射前和反射后的平均动量和能量, 计算出气体分子的 TMAC, NMAC 以及 EAC, 进一步分析了在光滑和粗糙表面下, 来流宏观切向和法向速度对气体在固体表面的动量和能量交换的影响规律.

2 气体-表面相互作用模型

本文采用分子动力学方法研究气体分子 Ar 在金属 Pt 表面的散射过程, 其物理模型如图 1 所示. 固体壁面采用 Phantom 模型^[39]来构造, 该模型在模拟壁面原子结构、处理壁面原子与气体分子间的能量交换等方面都比较真实. 该模型包含三层壁面原子: 第一层为真实原子层, 与气体分子直接发生相互作用, 该层依靠虚拟弹簧力和势能函数模拟壁面原子的运动; 第二层为缓冲层, 将真实原子层与气体分子相互作用的力、动量、能量向基底原子传递, 其原子的运动由连接第一层和第三层的虚拟弹簧力维持; 第三层为基底, 原子位置固定以稳定壁面.

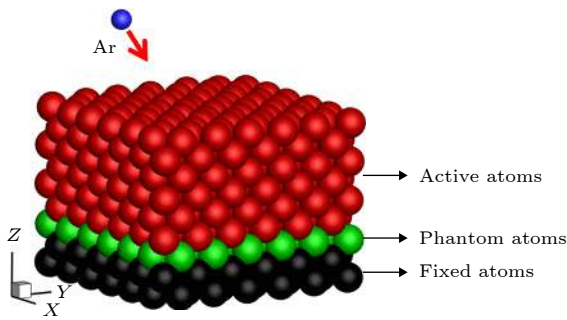


图 1 气体分子在固体表面散射的物理模型

Fig. 1. Physical model for scattering gas molecules on solid surfaces.

壁面原子按照面心立方晶格点阵 (FCC) 排列, 其 (100) 晶面与气体分子相接触, 晶格常数 $A = 1.15\sigma$, X 和 Y 方向上采用周期性边界条件. 为了考察粗糙度对气体与表面相互作用的影响, 本文通过一种典型的金字塔模型来构造表面粗糙度^[40],

其几何形状示意图见图 2. 根据能量最低原理, 块状粗糙度由于具有较大的表面自由能而不太稳定, 其粗糙单元的上层原子会逐渐迁移到较低位置, 最终会演变成具有较小表面能的金字塔形结构. 因此本文采取的粗糙度模型合乎物理实际, 在结构上具有很好的稳定性. 本文采用两种不同大小的粗糙度单元, 高度分别为 0.5 Å 和 1.0 Å.

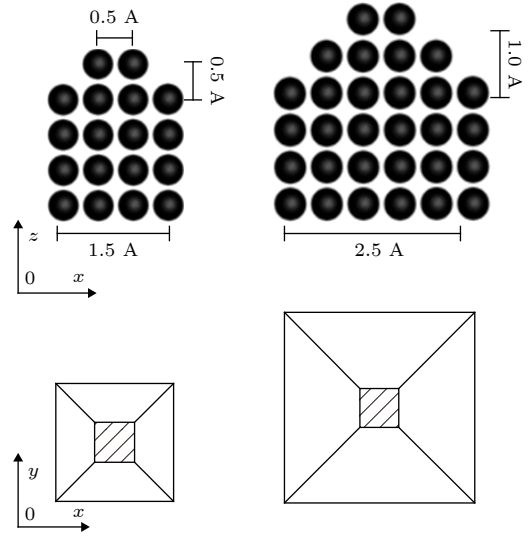


图 2 表面粗糙度的纳米构型

Fig. 2. Schematic diagram of the roughness geometry.

气体分子与壁面原子之间的相互作用采用截断 Lennard-Jones(L-J)6-12 势能函数^[41]来模拟, 其函数表达式为

$$U^{LJ}(r_{ij}) = 4\epsilon_{ArPt} \left\{ \left[\left(\frac{\sigma_{ArPt}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ArPt}}{r_{ij}} \right)^6 \right] - \left[\left(\frac{\sigma_{ArPt}}{r_c} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ArPt}}{r_c} \right)^6 \right] \right\}, \quad (1)$$

其中 σ_{ArPt} 为长度参数, ϵ_{ArPt} 为能量参数; r_{ij} 为分子间距离, r_c 为截断半径, 取值为 $3.0\sigma_{ArPt}$. 为了计算方便, 计算中采用 Ar 原子的质量、能量参数以及长度参数为基本单位进行约化. 相关参数的值列于表 1.

表 1 分子动力学模拟中的参数

Table 1. Parameters in the MD simulations.

相互作用	σ/nm	ϵ/J	mass/kg
Ar-Ar	0.3405	1.670×10^{-21}	6.633×10^{-26}
Pt-Pt	0.2770	52.07×10^{-21}	32.36×10^{-26}
Ar-Pt	0.3085	0.894×10^{-21}	—

分子间的作用力通过邻位列表法来处理, 运动方程通过 velocity-Verlet 算法来积分. 在计算过程中, 为了使壁面始终保持在给定的温度下, 我们对壁面原子进行速度标定, 其公式如下:

$$v'_i = v_i \sqrt{T/T_C}, \quad (2)$$

其中 T_C 为期望温度, 本文取值为 300 K. 计算时间步长取为 0.0005, 前 5 万时间步为壁面弛豫时间. 由于气体的散射在各个切向方向是各向同性的^[22], 因此不妨将气体分子始终沿着 x 轴正方向入射. 每次模拟的初始时刻, 氩原子处于坐标 $(x, y, z = 3.0\sigma_{ArPt})$ 的位置 (坐标原点在 z 方向选取为表面最上层原子的位置), x 和 y 是均匀随机分布的变量. 入射气体分子的初始高度与表面最上层原子的距离刚好等于气-固相互作用截断半径 r_c . MD 模拟的分子运动通过短程力来控制, 由 (1) 式可以看出, 若气体分子与表面的距离大于等于截断半径 r_c , 气-固相互作用力趋于零, 可忽略不计. 只有当气体分子与壁面的距离小于截断半径时, 气-固相互作用才变得重要. 因此这一入射高度值的选取保证了初始时刻气体分子不受表面力场的作用, 同时也避免了多余的计算时间步.

单分子入射分子动力学包含两种不同的实施途径^[32]. 第一种为分子束法, 受分子束实验启发, 入射气体分子的能量和角度固定以减小系统的复杂性, 用于细致研究入射角和反射角的关系. 第二种为采样法, 入射气体分子的速度符合特定温度下的 Maxwell-Boltzmann 分布, 因为可以模拟自由来流条件下的气-固相互作用问题. 本文采用采样法, 入射气体分子的初始速度可以表达为宏观速度与符合 Maxwell-Boltzmann 分布的热运动速度的叠加:

$$F(u') = \left(\frac{m_{Ar}}{2\pi k_B T}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{m_{Ar}(u' - u_0)^2}{2\pi k_B T}\right),$$

$$F(w') = 2\left(\frac{m_{Ar}}{2k_B T}\right)^{1/2} w' \exp\left(-\frac{m_{Ar}(w' - w_0)^2}{2\pi k_B T}\right), \quad (3)$$

式中, u', w' 分别为切向和法向热运动速度; u_0, w_0 分别为切向和法向宏观速度; T 为气体温度; $k_B = 1.3806 \times 10^{-23} \text{ JK}^{-1}$ 为玻尔兹曼常数. 气体与壁面可能发生多次碰撞, 判断散射过程结束的标志为气体分子的高度大于初始时刻的高度值, 因为此时气-固相互作用力消失, 气体分子不再受到表面

力场的作用, 从而离开表面区域, 标志着散射过程的结束. 为了保证计算结果的准确性, 对于每个来流条件, 均计算了 30 万次气体分子在表面上的散射.

气体与表面的相互作用的切向动量适应系数 σ_t (TMAC)、法向动量适应系数 σ_n (NMAC) 以及能量适应系数 α (EAC) 的定义式分别为:

$$\sigma_t = \frac{\tau_i - \tau_r}{\tau_i - \tau_w}, \quad (4)$$

$$\sigma_n = \frac{|p_i| - |p_r|}{|p_i| - |p_w|}, \quad (5)$$

$$\alpha = \frac{q_i - q_r}{q_i - q_w}, \quad (6)$$

其中, τ 为气体分子的平均切向动量, p 为气体分子的平均法向动量, q 为气体分子的平均能量, 下标 i, r 和 w 分别代表气体分子入射前、反射后以及与表面完全适应后的状态. 通过对与表面完全适应后的反射气体分子的速度分布函数进行积分, 可得 $\tau_w = 0$, $p_w = (m_{Ar}\pi k_B T_w/2)^{1/2}$, $q_w = 2k_B T_w$ ^[28].

如果气体分子与表面的作用时间超过 30 ps, 则代表气体分子在表面发生了吸附, 其解吸附后的动量遵从漫反射规律, 即发生了完全的动量适应, 这种情况下的适应系数均为 1, 所以应当对上述计算得到的适应系数进行吸附修正, 即

$$AC_{\text{Modify}} = AC \cdot (1 - \xi) + \xi, \quad (7)$$

式中 AC 为三种适应系数的统称, ξ 表示气体分子在表面的吸附概率.

3 结果与讨论

3.1 光滑表面下宏观速度的影响分析

3.1.1 宏观切向速度对适应系数的影响规律

首先, 将法向宏观速度分量设为 0, 仅改变切向宏观速度分量的值, 研究其对气体分子表面适应的影响规律. 由于宏观法向速度为 0, 则有 $p_i = p_w$, 导致在计算 NMAC 时出现奇异值, 且系统为温度保持在 300 K 的等温流动, 因此, 在这组算例中, 只计算了 TMAC.

图 3 为不同宏观切向速度下的 TMAC, 由图可知, TMAC 随着切向速度的增大而减小, TMAC 的数值从 $V_t = 0.2\sigma/\tau$ 时的 0.37 降低到 $V_t = 4.0\sigma/\tau$ 时的 0.11, 可见来流宏观切向速度的增大对气体分子与表面的动量适应具有明显消极的影响, 来流宏

观切向速度越大, 则气体对表面的切向动量适应情况越差. 为了考察其中的原因, 本文统计了不同来流切向速度大小下、气体分子与表面的相互作用时间, 如图 4 所示. 从图中可知, 由于来流切向速度的增大, 气体分子与表面作用时间随之减小, 进而导致气体分子与表面的适应程度减弱, 气体分子仍能在一定程度上保持其原有的宏观切向速度特征.

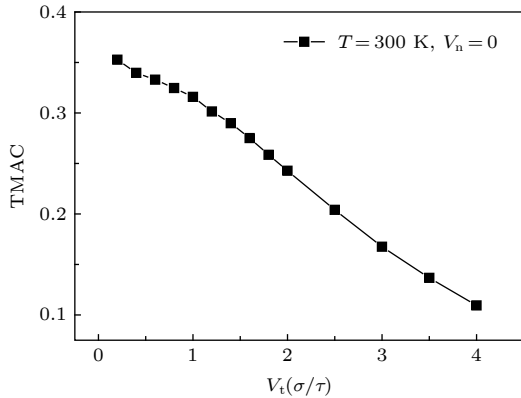


图 3 不同宏观切向速度下的切向动量适应系数
Fig. 3. TMAC values of gas molecular under different macroscopic tangential velocities.

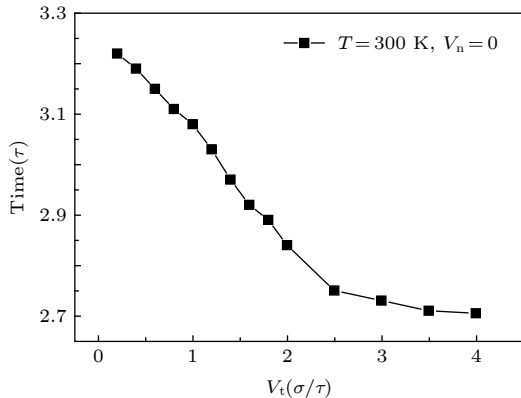


图 4 不同宏观切向速度下气体分子与表面作用时间
Fig. 4. Time of gas-solid interaction under different macroscopic tangential velocities.

3.1.2 宏观法向速度对适应系数的影响规律

为了考察法向速度对适应系数的影响, 在本小节中设置 4 组算例, 气体的宏观切向速度和 3.1.1 小节一样, 在 $0.2\sigma/\tau$ 到 $4.0\sigma/\tau$ 之间变化, 4 组算例的宏观法向速度分别为 $0.5\sigma/\tau$, $1.0\sigma/\tau$, $1.5\sigma/\tau$, $2.0\sigma/\tau$. 通过计算, 我们得到了不同法向速度和切向速度下的 TMAC, NMAC 和 EAC, 分别如图 5、图 6 和图 7 所示.

由图 5 可知, 在不同的法向速度下, TMAC 随

切向速度的变化趋势一致, 切向速度的增大均会导致 TMAC 的减小. 在切向速度小于 $2.0\sigma/\tau$ 时, 法向速度的变化对气体分子 TMAC 的影响很小. 当

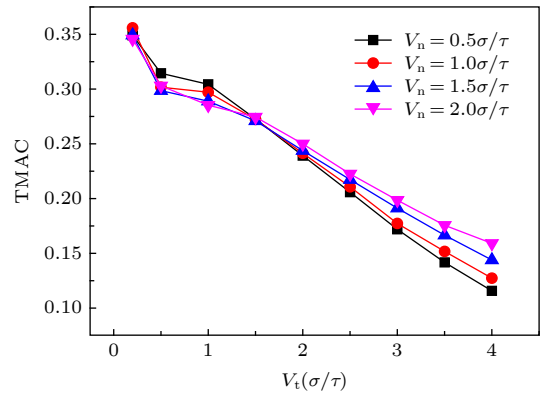


图 5 不同宏观切向速度及法向速度下的切向动量适应系数
Fig. 5. TMAC values of gas molecular under different macroscopic tangential and normal velocities.

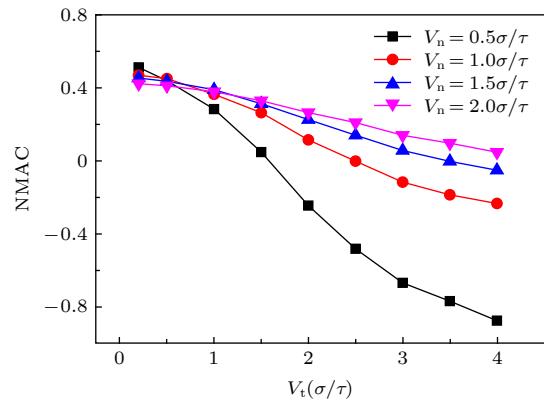


图 6 不同宏观切向速度及法向速度下的法向动量适应系数
Fig. 6. NMAC values of gas molecular under different macroscopic tangential and normal velocities.

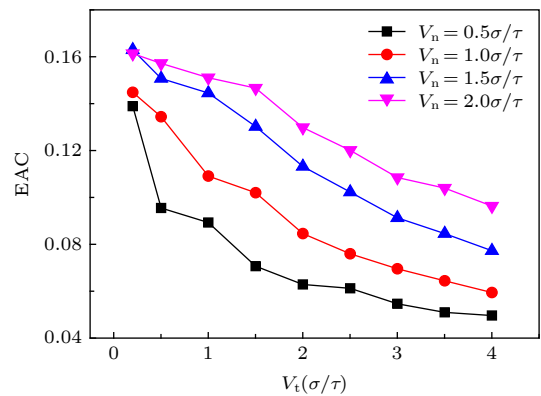


图 7 不同宏观切向及法向速度下的法向能量适应系数
Fig. 7. EAC values of gas molecular under different macroscopic tangential and normal velocities.

切向速度大于 $2.0\sigma/\tau$ 后, 法向速度的增大对气体分子切向动量与表面适应的促进作用开始显现出来. 总的来说, 法向速度的变化对 TMAC 影响较小. 当来流切向速度较小时, 法向速度的增大对气体分子与表面的切向动量没有太大影响, 当切向速度比较大时, 法向速度的增大对气体分子与表面的切向动量适应有积极作用.

由图 6 可知, 在不同的宏观法向速度下, NMAC 均随着宏观切向速度的增大而逐渐减小, 这种趋势随着法向速度的增大而越来越不明显. 当气体的切向速度小于 $1.0\sigma/\tau$ 时, 法向速度对 NMAC 的影响较小. 当切向速度大于 $1.0\sigma/\tau$ 后, 法向速度的增大导致 NMAC 明显增大, 法向速度对气体在表面的法向动量适应的促进作用开始显现出来. 同时我们注意到, 当来流切向速度较大且法向速度较小时, NMAC 出现了值为负的情况, 这意味着气体分子反射后的法向动量大于入射时的法向动量, 说明气固散射过程中发生了切向动量向法向动量的转移, 且这种动量转移程度随着切向速度的增大以及法向速度的减小而变强.

图 7 为不同来流速度下的 EAC, 从图中可以明显地看出, 在相同的切向速度条件下, 法向速度的增大有助于气体与表面的能量适应, 与此相反, 在相同的法向速度条件下, 切向速度的增大则不利于气体与表面的能量适应. 气体分子与表面碰撞时, 来流切向速度的增大使得气体分子与表面作用时间减少, 导致气-固能量交换不充分; 而入射气体分子的法向能量大小决定了气体分子入射到表面势能区域的深度, 气体分子进入表面势能区域越深, 气体分子与表面的能量交换就越充分, 则 EAC 越大.

3.2 粗糙表面下宏观速度的影响分析

上一节中对宏观速度在光滑表面下对气体分子动量和能量与表面的适应规律分别展开了分析, 但大多数情况下, 固体表面往往具有一定的粗糙度, 这就需要对宏观速度与粗糙度的综合性影响展开研究. 本节计算了以不同宏观速度入射的气体分子在不同表面上的 TMAC, NMAC 和 EAC.

具有不同宏观切向速度及法向速度的气体分子对粗糙度大小为 0.5 \AA 的粗糙表面的 TMAC、吸附概率、NMAC 及 EAC 分别如图 8—图 11 所示.

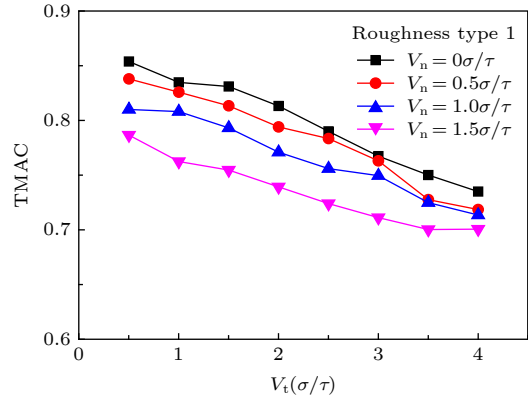


图 8 粗糙度为 0.5 \AA 的粗糙表面下, 不同宏观切向速度及法向速度下的切向动量适应系数
Fig. 8. TMAC values of gas molecular on rough surfaces of 0.5 \AA under different macroscopic tangential and normal velocities.

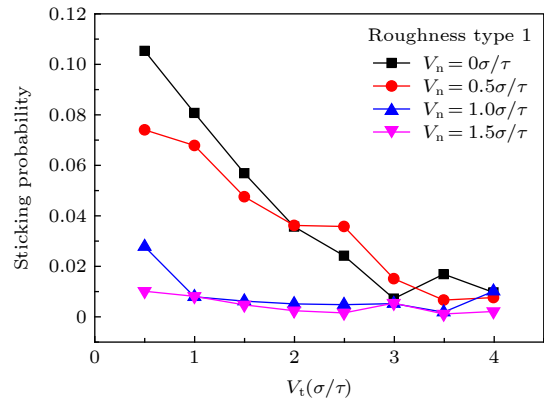


图 9 粗糙度为 0.5 \AA 的粗糙表面下, 不同宏观切向速度及法向速度下的气体分子吸附概率
Fig. 9. Sticking probability of gas molecular on rough surfaces of 0.5 \AA under different macroscopic tangential and normal velocities.

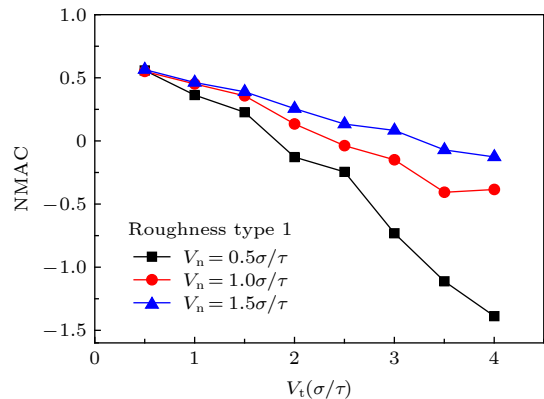


图 10 粗糙度为 0.5 \AA 的粗糙表面下, 不同宏观切向速度及法向速度下的法向动量适应系数
Fig. 10. NMAC values of gas molecular on rough surfaces of 0.5 \AA under different macroscopic tangential and normal velocities.

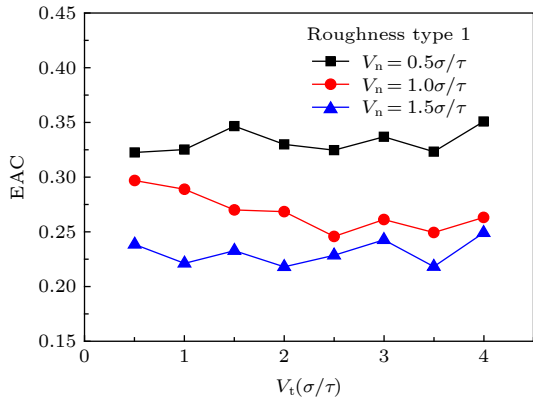


图 11 粗糙度为 0.5 A 的粗糙表面下, 不同宏观切向速度及法向速度下的能量适应系数
Fig. 11. EAC values of gas molecular on rough surfaces of 0.5 A under different macroscopic tangential and normal velocities.

从图 8 可知, 在不同的速度下, 对粗糙度高度为 0.5 A 的表面的 TMAC 的变化范围在 0.7—0.85 之间, TMAC 的数值相比于在光滑表面下大幅度提高, 同时 TMAC 的变化范围相对于光滑表面来说却是收窄的, 这说明粗糙度的出现使气体分子与表面的切向动量适应程度提高了, 同时也降低了 TMAC 对宏观速度变化的敏感度. 在 TMAC 和宏观速度的相关性上, TMAC 随着切向速度的增大而减小, 随着法向速度的增大而降低, 这和气体分子对光滑表面的动量适应规律有所不同.

图 9 为气体分子对粗糙度为 0.5 A 的表面的吸附概率随宏观速度的变化. 从图中可知, 吸附概率对宏观速度比较敏感, 来流的速度越大, 则气体分子的吸附概率就越小. 当来流切向与法向速度都较低时, 气体分子在表面的吸附概率可以达到 10% 以上, 相比于在光滑表面最大的吸附概率有很大的提高. 当来流速度逐渐增大后, 气体分子对表面的吸附概率降低, 当法向速度大于 $1.0\sigma/\tau$, 气体分子对表面的吸附基本可以忽略.

粗糙度为 0.5 A 时, 气体分子在不同来流条件下对表面的 NMAC 如图 10 所示, 在图中我们仍然发现了 NMAC 为负数的情况, 这说明对于粗糙表面, 速度分量之间发生的动量转移现象依旧存在. 此外, 在同样的速度条件下, NMAC 在粗糙表面条件下, 相比于光滑表面要有所减小, 表明粗糙度有助于气体分子切向与法向动量的转移.

粗糙度为 0.5 A 时, 气体分子在不同来流条件下对表面的 EAC 如图 11 所示, 由图可知, 对于相同的来流法向速度, 气体分子对表面的 EAC 对切

向速度的变化不敏感. 在各法向速度下, EAC 的值随切向速度的增大而产生微小波动, 其变化幅值均小于 5%. 可见, 影响气体分子与表面能量适应的主要因素为法向速度的大小, 法向速度越大, 气体分子与粗糙表面的能量适应就越差 (相比于光滑表面, 粗糙表面下的 EAC 更大, 说明粗糙度有助于气固能量的适应).

不同宏观切向速度及法向速度下, 气体分子对粗糙度大小为 1.0 A 的粗糙表面的 TMAC、吸附几率、NMAC 及 EAC 分别如图 12—图 15 所示. 由图可知, 各适应系数在粗糙度为 1.0 A 的情况下, 对不同速度的变化规律和表面粗糙度为 0.5 A 时的变化规律基本一致. 但还是有一些小的变化, 主要表现在以下几个方面: 1) 对于不同的来流速

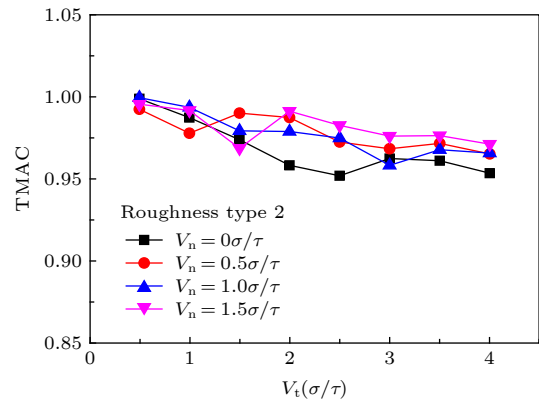


图 12 粗糙度为 1.0 A 的粗糙表面下, 不同宏观切向速度及法向速度下的切向动量适应系数
Fig. 12. TMAC values of gas molecular on rough surfaces of 1.0 A under different macroscopic tangential and normal velocities.

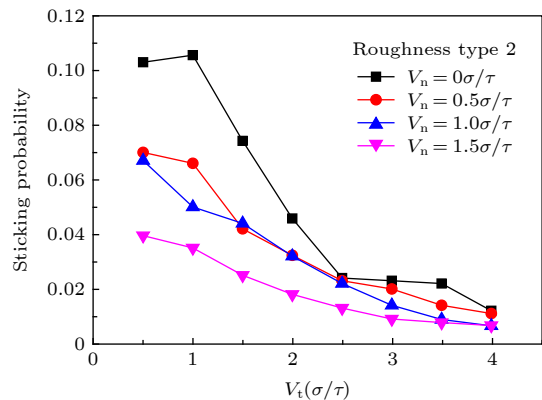


图 13 粗糙度为 1.0 A 的粗糙表面下, 不同宏观切向速度及法向速度下的气体分子吸附概率
Fig. 13. Sticking probability of gas molecular on rough surfaces of 1.0 A under different macroscopic tangential and normal velocities.

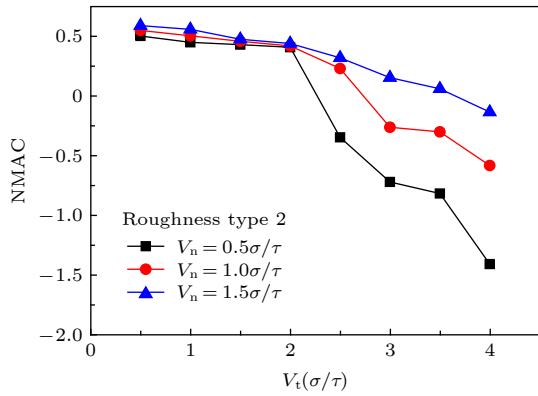


图 14 粗糙度为 1.0 Å 的粗糙表面下, 不同宏观切向速度及法向速度下的法向动量适应系数

Fig. 14. NMAC values of gas molecular on rough surfaces of 1.0 Å under different macroscopic tangential and normal velocities.

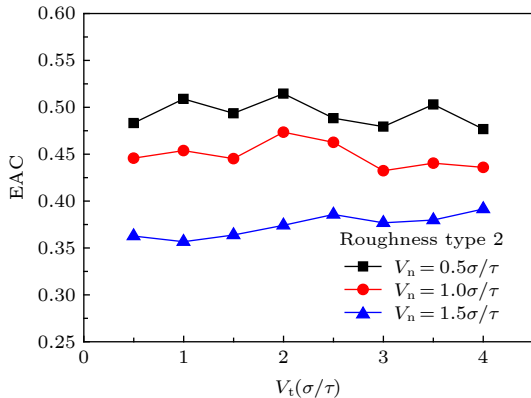


图 15 粗糙度为 1.0 Å 的粗糙表面下, 不同宏观切向速度及法向速度下的能量适应系数

Fig. 15. EAC values of gas molecular on rough surfaces of 1.0 Å under different macroscopic tangential and normal velocities.

度, TMAC 均在 0.95 以上, 这说明随着粗糙度的增大, TMAC 对来流速度的敏感性进一步降低; 2) 当法向速度较大时, 气体分子在表面的吸附概率提升, 且吸附概率表现出随切向速度的增大而明显减小的特性; 3) 随着粗糙度的增大, 气体分子在切向速度小于 $2.0\sigma/\tau$ 时, NMAC 对来流速度变化不敏感, 当切向速度大于 $2.0\sigma/\tau$ 后, NMAC 对来流速度的变化开始变得明显起来; 4) 在不同的速度条件下, 气体分子的 EAC 随着粗糙度的增大而显著提升。

4 结 论

与宏观连续流动不同, 稀薄条件下气体分子之间的碰撞频率显著减小, 气体分子与固体表面的相

互作用对于流动的影响起主导作用. 本文从微观角度出发, 通过构建合理的物理模型, 选取恰当的气体-表面间相互作用势能函数, 实现了对单个气体分子与表面碰撞的准确模拟, 研究方法真实可靠. 采用速度取样法获得不同来流条件下气体分子的入射速度, 通过模拟得到反射速度, 然后由入射和反射的平均动量和能量计算得到了气体分子对光滑和粗糙表面的 TMAC, NMAC, EAC 以及气体分子在表面的吸附概率, 探讨了切向速度、法向速度以及表面粗糙度对适应系数的影响规律, 并对其中的影响机理进行分析, 结论如下:

1) 在宏观法向速度确定的情况下, 对于相同状况的表面, 气体分子的 TMAC, NMAC 和 EAC 都随着切向速度的增大而降低, 表明切向速度的增大对气体分子与表面的切向动量、法向动量及总的能量适应都有着一定的消极作用; 当切向速度较大时会发生动量由切向向法向转移的情况, 而这种转移趋势会随着切向速度的增大而变得更加明显;

2) 法向速度对动量和能量适应系数的影响较为复杂, 对于光滑和粗糙的表面, 适应系数对法向系数的变化规律呈现出了相反的规律; 对于光滑表面, 法向速度的增大有助于气体分子与表面的切向动量和能量适应; 而对于粗糙表面, 气体分子与表面的切向动量和能量适应程度却随着法向速度的增大而减弱;

3) 气体分子对表面的适应系数对来流宏观速度以及表面粗糙度都表现出了一定的相关性, 传统散射核模型以及滑移边界条件采用不变的常数来表征气体分子与表面的适应规律是不合理的; 同时, 气体分子在固体表面发生的动量和能量的转移现象也是改进边界条件的重点. 这些从微观角度发现的现象对于理解稀薄气体流动机理, 提高粒子类数值模拟方法的准确性具有重要意义。

参考文献

- [1] Verbridge S S, Craighead H G, Parpia J M 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 013112
- [2] Zhang Z Q, Zhang H W, Ye H F 2009 *Appl. Phys. Lett.* **95** 154101
- [3] Song H Q, Yu M X, Zhu W Y, Zhang Y, Jiang S X 2013 *Chin. Phys. Lett.* **30** 014701
- [4] Rovenskaya O I 2015 *Int. J. Heat Mass Tran.* **89** 1024
- [5] Bao F B, Huang Y L, Zhang Y H, Lin J Z 2015 *Microfluid Nanofluid* **18** 1075

- [6] Cao B Y, Sun J, Chen M, Guo Z Y 2009 *Int. J. Mol. Sci.* **10** 4638
- [7] Bird G A 1994 *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows* (Oxford: Oxford University Press) pp199–206
- [8] Fan J, Shen C 2001 *J. Comput. Phys.* **167** 393
- [9] Yuan Y D, Rahman S 2016 *Physica A* **463** 25
- [10] Verbeek M G 2018 *Microfluid. Nanofluid.* **22** 34
- [11] Maxwell J C 1879 *Phil. Trans. R. Soc. Lond.* **170** 231
- [12] Cercignani C, Lampis M 1971 *Transp. Theory Stat. Phys.* **1** 101
- [13] Lord R G 1991 *Phys. Fluids* **3** 706
- [14] Agrawal A, Prabhu S V 2008 *J. Vac. Sci. Technol. A* **26** 634
- [15] Yakunchikov A N, Kovalev V L, Utyuzhnikov S V 2012 *Chem. Phys. Lett.* **554** 225
- [16] Zhang W, Meng G, Wei X 2012 *Microfluid. Nanofluid.* **13** 845
- [17] Zhang H W, Zhang Z Q, Zheng Y G, Ye H F 2010 *Phys. Rev. E* **81** 066303
- [18] Rapaport D C 2004 *The Art of Molecular Dynamics Simulation* (New York: Cambridge University Press) pp4–5
- [19] Bao F B, Huang Y L, Qiu L M, Lin J Z 2015 *Mol. Phys.* **113** 561
- [20] Spijker P, Markvoort A J, Nedeja S V, Hilbers P A 2010 *Phys. Rev. E* **81** 011203
- [21] Bruno D, Cacciatore M, Longo S, Rutigliano M 2000 *Chem. Phys. Lett.* **320** 245
- [22] Kovalev V, Yakunchikov A, Li F 2011 *Acta Astronaut.* **69** 744
- [23] Dongari N, Zhang Y H, Reese J M 2012 *AIP Conf. Proc.* **1501** 895
- [24] Cao B Y, Chen M, Guo Z Y 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 091905
- [25] Finger G W, Kapat J S, Bhattacharya A 2007 *J. Fluids Eng.* **129** 31
- [26] Sun J, Li Z X 2008 *Mol. Phys.* **106** 2325
- [27] Sun J, Li Z X 2009 *Mol. Simul.* **35** 228
- [28] Sun J, Li Z X 2010 *Comput. Fluids* **39** 1345
- [29] Prabha S K, Sathian S P 2012 *Comput. Fluids* **68** 47
- [30] Pham T T, To Q D, Lauriat G, Leonard C 2012 *Phys. Rev. E* **86** 051201
- [31] Liang Z, Keblinski P 2014 *Int. J. Heat Mass Tran.* **78** 161
- [32] Reinhold J, Veltzke T, Wells B, Schneider J, Meierhofer F, Colombi Ciacchi L, Chaffee A 2014 *Comput. Fluids* **97** 31
- [33] Lim W W, Suaning G J, McKenzie D R 2016 *Phys. Fluids* **28** 097101
- [34] Yamaguchi H, Matsuda Y, Niimi T 2017 *Phys. Rev. E* **96** 013116
- [35] Zhang R, Xie W J, Chang Q, Li H 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 084701 (in Chinese) [张冉, 谢文佳, 常青, 李桦 2018 物理学报 **67** 084701]
- [36] Cao B Y, Chen M, Guo Z Y 2006 *Int. J. Eng. Sci.* **44** 927
- [37] Xie J F, Cao B Y 2016 *Mol. Simul.* **43** 65
- [38] Zhang R, Chang Q, Li H 2018 *Acta Phys. Sin.* **67** 223401 (in Chinese) [张冉, 常青, 李桦 2018 物理学报 **67** 223401]
- [39] Maruyama S 2000 *Advances in Numerical Heat Transfer* (Vol.2) (Boca Raton : CRC Press) pp189
- [40] Zhang Y, Zhang R, Chang Q, Li H 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 124702 (in Chinese) [张焯, 张冉, 常青, 李桦 2019 物理学报 **68** 124702]
- [41] Wu L, Bogy D B 2002 *J. Tribol.-T. ASME* **124** 562

Effect of macroscopic velocity on accommodation coefficients based on the molecular dynamics method*

Zhang Ye¹⁾ Zhang Ran^{1)2)†} Lai Jian-Qi¹⁾ Li Hua¹⁾

1) (*College of Aerospace Science and Engineering, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China*)

2) (*State Key Laboratory of Laser Interaction with Matter, Northwest Institute of Nuclear Technology, Xi'an 710024, China*)

(Received 28 June 2019; revised manuscript received 19 July 2019)

Abstract

The accommodation coefficient is an important parameter in the field of rarefied gas dynamics, representing the adaptation level of the momentum and energy between gas molecules and solid surfaces, which is frequently used in the boundary conditions of numerical simulation of rarefied gas flow. In this paper, a physical model of the interaction between a single gas molecule Ar and the metal Pt surface is constructed, which greatly saves computational resources by omitting the collision between gas molecules in the bulk flow. The Pt surface is constructed by the Phantom model to reflect real physical properties. The surface roughness is modeled by a typical pyramid model, which is physically realistic and stable in structure. The molecular dynamics method is used to simulate the collision process of the gas molecules on the solid surface. The velocity sampling method is used so that the incident gas molecules possess the characteristics of macroscopic velocity. According to the average momentum and energy of the gas molecules before incidence and after reflection, the tangential momentum accommodation coefficients (TMACs), the normal momentum accommodation coefficients (NMACs) and the energy accommodation coefficients (EACs) are obtained. Moreover, the variation regularities of the accommodation coefficients with the macroscopic tangential velocity and the macroscopic normal velocity are analyzed under the smooth and rough surface, respectively. The results indicate that the accommodation coefficients have a strong correlation to macroscopic velocity and roughness. The increase of tangential velocity shortens the interaction time of gas molecules with solid surface, which results in the decrease of TMAC, NMAC and EAC of gas molecules, indicating that the tangential velocity has a negative effect on gas-solid adaptation. In addition, the momentum is found to be transformed from the tangential direction to the normal direction at a large tangential velocity, and this transformation tendency becomes more apparent as the tangential velocity increases. However, the influence of normal velocity on the momentum and energy accommodation coefficient is different. With regard to the smooth surface, the increase of normal velocity contributes to the tangential momentum and energy adaptation of gas molecules with the surface. While for the rough surface, the adaptation level of tangential momentum and energy between gas molecules and the surface is weakened as the normal velocity increases. This paper reveals the mechanism of gas molecules scattering on the surface from a microscopic point of view, which is quite different from the macroscopic phenomena. The conclusions of this paper indicate the irrationality of traditional scattering kernel models to represent the degree of accommodation through constant values, which is of great significance for the improvement of boundary conditions in rarefied gas flows.

Keywords: gas-surface interaction, macroscopic velocity, accommodation coefficient, molecular dynamics

PACS: 47.61.-k, 47.11.Mn, 68.47.-b, 47.45.Gx

DOI: 10.7498/aps.68.20190987

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11472004).

† Corresponding author. E-mail: zr07024221@126.com