

多参数入射条件下分子碰撞对适应系数的影响*

胡宇辉¹⁾²⁾ 陈琦^{2)†} 张伟³⁾ 江定武²⁾ 李锦²⁾ 乔晨亮²⁾

1) (西南科技大学土木工程与建筑学院, 绵阳 621010)

2) (中国空气动力研究与发展中心, 计算空气动力研究所, 绵阳 621000)

3) (西南科技大学航空航天学院, 绵阳 621010)

(2025年9月14日收到; 2025年10月10日收到修改稿)

有效的气体-表面相互作用参数对准确预测气体在稀薄环境中的流动特性至关重要。然而微观分子碰撞模型中不同分子动力学模拟方法得到的适应系数差异很大。为了准确描述非平衡环境中分子碰撞与动量、能量适应的关系, 本文采用分子动力学模拟研究了氩与铂表面的相互作用。通过单个散射(SS)和连续散射(CS)方法系统地讨论了气-气碰撞对适应系数的影响。比较了两种方法在不同表面形态、表面温度、入射气体分子速度等影响因素下的气体-表面相互作用特性。得到了适应系数与表面温度、入射速度等参数之间的依赖关系。通过分析两种模拟方法的差异, 揭示了多参数入射条件下适应系数变化的物理机制, 为建立更精准的气体-表面相互作用模型提供了重要基础和依据。

关键词: 分子动力学, 气体-表面相互作用, 适应系数, 表面形态**DOI:** 10.7498/aps.75.20251261**CSTR:** 32037.14.aps.75.20251261

1 引言

微纳机电系统(MEMS/NEMS)、高超声速飞行器热防护系统等领域的快速发展^[1-4], 推动了对稀薄气体流动机理的多学科交叉研究。气体的稀薄程度通常采用努森数(Kn)量化, 其定义为气体分子平均自由程与特征长度的比值。根据 Kn 的范围, 流动可分为: 连续流($Kn < 0.001$)、滑移流($0.001 < Kn < 0.1$)、过渡流($0.1 < Kn < 10$)、自由分子流($Kn > 10$)。当 $0.001 < Kn < 0.1$ 时, 气体的连续性假设依然成立, 但简单的无滑移边界条件不再适用。此时Maxwell^[5]等线性或非线性滑移模型^[6]开始作为边界条件以扩展Navier-Stokes(NS)方程的适用性。固体表面附近分子的动量运输处于非平衡状态, 该非平衡层通常称为Knudsen层, 其厚度

约等于邻近表面的平均自由程。随着 Kn 的增大, Knudsen层中会出现速度滑移和温度跳跃等现象, 该层也会逐渐从近壁区向主流区延伸。当 Kn 较大时, NS方程无法准确描述滑移现象, 因此需采用Burnett^[7]或高阶Burnett^[8]方程等方法求解稀薄气体流动。然而, 这些方法在边界条件和计算稳定性方面仍然存在一些问题。由于玻尔兹曼方程的非线性碰撞项的高维特性, 其对稀薄气体流动的直接求解受到限制。直接模拟蒙特卡罗(DSMC)方法能够准确处理分子碰撞过程, 并模拟各种复杂的稀薄流动系统。DSMC使用经验、半经验气体-表面相互作用模型来描述气体分子与表面之间的相互作用, 如Maxwell模型^[5]和CLL(Cercignani-Lampis-Lord)模型^[9]。Maxwell模型是最早提出的气体-表面相互作用模型, 该模型假设气体分子与表面碰撞后, 部分分子发生漫反射, 其余发生镜面反射。

* 四川省杰出青年科学基金(批准号: 2024NSFJQ0062)和西南科技大学研究生创新基金(批准号: 24yxc2053)资助的课题。

† 通信作者。E-mail: chenqi@mail.ustc.edu.cn

CL 模型由 Cercignani 和 Lampis^[10] 首次提出, 该模型满足归一化和互易性原理, 且恒为正. Lord 进一步发展该模型并应用于 DSMC, 形成了 CLL 模型. 上述模型中使用的参数称为适应系数 (ACs). ACs 包括三种类型: 切向动量适应系数 (TMAC)、法向动量适应系数 (NMAC) 和能量适应系数 (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. 虽然这些气体-表面相互作用模型在许多情况下有效, 并在工程实践中广泛应用, 但仍存在一些缺点^[11]. 例如, 这两种模型忽略了气体与表面之间的动量和能量适应与气体分子入射状态的关系. 在极度非平衡条件下, 这些模型也无法很好地复现实验中反射速度的现象. 本质上, 气体分子与表面的碰撞过程涉及微观的分子间相互作用和宏观的气体-表面相互作用模型, 属于典型的多尺度物理现象. 在微观层面, 入射分子之间以及与表面原子间通过复杂的相互作用, 如吸附、碰撞等传递能量从而改变运动状态; 在宏观层面, 这种相互作用通过气体-表面相互作用模型被统计平均为边界条件, 进而影响整体流场特性. ACs 高度依赖于势阱深度、表面温度、入射速度以及表面粗糙等条件^[12,13]. 不同方法得到的 ACs 存在较大差异, 但在工程实践中通常采用经验取值. 因此, 需要深入研究气体-表面相互作用过程, 探索 ACs 随入射参数变化的机制, 并深化多参数入射条件下气体-表面相互作用机理的认识.

ACs 的获取方法通常有直接测量法、间接测量法和数值模拟三类. 分子束实验是常用的直接测量方法, 该方法通过固定入射气体分子的角度和能量, 收集反射分子的速度和角度分布来获得 ACs. 众多研究者采用分子束实验方法, 针对不同入射气体分子在各种材料和形态表面上的散射进行了研究^[14-19]. 结果表明, ACs 对表面材料和形态高度敏感, 不同研究者的测量结果差异显著. 即使是同一种入射气体和表面材料, 在不同势能值下的测量结果也有差距. 有研究者^[20] 通过分子束实验研究了氮气在玻璃等洁净表面材料的能量转移特性, 发现了逆向散射的现象. 此外, Minton 等^[21] 指出, 在气动力减速过程中, 气体与表面的碰撞可有效地将平动能转化为表面热能. 间接测量方法利用稀薄气体流动的宏观特性, 通过理论模型计算 ACs. 由于表面形态和温度波动等因素在大多数实验中未明确指定, 因此在稀薄条件下准确测量宏观特性具有很

大挑战. Tekasakul 等^[22] 采用悬浮转子法, 测量了 Kn 在 0.002—0.21 范围内氦、氩等气体对钢表面的 TMAC, 结果为 0.847—0.938. 随后, Jousten^[23] 通过悬浮转子法测量了氮气在不锈钢表面的 ACs, 发现 ACs 与温度具有弱相关性. 由于间接测量法仅能测量 TMAC 或 EAC, 因此无法适用于 CLL 等多参数气体-表面相互作用模型.

分子动力学 (MD) 模拟的兴起为气体-表面相互作用研究提供了全新视角, 常用的模拟方式主要有两类, 即微纳米平板流动和单个散射 (SS) 方法. 在微纳米平板流动模拟中, 气体分子入射表面的速度和角度具有较大随机性, 其与表面的动量和能量适应程度取决于气流状态. Arya 等^[24] 研究了微纳米平板模型中壁面滑移现象, 发现 ACs 强烈依赖于表面粗糙度和气体与表面之间的势阱深度. 此外, 一些研究者探索了 Kn 与 ACs 的关系^[25,26], 结果表明随着 Kn 增大, 气体分子与表面的适应程度不断降低. 并且在较低的系统温度下, ACs 对温度表现出更高的敏感性^[27]. 在微纳米通道气体流动的模拟中, 可观察到壁面附近存在温度跳跃和密度分层等现象. 然而, 由于气体分子过于密集, 难以捕捉表面散射细节. 此外, 该方法仅能获得等温低速条件下气体分子的 TMAC, 而 NMAC 和 EAC 无法通过此方法获取. SS 方法的入射气体分子状态分为两种. 第一种是通过采样获得满足特定温度的速度分布, 使入射分子具有热运动速度并叠加宏观速度特征, 从而捕捉表面散射特性并扩展 ACs 适用范围. Peddakotla 等^[28] 研究了氩与铂和石墨表面的相互作用, 并与 CLL 模型的结果进行了对比验证, 分析了不同入射参数对 ACs 的影响. Sipkens 和 Daun^[29] 则更关注原子势能与热适应系数的关系, 讨论了表面相变和粗糙度对气体分子能量适应的影响, 并探索了铁、铜、硅表面在宽温域下的热适应特性. 第二种是固定入射气体分子的角度和能量, 以获得不同入射状态下气体分子在表面的散射特性. 许多研究者^[30-32] 使用该方法研究了不同入射角度、速度等条件下气体分子在表面的散射特性. 然而表面温度和稀薄程度等因素对 ACs 的影响机制尚未建立普适性规律, 不同研究结论存在矛盾. 现有模拟主要针对光滑表面, 而实际表面的粗糙、吸附层动态变化以及化学反应 (如氧化催化) 等因素的影响仍需进一步探索.

目前, 尚未有文献完整给出上述数值模拟方式

的选择标准. 大多数研究基于气体稀薄程度进行选择, 但这种方式并不精确, 因为影响 ACs 的因素众多. 许多研究者^[33,34]发现, 无论是高空高马赫数下航天飞行器的表面^[35]还是微纳米管道中, 气体分子均会与表面发生吸附行为, 且吸附分子会显著影响入射分子的散射特性. 传统的 SS 方法忽略了气体分子之间的相互作用, 事实上气-气碰撞导致的能量传递会在某些条件下提高气体分子与表面的适应程度. 除了上述数值方法, 部分研究者尝试对气体-表面相互作用模型进行修改^[36], 并得到模型参数随入射能量、入射角度和气体类型的依赖关系. 此外, 一些研究者采用机器学习方法构建了基于数据的新气体-表面相互作用模型^[37,38], 或开发了基于物理机理的新模型^[39,40].

总的来说, 数值模拟与唯象模型结合依然是研究气体-表面相互作用的有效途径. 近期, Tao 和 Wang^[41]提出了一种新的连续散射方法 (CS). 通过不同入射参数下氩在石墨表面的散射, 对比研究了单个散射 (SS) 方法与 CS 方法的适用性. CS 方法可以看作是 SS 方法的一种扩展, 利用入射频率来维持系统的稀薄程度. 由于不同材料和入射条件下 ACs 差异显著, 且表面形态 (光滑或粗糙) 的影响不可忽略. 因此, 不同形态表面及多参数入射条件下 CS 与 SS 方法的差异有待验证. 本文针对现有方法忽略分子间碰撞与表面形态差异的缺陷, 通过 MD 模拟揭示多种参数 (表面温度、入射速度等) 对 ACs 的影响机制. 利用单原子惰性气体氩在金属铂表面散射的分子动力学模型, 对比了不同形态表面下 CS 和 SS 方法的模拟结果, 讨论了两种模拟方法的差异.

2 数值模拟

2.1 模拟细节

本文采用开源软件 LAMMPS 进行 MD 模拟, Ovito 用于模拟系统可视化. 模拟盒子尺寸设置为 $31.36 \text{ \AA} \times 31.36 \text{ \AA} \times 50.00 \text{ \AA}$, 如图 1 所示. 由于模拟能量传递通常需要使用恒温固体边界条件^[42], 因此本文采用基于朗之万方程的 Phantom 壁面模型^[43-47]. 该模型将壁面原子分为上中下 3 层, 其中壁面最下方为固定层, 维持壁面结构稳定并为上部原子提供刚性支撑; 中间为 Phantom 层, 受朗之万恒温器控制 (包含阻尼项、随机力项和弹簧力

项), 保持恒定温度; 最上方为真实原子层, 直接与气体分子相互作用并受势函数作用. 壁面原子采用 FCC(100) 晶格排布, 晶格常数为 3.92 \AA . 在 x 和 y 方向施加周期性边界条件以简化计算.

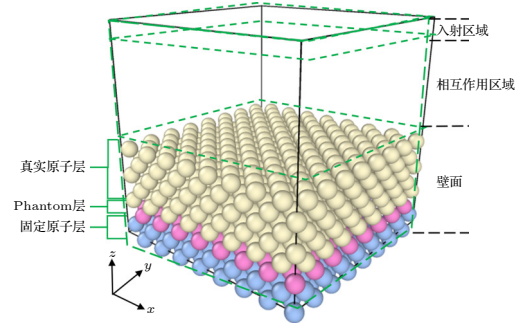


图 1 分子动力学模拟盒子示意图

Fig. 1. MD simulation box schematic.

模拟中, 铂原子间采用 EAM 势函数^[48]; 氩原子间使用 Lennard-Jones 势函数, 平衡距离为 $\sigma = 3.405 \text{ \AA}$; 势阱深度为 $\varepsilon = 1.01 \times 10^{-2} \text{ eV}$; 氩与铂原子间的相互作用同样使用 Lennard-Jones 势函数, 参数为 $\sigma = 2.94 \text{ \AA}$ 和 $\varepsilon = 6.82 \times 10^{-3} \text{ eV}$ ^[49]. 不同势函数的截断半径均为 10.00 \AA . 模拟系统采用 NVE 系综, 时间步长为 1 fs . 初始化时使用 Berendsen 恒温器平衡真实原子层中的铂原子, 1 ns 后撤去. 所有模拟案例都将入射角 θ 和方位角 φ 设为 45° , 如图 2 所示. 其中 θ 定义为气体分子速度与表面法线的夹角, φ 定义为分子速度在切平面上的投影与 x 轴的夹角. 除非另有说明, 默认表面温度为 300 K . 为便于对比不同入射条件的影响, 本文所述入射速度 V_g 均以 300 K 最概然速度 V_p 为基准进行无量纲化, 即 $V_g = nV_p$, 默认情况下 $n = 1$. 最概然速度公式如下所示:

$$V_p = \sqrt{\frac{2k_B T}{m}}, \quad (1)$$

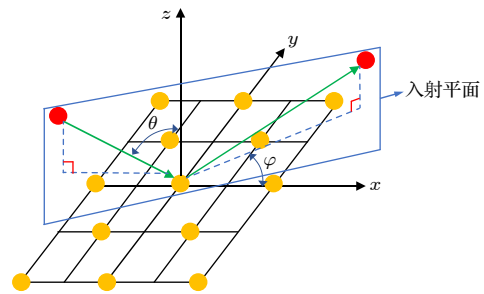


图 2 气体分子入射角度示意图

Fig. 2. Schematic diagram of the incident angle of gas molecules.

其中, k_B 为玻尔兹曼常数, T 为气体温度, m 为气体分子质量.

在 CS 和 SS 两种模拟方法中, 气体分子均在入射区域内随机生成, 该区域与壁面最上层原子的垂直距离略大于势函数截断距离, 入射区域与表面之间为相互作用区域. 气体分子与表面碰撞后存在三种可能轨迹: 直接反射、多次碰撞后反射, 或因法向动能充分耗散而长时间被表面势阱捕获. 为控制模拟时长, 每个样本的模拟时间被限制在 35 ps. 若气体分子在该时限内未离开相互作用区域, 则判定其被吸附; 反之, 则将气体分子进入相互作用区域时的速度记为入射速度, 离开时的速度作为反射速度, 用于计算 ACs.

为研究表面形态对分子碰撞及 ACs 的影响, 本文构建了 5 种类型的表面: 光滑表面 (Smooth)、一维正弦粗糙表面 (1Dsin)、二维正弦粗糙表面 (2Dsin)、金字塔形粗糙表面 (Pyramid) 以及随机粗糙表面 (Random), 如图 3 所示. 各粗糙表面的最大高度统一为 5.88 Å.

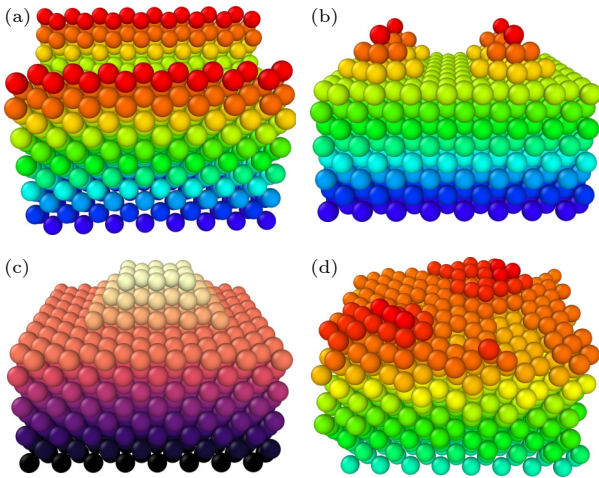


图 3 不同粗糙形态表面示意图 (a) 一维正弦粗糙表面; (b) 二维正弦粗糙表面; (c) 金字塔形粗糙表面; (d) 随机粗糙表面

Fig. 3. Schematic diagrams of surfaces with different roughness morphologies: (a) 1D sinusoidal rough surface; (b) 2D sinusoidal rough surface; (c) pyramidal rough surface; (d) random rough surface.

一维正弦粗糙结构通过下式构建:

$$Z = A |\sin(\omega x)| + k, \quad (2)$$

式中, A 为振幅, 控制曲面起伏的高度; ω 控制正弦的周期; k 为偏距, 控制曲面的上下位置. 本文中 $A = 20.0 \text{ \AA}$, $\omega = 2\pi/35 \text{ rad} \cdot \text{\AA}^{-1}$, $k = 1.0 \text{ \AA}$.

二维正弦粗糙结构通过下式构建:

$$Z = A |\sin(\omega x) \times \sin(\omega y)| + k, \quad (3)$$

式中, $A = 19.6 \text{ \AA}$, $\omega = 2\pi/31.5 \text{ rad} \cdot \text{\AA}^{-1}$, $k = 2.2 \text{ \AA}$.

金字塔形粗糙结构构建参考了 Pham 等^[50] 的论文, 其上底长宽为 7.84 Å、下底长宽为 15.68 Å. 本文采用原子沉积的方式在光滑表面上构造了具有相同晶面取向和晶格常数的随机粗糙结构. 沉积原子初始位置在入射区域随机生成, 初始速度按 300 K Maxwell-Boltzmann (MB) 分布设定. 沉积过程中, 采用简单的速度缩放方法保持表面温度恒定为 30 K, 以抑制表面原子振动控制粗糙形态. 沉积结束后整个模拟系统采用 300 K 的环境温度并以 1 fs 的时间步长进行退火处理, 以消除沉积应力并使表面弛豫至平衡状态. 在涉及随机粗糙表面的所有模拟案例中 (包括每次气-固碰撞) 均使用相同的表面形态, 以确保模拟条件的一致性和结果的可重复性.

2.2 计算方法

ACs 是量化气体分子与固体表面碰撞后动量和能量适应程度的无量纲参数. 针对气体-表面相互作用, 定义 TMAC^[51], NMAC^[51] 以及 EAC^[52] 公式如下:

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

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

$$\alpha = \frac{E_i - E_r}{E_i - E_w}, \quad (6)$$

其中, τ , p , E 分别表示气体分子的平均切向动量、法向动量与总能量; 下标 i , r , w 分别对应入射前状态、反射后状态以及与表面完全适应状态. 物理上, 气体分子与表面完全适应时, 分子的动量和能量与表面一致. 因此对与表面完全适应后的气体分子速度分布函数进行积分, 可得 $\tau_w = 0$, $p_w = (m_{Ar} \pi k_B T_w / 2)^{1/2}$ (m_{Ar} 为氩原子质量、 k_B 为玻尔兹曼常数、 T_w 为表面温度), $E_w = 2k_B T_w$ ^[53]. 需要注意的是, 当入射气体分子法向动量 p_i 与 p_w 接近时, (5) 式的分母趋近于零, 会导致数值不稳定^[36], EAC 也存在类似问题^[29]. 此外, 由于吸附分子无法参与反射过程 (其理论 ACs 均为 1, 与实际散射行为不符), 因此应对上述计算得到的 ACs 进行吸

附修正, 修正公式如下所示:

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

式中, AC 泛指 TMAC, NMAC 和 EAC, ξ 为吸附气体分子数量占模拟样本总数的比例.

因开放系统中难以确定特征长度 (L) 和努森数 (Kn), 本文采用等效平均自由程 (MFP) 间接控制模拟系统的稀薄程度 [41]:

$$MFP = \frac{A_{\text{sur}} \times \Delta t \times \Delta n_s \times V_g}{4\pi d^2 \sqrt{\pi}}, \quad (8)$$

式中, Δt 为时间步长, A_{sur} 为表面积, d 为气体分子直径, V_g 为入射分子速度, Δn_s 为入射频率. 默认情况下, MFP 设为 5.0 nm, 后续模拟案例中讨论了不同 MFP 对 ACs 的影响. 为了验证样本量对 ACs 收敛性的影响, 图 4 展示了光滑表面下 CS 与 SS 方法随样本量增加得到的 ACs. 可以看出, 两种方法得到的 ACs 分别在样本量大于 6000 和 8000 时收敛, 统计误差小于 1%. 为确保统计精度, 所有模拟案例均采用了 10000 个入射气体分子.

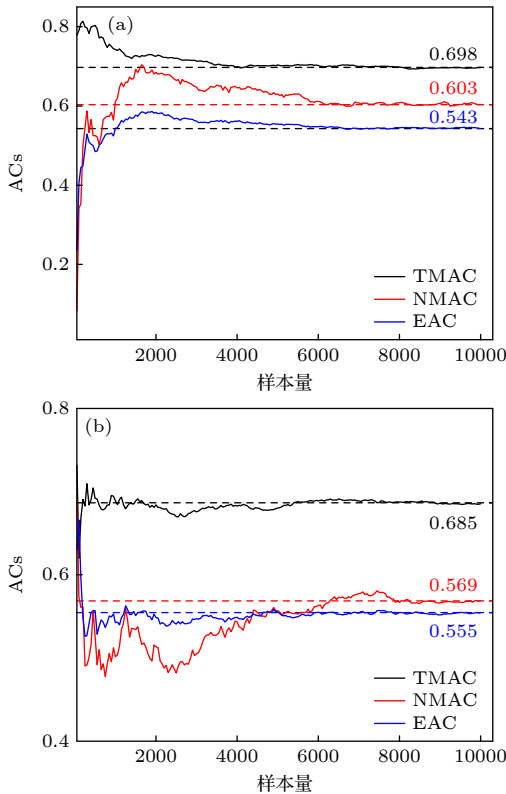


图 4 光滑表面下 CS 与 SS 方法 ACs 随样本量的变化 (a) SS 方法; (b) CS 方法
Fig. 4. Variation of ACs with sample size for CS and SS methods on a smooth surface: (a) SS method; (b) CS method.

3 结果和讨论

3.1 ACs 随稀薄程度的变化

为验证模拟方法的正确性, 本文复现了 Kammara 等 [28] 关于氩-铂相互作用的 MD 模拟. 他们采用 MB 分布描述入射气体分子在切向的速度分布, 并使用修正的 MB 分布描述法向速度, 以比较 CLL 模型与 MD 模拟的反射气体分子分布特征, 结果如图 5 所示. 可以看出, 在宏观切向速度 100—500 m/s 的范围内, 本文 SS 方法得到 TMAC 与 Kammara 等 [28] 的结果最大偏差小于 6%, CS 方法作为 SS 方法的扩展因此也是可行的.

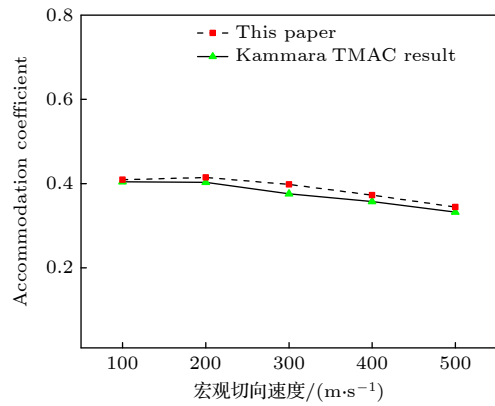


图 5 本文和 Kammara 等 [28] 得到的 TMAC 结果对比
Fig. 5. Comparison of TMAC results obtained in this work and by Kammara [28].

标准条件 (温度 237 K, 压强 1.013×10^5 Pa) 下, 空气分子的 MFP 约为 6.9×10^{-8} m. 当 MFP 趋近于 0 时, 气体分子入射频率趋于无穷大. 相反, MFP 趋近于无穷大时气体分子入射间隔时间趋于无穷. 受限于物理特性和计算资源, 模拟这两种极限条件下的气体-表面相互作用成本过高且不切实际. 因此本文选取了 2.0—60.0 nm 范围的 MFP, 以确保模拟结果的准确与计算效率的平衡.

Prabha 和 Sathian [26] 的研究表明, 在微纳米平板流动中, 气-气碰撞能提高气体分子与表面的动量和能量适应, 使 ACs 随 Kn 减小而增大, 并最终趋近于 1. 然而, 这一趋势在 CS 方法中并不成立. 原因在于, Prabha 模型中通过沿流动方向施加恒定加速度驱动流体, 缩短了分子在表面相互作用区的滞留时间, 从而避免了高密度气体分子对后入射分子的阻碍作用. 而在 CS 方法中, 由于缺乏恒定加速度, 相互作用区内高密度气体分子会阻碍后

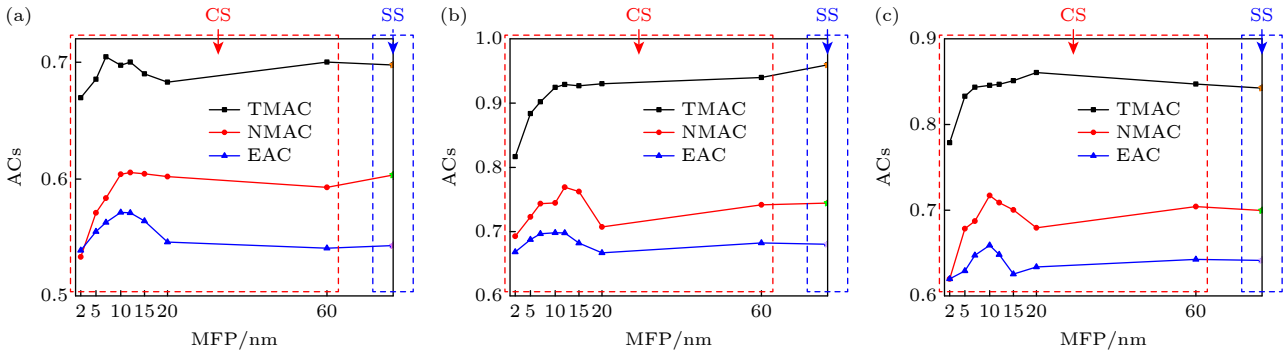


图 6 不同形态表面下 CS 方法随 MFP 变化得到的 ACs 与 SS 方法的 ACs 对比 (a) 光滑表面; (b) 二维正弦粗糙表面; (c) 随机粗糙表面

Fig. 6. Comparison of ACs obtained by the CS method with varying MFP and by the SS method on surfaces with different morphologies: (a) Smooth surface; (b) 2D sinusoidal rough surface; (c) random rough surface.

入射分子与表面的动量和能量适应. 因此, 在高入射频率 ($MFP = 2.0 \text{ nm}$) 下, 先入射分子会因频繁气-气碰撞而增强与表面的能量适应, 导致难以逃离表面势阱, 进而提高相互作用区气体密度, 阻碍后入射分子适应, 最终使 ACs 较低 (如图 6 所示). 为验证气体密度的阻碍作用, 本文进一步计算了 MFP 为 0.2, 0.5 和 1.0 nm 时光滑表面的 ACs, 结果如表 1 所列, 其值随 MFP 减小呈单调递减趋势.

表 1 光滑表面下 MFP 为 2.0, 1.0, 0.5, 0.2 nm 时得到的适应系数

Table 1. Accommodation coefficients obtained on a smooth surface at MFP is 2.0, 1.0, 0.5, and 0.2 nm.

MFP/nm	TMAC	NMAC	EAC
2.0	0.669	0.533	0.538
1.0	0.637	0.446	0.498
0.5	0.612	0.408	0.425
0.2	0.491	0.269	0.278

相反, 中等入射频率 ($2.0 \text{ nm} < MFP < 10.0 \text{ nm}$) 下, 随着相互作用区内分子数量减少, 气体密度的阻碍作用减弱. 因此图 6 中不同形态表面的 ACs 均呈上升趋势.

当入射频率进一步降低 ($MFP > 10.0 \text{ nm}$) 时, 气-气碰撞减少, 例如在光滑表面上, 其占总碰撞次数的比例从 $MFP = 10.0 \text{ nm}$ 时的 16.39% 降至 $MFP = 20.0 \text{ nm}$ 时的 5.57%. 因此, 气体密度的阻碍作用变得可忽略, 促进作用也随之减弱. 由于光滑表面缺乏粗糙结构, 切向动量适应主要依赖气-气碰撞增强, 因此 TMAC 降低. 而对于粗糙表面, 气体分子在粗糙结构间的多次横向碰撞延长了相互作用时间 (定义为气体分子从进入到离开相互作用

区的时间差), 增强了切向动量适应. 从而抵消气-气碰撞减少导致的 TMAC 降低, 并使 TMAC 略微增加 (当 MFP 从 10.0 nm 增至 20.0 nm 时, 光滑表面反射分子的平均切向动量损失率从 66.17% 降至 65.19%, 而 2D 正弦粗糙表面的损失率从 90.66% 升至 91.54%). 如图 7 所示, 随着 MFP 从 10.0 nm 增至 20.0 nm, 光滑表面的平均气体-表面相互作用时间减少 1.49 ps, 而粗糙表面基本保持不变.

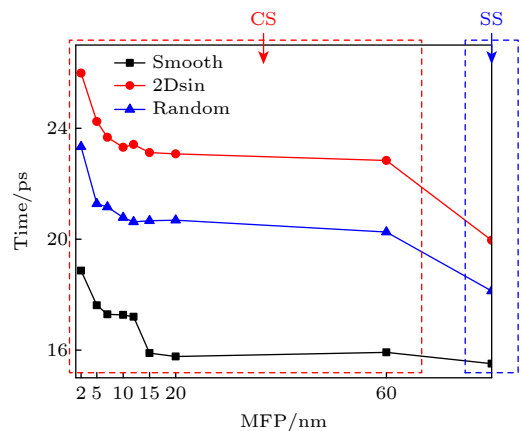


图 7 不同形态表面和 MFP 下的平均气体-表面相互作用时间

Fig. 7. Average gas-surface interaction time on surfaces with different morphologies at varying MFP.

同时, 气-气碰撞减少会使入射气体分子的初始法向动能损失降低, 从而导致分子能更深入表面势场, 进而增强光滑表面的法向动量适应. 对于粗糙表面, 气-气碰撞减少会使入射分子轨迹缺乏多样性. 由于粗糙结构的存在, 分子沿单一轨迹入射时无法深入表面势场, 导致法向动量适应程度降低. 例如, 当 MFP 从 10.0 nm 增至 20.0 nm 时, 气体分子与光滑表面顶层原子的平均最小距离减小

0.06 Å, 而 2D 正弦粗糙表面增加 0.37 Å. EAC 反映气体分子总能量对表面的适应程度, 主要依赖反射分子平均速度变化对其平动能的影响. 因此, 随着入射频率进一步降低, 光滑表面的 NMAC 略微降低, 粗糙表面的 NMAC 显著降低, 所有表面的 EAC 均呈下降趋势. 光滑表面和粗糙表面上动量分量变化趋势的差异, 源于表面形态对切向和法向动量适应的影响不同. 张冉等^[54]的研究也支持这一观点.

为量化气体密度对适应程度的影响, 进一步对比了 SS 与 CS 方法的模拟结果. 在相同形态表面下, 将 CS 方法在不同 MFP 下得到的 ACs 减去 SS 方法的 ACs, 得到正负最大差值 (如表 2 所列). 然后, 将其除以对应表面下 SS 方法的 ACs, 得到偏差范围介于 -14.88%—5.21% 之间. 正偏差表明气体密度促进适应, 负偏差则表明其阻碍适应.

表 2 不同形态表面和 MFP 下 CS 与 SS 方法 ACs 的正负最大差值

Table 2. Maximum positive and negative differences in ACs between CS and SS methods on surfaces with different morphologies at varying MFP.

表面形态	正负最大差值	TMAC	NMAC	EAC
Smooth	正差值	0.007	0.002	0.028
	负差值	-0.028	-0.070	-0.004
2Dsin	正差值	0.020	0.024	0.018
	负差值	-0.143	-0.052	-0.013
Random	正差值	0.018	0.017	0.017
	负差值	-0.064	-0.080	-0.022

随着 MFP 增加, 本文获得的 ACs 与 Tao 和 Wang^[41]报道的单调变化趋势存在差异 (本文 TMAC 和 EAC 计算方式与他们相同, NMAC 不同). 这些差异源于气体分子入射速度和表面材料等参数的共同作用. 低 MFP 和低速入射条件下, 频繁的气-气碰撞会增加吸附概率和相互作用区气体密度 (如图 8 所示). 过高的气体密度会使阻碍作用显著. 相比之下, 高速入射条件下, 相互作用区内气体密度较低, 密度的阻碍作用可忽略, 但气-气碰撞与气-固碰撞在能量传递方式上的差异 (如 3.3 节所述), 会抑制能量适应. Tao 和 Wang^[41]研究中采用高速入射和光滑碳 (0001) 表面, 因此随着 MFP 增加, TMAC 下降而 EAC 上升.

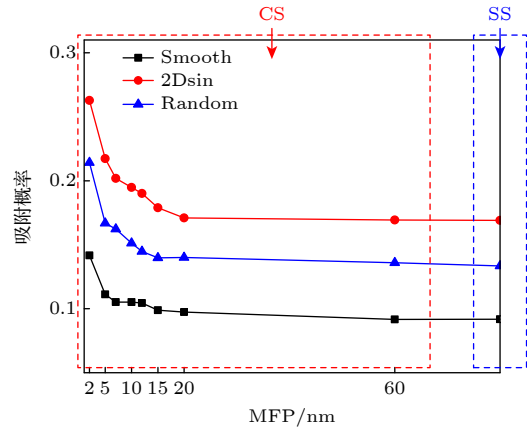


图 8 不同形态表面和 MFP 下气体分子的吸附概率
Fig. 8. Sticking probability of gas molecules on surfaces with different morphologies at varying MFP.

此外, 铂原子质量 (195 u) 远重于碳 (12 u), 而氩原子 (40 u) 质量介于两者之间. 质量差异使氩原子与铂表面碰撞时易反弹 (法向动量反转, 切向动量损失小). 相反, 与碳表面碰撞时易发生多次碰撞从而增强适应. 因此, 在相同入射条件下, 碳表面的动量和能量适应程度高于铂表面. 该结果揭示了气体密度和表面材料对适应过程的影响, 为 Tao 和 Wang^[41]的研究提供了补充.

3.2 ACs 随表面温度的变化

图 9 展示了不同形态表面下 CS 和 SS 方法获得的 ACs 随表面温度升高 (300—900 K) 的变化趋势. 结果表明, 不同形态表面下两种方法的 TMAC 和 EAC 均呈下降趋势, 除光滑表面的 NMAC 保持稳定外, 粗糙表面的 NMAC 均呈下降趋势. ACs 各分量的趋势差异表明, 温度效应和表面形态之间存在复杂的相互作用机制.

表面温度升高对 ACs 的影响可归纳为两个核心机制的协同作用: 1) 表面原子热振动; 2) 表面与气体分子间的能量传递效应.

随着表面温度升高, 不同形态表面下的 TMAC 和 EAC 均降低, 主要源于表面原子热振动增强和能量传递效应. 表面温度从 300 K 升至 400 K 时, 铂原子均方位移增加约 33%, 显著增强原子热振动. 同时, 当表面温度高于气体分子等效温度 (由速度条件确定, 如 (1) 式所示) 时, 高温表面会向气体分子传递能量, 降低其在表面势阱中的吸附概率, 从而缩短相互作用时间, 进而抑制适应过程. 如图 10 所示, 光滑表面下 SS 方法的吸附概率从

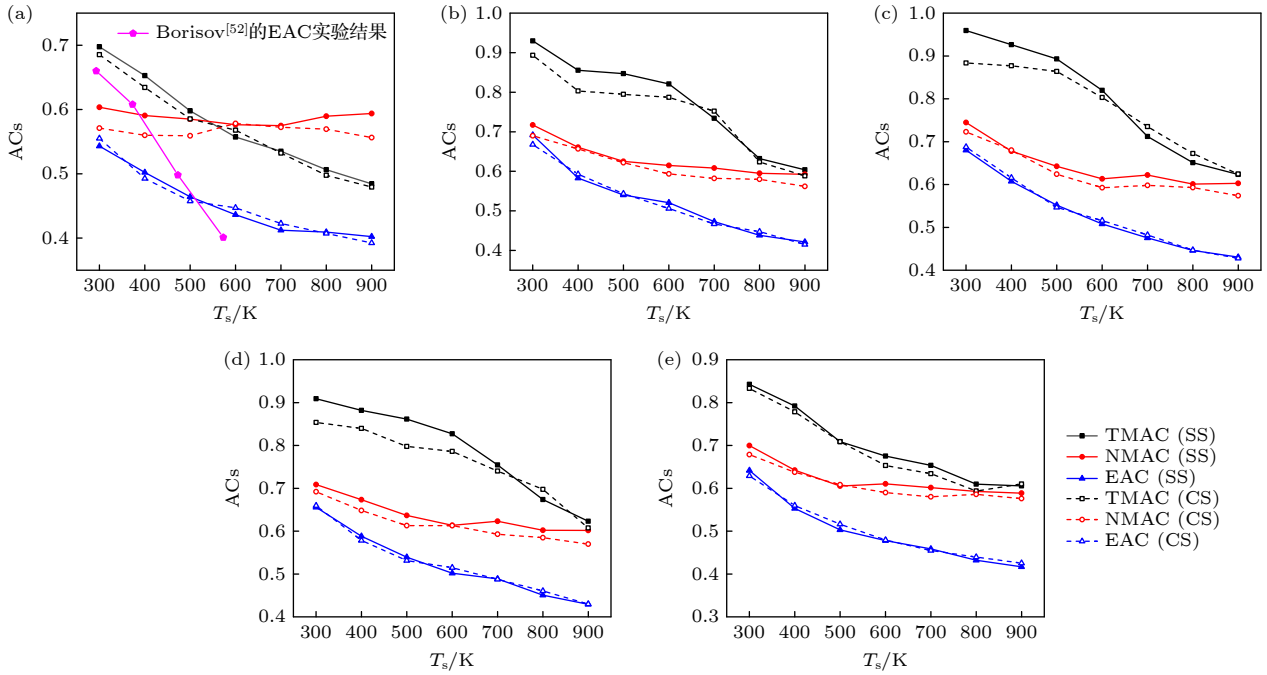


图 9 不同形态表面和表面温度下 CS 与 SS 方法得到的 ACs 对比图 (a) 光滑表面; (b) 一维正弦粗糙表面; (c) 二维正弦粗糙表面; (d) 金字塔形粗糙表面; (e) 随机粗糙表面

Fig. 9. Comparison of ACs obtained by CS and SS methods on surfaces with different morphologies at varying surface temperatures: (a) Smooth surface; (b) 1D sinusoidal rough surface; (c) 2D sinusoidal rough surface; (d) pyramidal rough surface; (e) random rough surface.

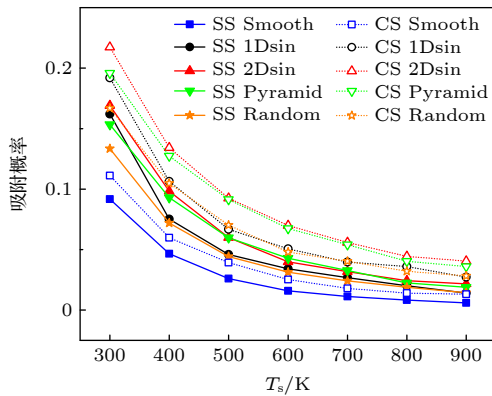


图 10 不同形态表面下 CS 与 SS 方法吸附概率随表面温度的变化

Fig. 10. Variation of sticking probabilities for CS and SS methods with surface temperature on surfaces with different morphologies.

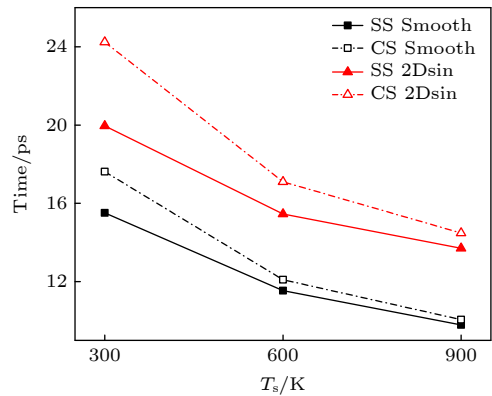


图 11 光滑及 2D 正弦粗糙表面下 CS 与 SS 方法平均气体-表面相互作用时间随表面温度的变化

Fig. 11. Variation of average gas-surface interaction time with surface temperature for CS and SS methods on smooth and 2D sinusoidal rough surfaces.

300 K 时的 9.18% 降至 900 K 时的 0.59%，降幅达 93.57%。TMAC 依赖气-固碰撞次数和相互作用时间，因此随温度升高而下降。EAC 下降源于两方面因素：一是相互作用时间缩短限制了能量适应（如图 11 所示，光滑表面下 SS 方法的平均相互作用时间从 300 K 时的 15.51 ps 降至 900 K 时的 9.79 ps）；二是表面向气体分子传递能量，使其保留更多初始动能。这一趋势在光滑和粗糙表面均存在，表明气

体-表面相互作用的主导性超越了表面形态的差异。图 9(a) 中粉线为 Borisov 等^[52]通过实验测得的氙-铂体系 EAC 结果，该实验采用改进的非稳态低压热线法，直接测量了不同表面温度下的 EAC 值。虽因实验原理限制，不同温度点对应不同的氙原子入射速度，但其结果可视为一种参考。可以看出，本文计算结果与该实验数据在整体趋势上具有良好一致性，均表现出表面温度升高时 EAC 逐渐减

小的规律,进一步验证了表面温度升高抑制能量适应结论的可靠性.

此外,高温下表面原子热振动平滑了粗糙表面的粗糙结构(采用时均表面面积比 S_{dr} 来衡量表面的粗糙度,其值越大表面越粗糙,计算公式为 $S_{dr} = A_{real}/A_{proj}$,其中 A_{real} 为时均实际表面面积, A_{proj} 为投影面积.计算表明,对于 2D 正弦粗糙表面, S_{dr} 从 300 K 时的 1.21 降至 900 K 时的 1.07),削弱了粗糙结构对适应过程的促进作用,导致其 TMAC 和 EAC 降幅大于光滑表面.如表 3 所列,当表面温度从 300 K 升至 900 K 时,光滑表面(SS 方法)的 TMAC 降低了 0.21, EAC 降低了 0.14,而粗糙表面的 TMAC 降幅均超过 0.22, EAC 降幅均超过 0.20.

表 3 不同形态表面下 SS 方法在 300 K 和 900 K 表面温度得到的 ACs 的差值
Table 3. Differences in ACs obtained by the SS method on surfaces with different morphologies at surface temperatures of 300 K and 900 K.

表面形态	TMAC	NMAC	EAC
Smooth	0.213	0.009	0.140
1Dsin	0.325	0.124	0.270
2Dsin	0.335	0.141	0.249
Pyramid	0.286	0.107	0.226
Random	0.236	0.111	0.224

与 TMAC 和 EAC 不同, NMAC 的变化趋势在不同形态表面存在显著差异.这反映了光滑和粗糙表面原子热振动对法向动量适应的影响不同.对于光滑表面,原子热振动引起的纳米级起伏可等效为表面粗糙度的增加,从而增强法向动量适应.相反,粗糙表面主要受原子热振动的抑制作用主导.热振动平滑了粗糙表面的粗糙结构(如上一段所述 S_{dr} 下降),削弱了其诱导多次气-固碰撞的能力,从而抑制法向动量适应.在光滑表面,原子热振动的促进效应与能量传递效应相互抵消,使其 NMAC 未呈现出明显下降趋势.而在粗糙表面,原子热振动的抑制效应和能量传递效应叠加,共同导致粗糙表面的 NMAC 下降.

值得注意的是,随着表面温度升高,CS 与 SS 方法获得的 EAC 值高度接近.这源于高温表面向气体分子传递能量主导了适应过程.同时吸附概率降低减少了相互作用区内分子数量,使剩余的气-气碰撞对 EAC 的影响较弱.图 12 展示了光滑表

面下 CS 方法入射分子的典型碰撞轨迹,直观地呈现了气-气碰撞的影响.这一现象在光滑和粗糙表面均可观察到,因为 EAC 对碰撞轨迹细节不敏感,其变化主要由气体-表面相互作用主导的能量适应过程决定.

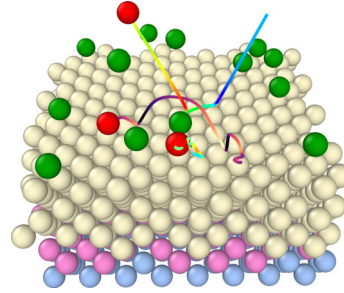


图 12 CS 方法入射气体分子的典型碰撞轨迹图
Fig. 12. Typical collision trajectories of incident gas molecules under the CS method.

3.3 ACs 随入射速度的变化

3.2 节中探讨了表面温度对 ACs 的影响,本节则固定其他变量,聚焦气体分子入射速度的影响.入射速度直接决定气体分子初始动能,影响其与表面的动量和能量适应.

基于 CS 和 SS 方法,本节计算了不同形态表面下,入射速度 V_g 在 2—4 倍 V_p 范围内的 ACs.如图 13 所示,两种方法得到的 TMAC, NMAC 和 EAC 均随入射速度增加而降低.高速入射条件下,ACs 的变化主要由两种机制共同作用:一方面,较高的入射速度使气体分子能够更深入表面势场,从而增强能量适应.图 14 为光滑表面 yoz 平面势能分布示意图,用于说明不同势能区域的相对分布关系.图中不同颜色仅用于区分势能区域,并不表示定量势能值.根据气体-表面相互作用可将其划分为四个区: Zone 1 (无相互作用区)、Zone 2 (吸引区)、Zone 3 (排斥区)、Zone 4 (壁面原子势能区).光滑表面下 SS 方法的计算结果表明,当 V_g 从 2 倍增至 4 倍 V_p 时,气体分子在 Zone 3 与表面顶层原子的平均最小距离由 1.85 Å 减小至 1.62 Å.另一方面,相互作用时间缩短限制了气体分子动量和能量的充分适应,是 ACs 下降的主要因素.图 15 表明,不同形态表面下 CS 和 SS 方法的平均气体-表面相互作用时间均随入射速度升高而降低(最小降幅为 4.44 ps).CS 和 SS 方法 ACs 趋势的一致性表明,在高速入射条件下,气-气碰撞对 ACs 整体变化趋势的影响有限.

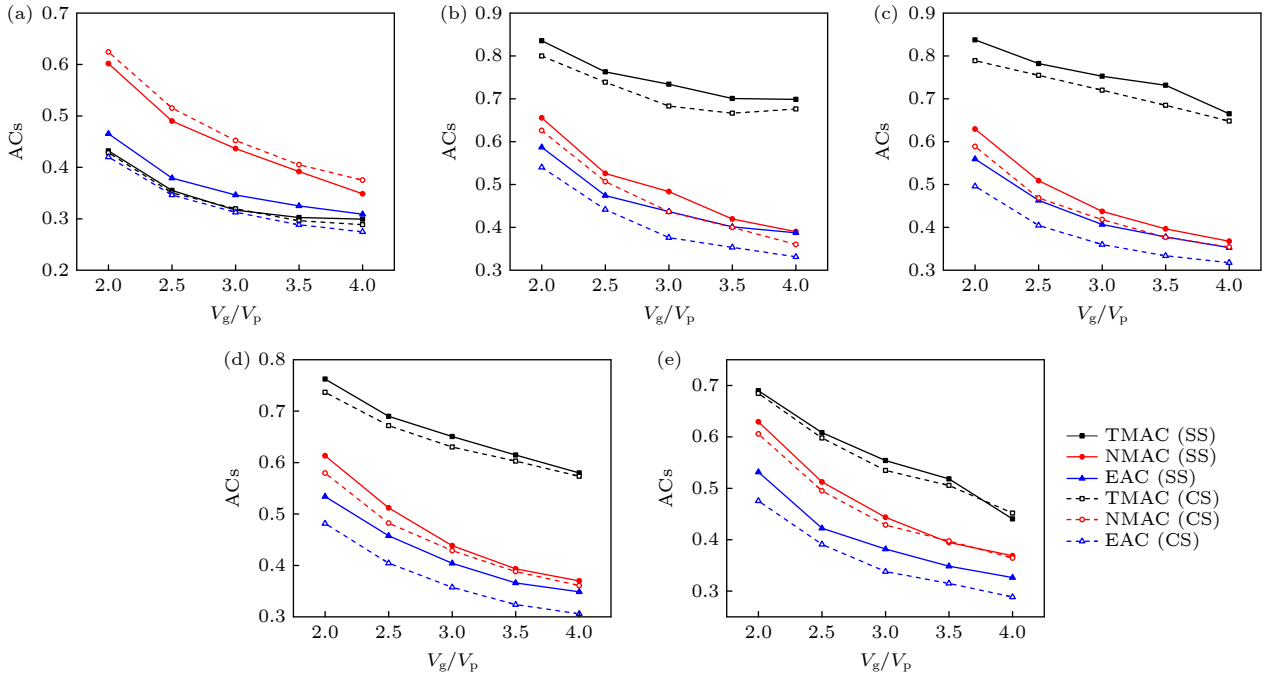


图 13 不同形态表面和入射速度下 CS 与 SS 方法得到的 ACs 对比图 (a) 光滑表面; (b) 一维正弦粗糙表面; (c) 二维正弦粗糙表面; (d) 金字塔形粗糙表面; (e) 随机粗糙表面

Fig. 13. Comparison of ACs obtained by CS and SS methods on surfaces with different morphologies at varying incident velocities: (a) Smooth surface; (b) 1D sinusoidal rough surface; (c) 2D sinusoidal rough surface; (d) pyramidal rough surface; (e) random rough surface.

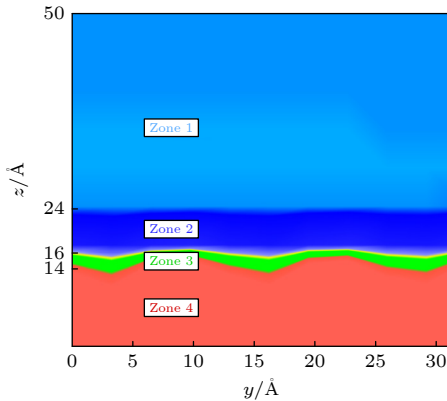


图 14 光滑表面 $yozy$ 平面势能分布示意图

Fig. 14. Schematic diagram of potential energy distribution in the $yozy$ plane on a smooth surface.

尽管趋势一致, 但相同入射速度下, 两种方法得到的 ACs 的具体值存在差异. 这反映了高速入射条件下, 气-气碰撞在不同形态表面具有促进和抑制适应的双重作用. 促进作用源于其引入的额外散射机制, 增加了气-固碰撞次数, 从而促进适应. 另一方面, 抑制作用则源于气-气碰撞与气-固碰撞的能量传递方式存在差异. 气-固碰撞中, 能量通过碰撞转化为晶格振动并被控温层耗散; 而气-气碰撞将能量在气体分子间重分布, 但总量守恒无法耗

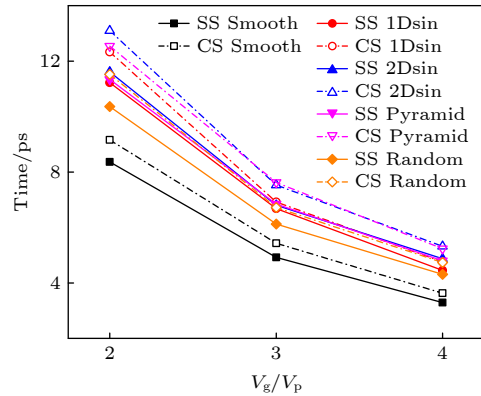


图 15 不同形态表面和入射速度下 CS 与 SS 方法的平均气体-表面相互作用时间

Fig. 15. Average gas-surface interaction time for CS and SS methods on surfaces with different morphologies at varying incident velocities.

散, 需通过后续气-固碰撞耗散至壁面. 这使得气-固碰撞次数更多, 单次气-固碰撞的能量传递效率低于直接气固碰撞. 高速入射条件下, 相互作用时间缩短导致了气-气碰撞与直接气-固碰撞对有限时间的竞争. 本文通过在光滑表面 Zone 2 与 Zone 3 之间设置虚拟平面, 定义气体分子从进入到离开平面为一次气-固碰撞, 统计了两种方法的总气-固碰撞次数及平均单次碰撞能量损失值, 如图 16 所示.

结果表明, 在 V_g 为 $2V_p$ — $4V_p$ 的范围内, CS 方法下总气-固碰撞次数均高于 SS 方法, 且 CS 方法的平均单次碰撞能量损失值低于 SS 方法。

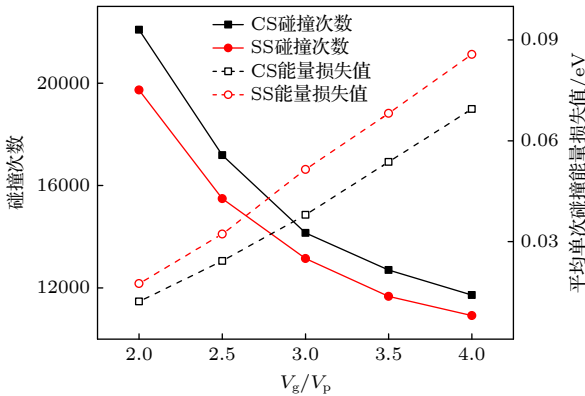


图 16 不同入射速度下光滑表面 CS 与 SS 方法的总气-固碰撞次数和平均单次碰撞能量损失值

Fig. 16. Total gas-solid collision counts and average energy loss per collision for CS and SS methods on a smooth surface at varying incident velocities.

气-气碰撞的双重作用导致了不同形态表面下 TMAC 和 NMAC 的差异. 由于切向动量适应依赖于气体分子与表面的横向碰撞, 而光滑表面缺乏粗糙结构, 无法提供此类碰撞, 因此高速入射条件下气-气碰撞对切向动量适应的促进作用较弱. 同时也因气体分子与光滑表面的切向动量适应程度本身较低而难以体现抑制作用, 导致光滑表面下 CS 与 SS 方法的 TMAC 值相近. 相比之下, 气-气碰撞通过增加气-固碰撞次数, 从而增强了法向动量适应. 尽管存在抑制作用, 但增加的碰撞次数足以抵消损失, 使 CS 方法的 NMAC 高于 SS 方法. 与光滑表面相比, 粗糙表面本身能提高气-固碰撞次数. 因此, 气-气碰撞的抑制作用占主导地位, 因为其间接耗散能量的方式在相互作用时间缩短的高速入射条件下, 降低了整体能量传递效率, 导致粗糙表面 CS 方法的 TMAC 和 NMAC 均低于 SS 方法.

为量化不同形态表面下 SS 与 CS 方法 ACs 的差异, 计算了 V_g 在 $2V_p$ — $4V_p$ 范围内两者 ACs 的相对偏差平均值 (相对偏差定义为两者 ACs 差值的绝对值除以 SS 方法的 ACs), 如图 17 所示. 结果表明, 不同形态表面下两种方法的 EAC 均差异显著, 其中 2D 正弦粗糙表面的 EAC 相对偏差平均值最大, 达 11.43%. 说明高速入射条件下直接气-固碰撞具有较高的能量传递效率.

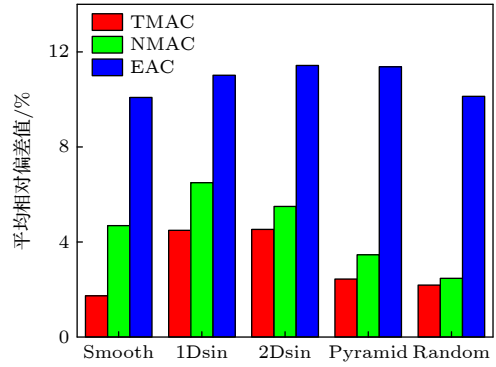


图 17 不同形态表面和入射速度下 CS 与 SS 方法的 ACs 的相对偏差平均值

Fig. 17. Average relative deviations of ACs between CS and SS methods on surfaces with different morphologies at varying incident velocities.

4 结论

本文通过分子动力学模拟, 对比研究了 CS 和 SS 方法下气体分子在不同形态表面的散射行为. 系统分析了表面温度和气体分子入射速度等关键参数对 ACs 的影响, 并深入探讨了气-气碰撞与气-固碰撞在动量与能量适应过程中的作用机理与差异. 结果表明以下几点.

1) 气体密度对气体分子与表面的动量和能量适应, 存在促进与阻碍的双重作用: 当 MFP 较小时, 相互作用区内过高的气体密度会阻碍后入射分子适应, 导致 ACs 较低; MFP 适中时, 气-气碰撞通过增加气-固碰撞次数, 从而促进适应. 在 2.0—60.0 nm 的 MFP 范围内, CS 与 SS 方法 ACs 的偏差范围为 -14.88%—5.21%, 印证了上述气体密度的双重效应. 此外, 当 MFP 较大时, 不同形态表面对切向和法向动量适应的影响不同.

2) 表面温度升高与入射速度增加均会降低 ACs, 主要原因是相互作用时间缩短限制了气体与表面的动量和能量适应. 温度升高对不同形态表面的 NMAC 影响不同, 原因是表面原子热振动使光滑表面产生纳米级起伏增强适应, 而使粗糙表面的粗糙结构平滑化抑制适应. 高速入射条件下, 气-气碰撞存在促进和抑制适应过程的双重作用. 这种双重作用受表面形态调控, 在光滑表面促进 NMAC, 在粗糙表面抑制 TMAC 和 NMAC, 在不同形态表面均抑制 EAC.

与文献结果对比表明, 不同表面材料下得到的 ACs 随入射参数的变化趋势存在差异. 针对特

定入射参数和表面材料, 建立综合 ACs 模型, 有助于 DSMC 模拟获取宏观气动特性, 以提升工程应用精度, 这是下一步努力的方向. 未来可扩展至化学反应或多组分气体体系.

参考文献

- [1] Chen Y Y, Chen D X, Liang S Z, Dai Y G, Bai X, Song B, Zhang D Y, Chen H W, Feng L 2022 *Adv. Intell. Syst.* **4** 2100116
- [2] Zang H F, Zhang Z Y, Huang Z T, Lu Y H, Wang P 2024 *Sci. Adv.* **10** eadk2265
- [3] Song B W, Wang C W, Fan S Y, Zhang L R, Zhang C C, Xiong W, Hu Y L, Chu J R, Wu D, Li J W 2024 *Adv. Funct. Mater.* **34** 2305245
- [4] Li B, Li H J, Yao X Y, Zhu X F, Liu N K 2022 *Appl. Surf. Sci.* **584** 152617
- [5] Maxwell J C 1879 *Philos. Trans. R. Soc. Lond.* **170** 231
- [6] Rooholghdos S A, Roohi E 2014 *Comput. Math. Appl.* **67** 2029
- [7] Burnett D 1935 *Proc. Lond. Math. Soc.* **s2-39** 385
- [8] Shavaliyev M 1993 *J. Appl. Math. Mech.* **57** 573
- [9] Lord R G 1995 *Phys. Fluids* **7** 1159
- [10] Cercignani C, Lampis M 1971 *Transp. Theory Stat. Phys.* **1** 101
- [11] Liang T F, Li Q, Ye W J 2018 *J. Comput. Phys.* **352** 105
- [12] Yamamoto K 2001 *Rarefied Gas Dynamics: 22nd International Symposium* Sydney, Australia, July 9–14, 2000 p339
- [13] Park J H, Baek S W 2004 *Int. J. Heat Mass Transf.* **47** 1313
- [14] Liang Z, Koblinski P 2014 *Int. J. Heat Mass Transf.* **78** 161
- [15] Yamaguchi H, Matsuda Y, Niimi T 2017 *Phys. Rev. E* **96** 013116
- [16] Yousefi-Nasab S, Safdari J, Karimi-Sabet J, Mallah hasan M 2021 *Vacuum* **183** 109864
- [17] Agrawal A, Prabhu S V 2008 *J. Vac. Sci. Technol. A* **26** 634
- [18] Mohammad Nejad S, Nedea S, Frijns A, Smeulders D 2020 *Micromachines* **11** 319
- [19] Rappe A K, Casewit C J, Colwell K S, Goddard W A I, Skiff W M 1992 *J. Am. Chem. Soc.* **114** 10024
- [20] Rettner C T 1998 *IEEE Trans. Magn.* **34** 2387
- [21] Minton T K, Tagawa M, Nathanson G M 2004 *J. Spacecr. Rockets* **41** 389
- [22] Tekasakul P, Bentz J A, Tompson R V, Loyalka S K 1996 *J. Vac. Sci. Technol. A* **14** 2946
- [23] Jousten K 2002 *J. Vac. Sci. Technol. A* **21** 318
- [24] Arya G, Hsueh-Chia C, Maginn E J 2003 *Mol. Simul.* **29** 697
- [25] Yamamoto K, Takeuchi H, Hyakutake T 2006 *Phys. Fluids* **18** 046103
- [26] Prabha S K, Sathian S P 2012 *Phys. Rev. E* **85** 041201
- [27] Cao B Y, Chen M, Guo Z Y 2005 *Appl. Phys. Lett.* **86** 091905
- [28] Peddakotla S A, Kammara K K, Kumar R 2019 *Microfluid. Nanofluid.* **23** 79
- [29] Sipkens T A, Daun K J 2018 *J. Phys. Chem. C* **122** 20431
- [30] Chirita V, Pailthorpe B A, Collins R E 1993 *J. Phys. D Appl. Phys.* **26** 133
- [31] Finger G W, Kapat J S, Bhattacharya A 2006 *J. Fluids Eng.* **129** 31
- [32] Ozhgibesov M, Leu T, Cheng C, Utkin A 2012 *J. Mol. Graph. Model.* **38** 375
- [33] Xiao C, Shi P F, Yan W M, Chen L, Qian L M, Kim S H 2019 *Colloids Interfaces* **3** 55
- [34] Skoulidas A I, Sholl D S, Johnson J K 2006 *J. Chem. Phys.* **124** 054708
- [35] Moe K, Moe M M 2011 *27th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics* Pacific Grove, California, USA, July 10–15, 2010 p1313
- [36] Miao Q, Li L Q, Pi X C, Qiu Y, Fang M 2023 *Phys. Fluids* **35** 082113
- [37] Mohammad Nejad S, Nedea S, Frijns A, Smeulders D 2022 *Phys. Fluids* **34** 117122
- [38] Wang Z J, Song C Q, Qin F H, Luo X S 2021 *J. Fluid Mech.* **928** A34
- [39] Liang T F, Zhang J, Li Q 2021 *Phys. Fluids* **33** 082005
- [40] Liang T F, Li Q 2019 *J. Appl. Phys.* **126** 084304
- [41] Tao R L, Wang Z H 2024 *Chin. J. Aeronaut.* **37** 228
- [42] Minkowycz W, Sparrow E 2000 *Advances in Numerical Heat Transfer (Vol. 2)* (Boca Raton: CRC Press) p200
- [43] Paterlini M, Ferguson D M 1998 *Chem. Phys.* **236** 243
- [44] Tully J C 1980 *J. Chem. Phys.* **73** 1975
- [45] Adelman S A, Doll J D 1976 *J. Chem. Phys.* **64** 2375
- [46] Kimura T, Maruyama S 2002 *Microscale Thermophys. Eng.* **6** 3
- [47] Maruyama S, Kimura T 1999 *Therm. Sci. Eng.* **7** 63
- [48] Foiles S M, Baskes M I, Daw M S 1986 *Phys. Rev. B* **33** 7983
- [49] Spijker P, Markvoort A J, Nedea S V, Hilbers P A J 2010 *Phys. Rev. E* **81** 011203
- [50] Pham T T, To Q D, Lauriat G, Léonard C, Hoang V V 2012 *Phys. Rev. E* **86** 051201
- [51] Cao B Y, Sun J, Chen M, Guo Z Y 2009 *Int. J. Mol. Sci.* **10** 4638
- [52] Borisov S F, Litvinenko S A, Semenov Y G, Suetin P E 1978 *J. Eng. Phys.* **34** 603
- [53] Reinhold J, Veltzke T, Wells B, Schneider J, Meierhofer F, Colombi Ciacchi L, Chaffee A, Thöming J 2014 *Comput. Fluids* **97** 31
- [54] 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]

Effects of molecular collisions on accommodation coefficients under multi-parameter incident conditions^{*}

HU Yuhui¹⁾²⁾ CHEN Qi^{2)†} ZHANG Wei³⁾ JIANG Dingwu²⁾
LI Jin²⁾ QIAO Chenliang²⁾

1) (*School of Civil Engineering and Architecture, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, China*)

2) (*Computational Aerodynamics Institute, China Aerodynamics Research and Development Center, Mianyang 621000, China*)

3) (*School of Aeronautics and Astronautics, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, China*)

(Received 14 September 2025; revised manuscript received 10 October 2025)

Abstract

In rarefied gas flows, accommodation coefficients (ACs) serve as core parameters for gas-surface interactions and play a crucial role in the accuracy of mesoscopic model simulations. However, there exist significant discrepancies in the ACs obtained by different molecular dynamics simulation methods. To accurately characterize the momentum and energy accommodation properties of rarefied gases with solid surfaces under non-equilibrium conditions, this study systematically investigates the gas-surface interactions between argon molecules and platinum surfaces using molecular dynamics (MD) methods. By using single scattering (SS) and continuous scattering (CS) methods, the effects of gas-gas collisions on tangential momentum accommodation coefficient (TMAC), normal momentum accommodation coefficient (NMAC), and energy accommodation coefficients (EAC) are compared and analyzed, as well as the operating rules of parameters such as surface morphology, surface temperature, incident velocity, and mean free path (MFP). The results demonstrate that gas density exerts a dual effect on momentum and energy accommodation: at smaller MFP, the high gas density within the interaction region impedes the accommodation of subsequent incident molecules with the surface, resulting in lower ACs; at moderate MFP, gas-gas collisions promote the accommodation by increasing the frequency of gas-surface collisions, thereby enhancing ACs. Within the MFP range of 2.0–60.0 nm, the deviation in ACs between the CS and SS methods ranges from –14.88% to 5.21%, validating the dual role of gas density. Furthermore, at larger MFP, the TMAC and NMAC obtained via the CS method exhibit different trends with the increase of MFP across surfaces of varying morphologies. In contrast to gas density, increases in both surface temperature and incident velocity shorten the interaction time, resulting in reduced ACs. Notably, the effect of temperature varies across surfaces with different morphologies: elevated temperatures on smooth surfaces enhance the thermal fluctuations of surface atoms, thereby increasing NMAC, while elevated temperatures on rough surfaces make the rough structures smoother, thereby suppressing accommodation. Under high-speed incident conditions, gas-gas collisions enhance NMAC on smooth surfaces, inhibit both TMAC and NMAC on rough surfaces, and suppress EAC across all surfaces. In addition, the ACs obtained via both the CS and SS methods decrease with the increase of incident velocity on surfaces of different morphologies.

Keywords: molecular dynamics, gas-surface interaction, accommodation coefficient, surface morphology

DOI: [10.7498/aps.75.20251261](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251261)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251261](https://cstr.net/urn:cnki:sic:32037.14.aps.75.20251261)

^{*} Project supported by the Science Fund for Distinguished Young Scholars of Sichuan Province, China (Grant No. 2024NSFJQ0062) and the Postgraduate Innovation Fund Project by Southwest University of Science and Technology, China (Grant No. 24yxc2053).

[†] Corresponding author. E-mail: chenqi@mail.ustc.edu.cn

多参数入射条件下分子碰撞对适应系数的影响

胡宇辉 陈琦 张伟 江定武 李锦 乔晨亮

Effects of molecular collisions on accommodation coefficients under multi-parameter incident conditions

HU Yuhui CHEN Qi ZHANG Wei JIANG Dingwu LI Jin QIAO Chenliang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 011002 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251261

CSTR: 32037.14.aps.75.20251261

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251261>

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

气体-表面相互作用中动量和能量分量间转化机制的分子动力学研究

Molecular dynamics study on the conversion mechanism between momentum and energy components in gas-surface interaction

物理学报. 2021, 70(2): 024702 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201192>

不同润湿条件下带正弦凸起粗糙表面上气泡成核的分子动力学研究

Molecular dynamics study on bubble nucleation on rough surfaces with sinusoidal protrusions under different wetting conditions

物理学报. 2025, 74(20): 204701 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250717>

微结构表面几何特性对水蒸气凝结影响的分子动力学研究

Molecular dynamics study on influence of geometric characteristics of microstructure surface on steam condensation

物理学报. 2025, 74(14): 143101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250324>

非极性固体表面纳米液滴内离子结晶的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of ion crystallization in nano-droplet on nonpolar solid surface

物理学报. 2025, 74(23): 236401 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20251231>

丁二酸-水纳米气溶胶液滴表面张力的分子动力学研究

Molecular dynamics study on the surface tension of succinic acid-water nano-aerosol droplets

物理学报. 2023, 72(11): 114701 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222371>

不凝性气体对纳米通道内水分子流动传热影响的分子动力学模拟

Molecular dynamics simulation of effect of non-condensable gases on heat transfer of water molecule flow in nanochannels

物理学报. 2024, 73(9): 094701 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240192>