

文章编号: 1001-2486 (2000) 03-0050-03

## 氙原子在铂表面散射的分子动力论方法\*

黄琳, 陈伟芳, 吴其芬, 任兵

(国防科技大学航天与材料工程学院, 湖南 长沙 410073)

**摘要:** 运用分子动力论方法研究气体分子 (Xe) 在固壁表面 (Pt) 的散射。在构造了合理的气体分子与固壁表面相互作用势模型之后, 运用随机经典轨道方法求解气体分子及固壁原子的运动方程, 得到气体分子运动轨迹及散射后的运动状态。结果表明, 气体分子散射后的角度分布与 Maxwellian 模型存在较大差异, 而速度基本服从半空间的 Maxwellian 分布。

**关键词:** 气-固相互作用; 分子动力论方法; 随机轨道方法; 散射

**中图分类号:** O369 **文献标识码:** A

## Molecular Dynamics Method of Scattering of the Xenon Atom from the Platinum Surface

HUANG Lin, CHEN Wei-fang, WU Qi-fen, REN Bing

(College of Aerospace and Material Engineering, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China)

**Abstract:** Molecular dynamics method is employed for studying the scattering of xenon atom from the platinum surface. After constructing the reasonable gas-surface interaction potential energy function, the stochastic classic trajectory method is adopted to solve the motion equation of both gas atom and solid atoms, then the trajectory and velocity of gas atom can be obtained. The results show that the scattering angle distribution differs from that of Maxwellian model while the speed coincides with the half-space Maxwellian distribution.

**Key words:** gas-surface interaction; molecular dynamic method; stochastic trajectory method; Scattering

气体分子与固壁表面的相互作用直接关系到稀薄气体流动问题提法是否能够模拟物理现象的本质, 是稀薄气体力学首要也是最困难的研究问题之一; 此外它还与半导体器件和集成电路、异相催化、薄膜研究等许多技术科学密切相关。气-固相互作用的研究具有重要的理论意义和应用价值。

迄今为止 DSMC 是求解稀薄气体流动问题唯一获得巨大成功的数值计算方法。然而目前 DSMC 仿真中对于壁面边界条件通常采用现象学的 Maxwellian 反射模型, 具有很大的随意性和不确定性, 从而显著影响流场的数值模拟结果。本文从微观角度出发, 从原子分子碰撞的层次运用分子动力论方法研究气体分子在壁面反射之后的运动状态。

## 1 气-固相互作用势函数

构造合理的气-固相互作用势函数是运用分子动力论方法研究气-固相互作用的首要任务。对于 Xe 原子与 Pt 表面的相互作用, 选用如下形式的势函数。

$$\begin{cases} V(r, q_1, q_2, \dots, q_i) = \sum_{i=1}^{16} V_i(R_i) + V_z(Z), & R_i = |r - q_i| \\ V_i(R_i) = 0.0227[(3.28/R_i)^{12} - (3.28/R_i)^6] \\ V_z(Z) = 0.2393 \left\{ \frac{2}{15} \left[ \frac{4.6}{Z+0.9} \right]^9 - \left[ \frac{4.6}{Z+0.9} \right]^3 \right\} \end{cases} \quad (1)$$

式中  $r$  为 Xe 原子的位置矢量;  $q_i$  为第  $i$  个 Pt 原子的位置矢量;  $Z$  代表沿壁面法线方向的位置坐标。能量单位为 eV, 距离单位为  $\text{\AA}$ 。根据上述作用势模型可以得到 Xe 原子在 Pt 表面的结合能为 0.3eV, 这与试验结果相一致。对于 Xe 原子在平行于表面方向的运动, 势能函数是非常光滑的, 表面扩散的

\* 收稿日期: 1999-09-10

基金项目: 国家自然科学基金项目

作者简介: 黄琳 (1975), 女, 博士。

能垒仅为 0.1 kJ/mol，这种光滑性与试验得到的吸附几率及散射分布是一致的。

## 2 随机经典轨道方法

随机经典轨道方法又称为 GLE 方法，其基本原理及具体推导可参见文献 [1]。应用该方法仅需显式求解 Xe 原子及四个最靠近 Xe 原子的 Pt 原子，称之为“主要原子”的运动轨迹。而其余大数目的晶体原子对 Xe 原子运动状态的影响则通过一个广义摩擦积分和一个随机力项予以体现。摩擦积分项描述了能量从主要原子至晶体其余部分的耗散；随机力项则代表除主要原子外其余晶体原子的热涨落，二者之间通过“涨落-耗散”定理相联系。GLE 方程的具体形式如下。

$$\begin{cases} \dot{\mathbf{X}}(t) = F_R[\mathbf{X}(t), \mathbf{Y}(t), \mathbf{Z}^0] \\ \dot{\mathbf{Y}}(t) = -\Omega_{PP}^2 \mathbf{Y}(t) + \Lambda_0^{V^2} \omega_0 s(t) + F_P[\mathbf{X}(t), \mathbf{Y}(t), \mathbf{Z}^0] \\ \dot{\mathbf{S}}(t) = \Lambda_0^{V^2} \omega_0 \mathbf{Y}(t) - \omega_0^2 s(t) - \dot{\mathbf{s}}(t) + \boldsymbol{\xi}(t) \end{cases} \quad (2)$$

其中  $\boldsymbol{\xi}(t)$  为随机力，满足  $\langle \boldsymbol{\xi}(0), \boldsymbol{\xi}(t) \rangle = 2k_B T \gamma \delta(t)$ 。矩阵  $\delta(t)$  的元素为 Delta 函数  $[\delta(t)]_{ij} = \delta_{ij}$ 。方程中  $\mathbf{X}(t)$ ,  $\mathbf{Y}(t)$ ,  $\mathbf{S}(t)$  分别代表气体原子、四个“主要原子”及四个“影像原子”的位置矢量。计算中矩阵  $\Omega_{PP}^2$ ,  $\Lambda_0$ ,  $\omega_0$  有关参数的选取均参考文献 [1]。 $F_R(\mathbf{X}(t), \mathbf{Y}(t), \mathbf{Z}^0)$  及  $F_P(\mathbf{X}(t), \mathbf{Y}(t), \mathbf{Z}^0)$  则根据式 (1) 介绍的作用势函数确定。

$$F_R(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z}^0) = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}} \quad F_P(\mathbf{X}, \mathbf{Y}, \mathbf{Z}^0) = -\frac{\partial V}{\partial \mathbf{q}} \quad (3)$$

仿真中首先按照计算条件给定气体分子及四个 Pt 原子的初始位置和速度矢量。四个主要原子的初始速度按照 Maxwellian 分布随机抽样得到

$$f(\mathbf{V}) = \left( \frac{m_w}{2\pi k T_w} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot \exp\left[ -\frac{m_w V^2}{2k T_w} \right] \quad (4)$$

气体分子距离表面的初始高度为  $10^{\circ}\text{A}$ ，而入射速度按照下式抽样得到。

$$f(\mathbf{V}) = (\mathbf{V} \cdot \mathbf{n}) \cdot \left( \frac{m_g}{2\pi k T_g} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot \exp\left[ -\frac{m_g (\mathbf{V} - \mathbf{V}_0)^2}{2k T_g} \right] \quad (5)$$

其中  $T_w$ ,  $T_g$  分别为壁面及气体温度， $\mathbf{n}$  为壁面法线方向的单位矢量， $\mathbf{V}_0$  为入射气体的宏观速度。

在抽样得到气体分子及四个“主要原子”的初始位置和速度矢量之后就可以通过求解 GLE 方程跟踪气体分子的运动轨迹。本文计算中采用 Runge-Kutta 方法数值求解 GLE 方程。在每个计算时间步长内记录气体分子及固体原子的位置和速度矢量。当气体分子的 Z 方向坐标超过初始值时，结束该条轨迹的计算。在得到气体分子的一条运动轨迹之后，按照同样的方法抽样下一次计算的初始位置及速度矢量。这样对大量计算轨迹求平均即可得到气体分子在固壁表面散射后的角度及速度分布。

## 3 计算结果及分析

本文计算中气体的宏观入射速度为 250m/s，气体及壁面温度均为 300K。图 1 是气体分子入射角度为  $30^{\circ}$  时反射后  $\theta$  角的分布。 $\theta$  角代表反射速度矢量与壁面法线方向的夹角。图中表明， $\theta$  角在  $30^{\circ}$  附近出现的几率最大，但与镜面反射相比， $\theta$  角具有较大的散射范围，在  $[-90^{\circ}, 90^{\circ}]$  的区间内均有反射分子出现。而与完全漫反射模型相比， $\theta$  角更集中于  $30^{\circ}$  附近。说明气体分子散射后的实际运动状态介于镜面反射与漫反射之间。图 2 是气体分子反射后  $\phi$  角的分布曲线， $\phi$  角代表气体分子散射后的环向分布。图中各点的位置对应于  $\phi$  角的大小，而距原点的距离表示气体分子反射后  $\phi$  角具有该值的几率。图中表明  $\phi$  角的分布近似为圆形，说明气体分子散射后的环向分布接近各向同性分布。

图 3 是散射后气体分子速度模值分布曲线。图 4 至 6 是散射后 X、Y 及 Z 方向速度分布曲线。从中看出，X 及 Y 方向速度近似服从 Maxwellian 分布，而 Z 方向速度则近似服从半空间的 Maxwellian 分布。

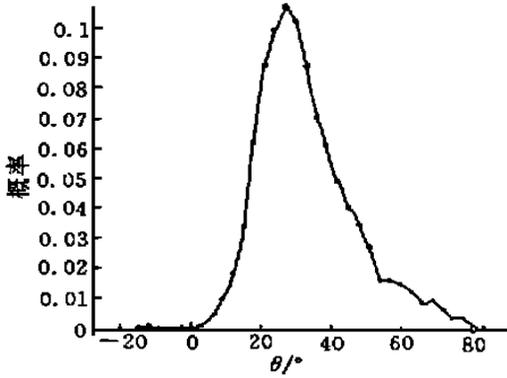


图1 散射后 $\theta$ 角分布曲线 ( $\theta_i = 30^\circ$ )

Fig. 1 Curve of  $\theta$  after scattering ( $\theta_i = 30^\circ$ )

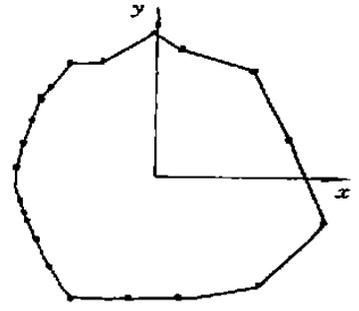


图2 散射后 $\phi$ 角分布曲线 ( $\theta_i = 30^\circ$ )

Fig. 2 Curve of  $\theta$  after scattering ( $\theta_i = 30^\circ$ )

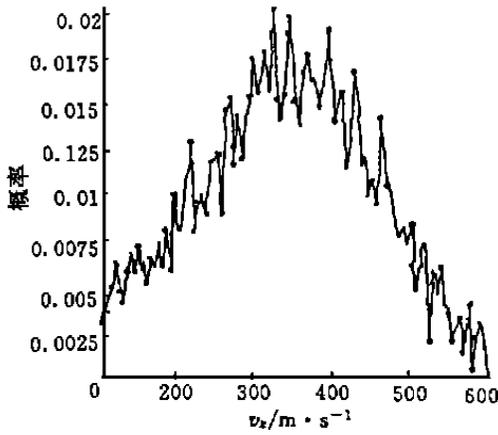


图3 散射后速度分布曲线

Fig. 3 Speed distribution of gas molecular

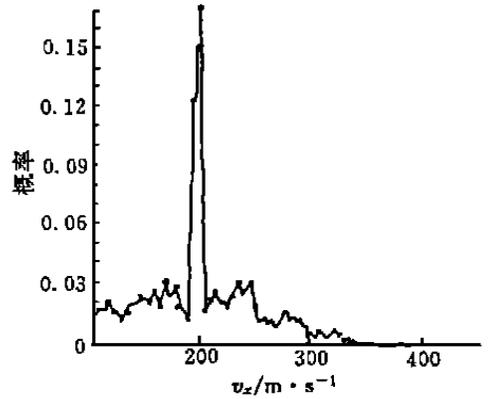


图4 散射后X方向速度分布曲线

Fig. 4 X velocity distribution of gas molecular

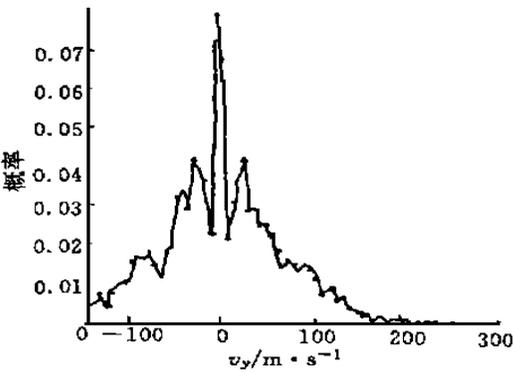


图5 散射后Y方向速度分布曲线

Fig. 5 Y velocity distribution of gas molecular

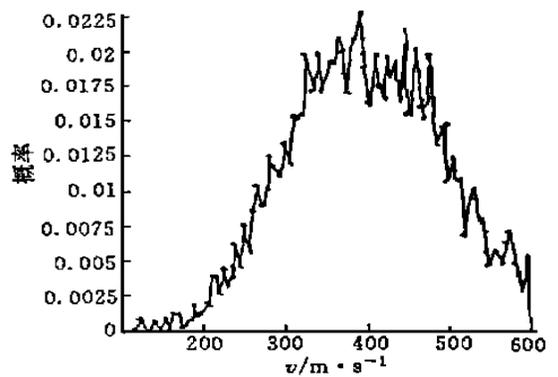


图6 散射后Z方向速度分布曲线

Fig. 6 Z velocity distribution of gas molecular

参考文献:

[1] Tully J.C. Journal of Chemical Physics 73: 1975  
 [2] Gimmelmann E.K, Tully J.C, Helfand E. Journal of Chemical Physics, 1981, 74: 5300  
 [3] Yoichiro Matsumoto. Proceedings of the 16<sup>th</sup> Symposium on Rarefied Gas Dynamics, 1991.