

气体与表面相互作用 ——最新的观察与解释

Franklin C. Hurlbut

Dept. of Mechanical Engineering, University of California at Berkeley, California 94720, USA

摘要 在过去十年内,随着计算机的广泛使用和性能的显著提高,稀薄气体动力学研究的课题更加充实丰富,在实验方法和仪器设备方面也有重要进展.本文第一部分叙述粒子-表面动力学的最新研究进展,其中发现选定状态的离子的速度和转动能是入射束的离开方向和参数的函数.最近,与实验一起进行了大量计算机模拟,表明二者相结合的研究是很有益的.在束流实验中,所产生的散射粒子的速度分布和密度与数值模拟结果符合得很好.第二部分介绍了更直接地与非常高的大气层中的飞行和测量相联系的气体-壁面相互作用的研究.本节从考察一些年前完成的离子束与表面相互作用开始.它提供了很有参考意义的与现代研究结果的比较,并给出了有用的标准.本文接下去探讨了“火星探索者”外形,它在过去几年内一直是一些风洞和计算研究的课题.对 Navier-Stokes 方程和 DSMC 计算结果进行了有趣的比较.

关键词 气体-表面相互作用,稀薄气体动力学,粒子-表面动力学,离子束与表面相互作用

1 引言

感谢本届会议主席沈青教授、会议组委会和 Lloyd Thomas 纪念基金会给我在这一卓越聚会上报告的机会. Thomas 教授的工作标志着我们认识气体-表面相互作用的转折点.我庆幸认识这样一位朋友和才华出众、人格高尚的学者.

认识气体-表面相互作用的动力学过程和化学过程的本质,对运输、通讯和研究中新设备的优化设计是非常重要的.在分子水平上的知识仍是不完善的.除少数几个例外,我们不能精确地描述给定种类的气体分子的离开速度,和从某种特定表面散射后的开端条件.我们既不是很了解转动和振动能量状态的分布,也谈不出多少关于粒子撞击引起的化学变化.有幸的是,还确实有些例外,并且在过去十年(这也是我们这里关注的时间),我们知识在广度和可靠性方面有了显著的增长.另外,应用的课题和领域增加了.在这些应用的课题和领域中,人们已逐渐达成共识,就是理解稀薄效应是基本的.本文第一部分讨论来自实验或计算的最新信息,它使我们对气体-表面相互作用有新的理解,并加强和

修正过去实验和计算工作中的一些实例。在第二部分将讨论与以轨道速度飞行相关的问题。

2 近期的实验和计算研究

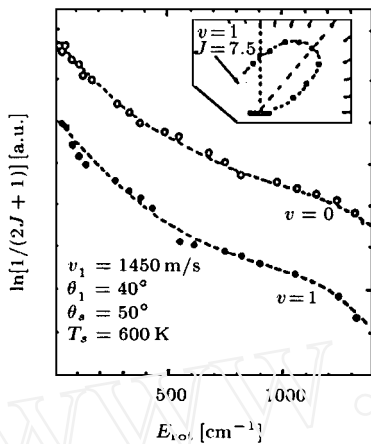


图1 低振动态 ($v=0$ 及 $v=1$) 分子的转动态分布。插图显示快速入射的 NO 分子 ($v=1, J=7.5$) 从 600 K 的金刚石表面散射的密度角分布

当代实验技术在 Roth, Hager 和 Walther^[1]关于 NO 从金刚石 (110) 表面散射的论文中做了介绍。持续时间为 2 ms, 速度为 400 m/s ~ 1450 m/s, 由选分器控制的脉冲光束射向金刚石表面。由受激准分子泵浦的具有持续时间 10 ns 的可调染料激光器, 产生状态选择的离子, 这些离子然后用四级质量光谱仪检测。散射离子的速度由飞行时间确定。该实验系统可加热, 并且装备 LEED 和 Auger 系统用于表征表面。入射角、观测角及表面的方位角取向都是控制的。粗略讲, 金刚石 (110) 表面以衍射光栅方式刻出条纹。作者们认为散射分子的分布随着绕表面的法线在该平面内旋转 90 会有显著变化。这些预想没有成为现实。典型的散射曲线图在图 1 中给出。

总的来说, 对于大约 75 % 的分子散射被确定为近似弹性的。转动温度随着入射能量和表面温度增加而增加, 而对表面温度的热适应仍然较低。这些结果显示了在检测离开分子速度和确定转动和振动状态方面现在可以得到一些值得注意的细节。

使实验的精度和细节同当代计算机模拟相匹配应该是可能的。事实上, 至少在计算机内存和速度方面确实如此。然而, 还存在一些问题, 如在表面形状, 固体原子间的势能以及适合于气体-分子、固体-表面相互作用的势能等方面。在化学、电子和光学过程重要的地方, 计算的可靠性是有问题的。现在, 处理由几千原子构成的表面小区域是可能的, 并且, 随着并行计算的发展, 可处理的粒子数目会大大增加。由于前面提到的某些不确定性, 大部分研究处理的是规则晶体。

这里, 有必要考察一下 Smith, Kara 和 Holloway^[2]关于在铂 (111) 表面氩的俘获和散射的工作。直到最近几年, 一直认为入射原子会经过一个直接的非弹性散射过程。其中涉及一个或多个在它直接影响范围内的表面原子, 或者入射原子会被吸附, 然后停留下来, 最终在表面温度下以一种 Maxwell 分布解除吸附。为了应用动力学轨道方法研究这种相互作用, Smith 等人使用了一组大约 2000 个铂原子, 其中每层 144 个原子的 4 层组成激活区域, 周围是一个 1000 多个原子组成的“沙袋”区, 通过它在每个时间步调整速度, 以致使激活区温度保持恒定。晶体在 5 个侧面由固定的铂原子包围。所有的原子与最靠近的原子以谐振子方式连接。发射的氩原子通过对偶指数斥力势与每个激活表面原子相互作用。

用，并且通过“平的”van der Waals 引力势相互作用。对每次不同的入射条件，大约计算了 3000 个轨道。很快发现，许多氩原子沿表面反弹开来，事实上是被“准吸收”了 (quasi-adsorbed)。入射粒子动量的法向分量比平行分量更快地适应，并且有证据表明，对一些轨迹，动量从平行分量传递到法向分量 (见图 2)。没有带有 5 eV 成更多的初始能量的粒子被俘获。这些研究中的入射角是 45°。

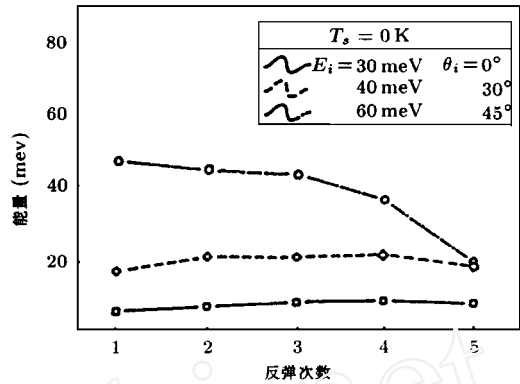


图 2 俘获的早期阶段氩在铂 (111) 表面上每次反弹后的切向动能分量. 表面温度为 0 K

Smith 等人的工作阐明了研究人员经常面对的一个问题的有意义的解。这些研究者希望提供应用于动态的粒子-表面模拟研究中的真实固体边界条件。

“沙袋”粒子法的较早的描述是 Berendsen 等人^[3]给出的。在这里，每个时间步长传输的能量正比于晶体温度和初始温度的差。然而，在许多分子动力学模拟的应用中，在边界的能量处置问题并不出现。例如，当兴趣仅集中在离开轨迹时，在每个新轨迹上从一随机决定的初始条件开始可能就足够了。

Barker 和 Rettner^[4]介绍了关于轨迹研究和相关的在铂 (111) 表面用氩做的分子束实验的有意思的讨论。这个实验研究是 Rettner, Barker 和 Bethune^[5]以前的论文讨论的内容，意在考察随着入射束能量增加向结构散射的过渡。在实验中应用了现代“飞行时间”技术。能量在 0.05 eV ~ 14.3 eV 的粒子束射向温度控制在 85 K ~ 800 K 的靶标。靶标用最临近的铂原子间以谐振子约束的平板模拟。入射原子通过附加均一引力势的对偶指数势与表面原子联系。

这项研究的结果提供了分子离开速度的图形。它可能对一般模拟在类似的系统中的离开速度分布有所帮助。所谓类似的系统是指光滑晶体靶材料与单原子或双原子分子相互作用的系统。另外，这项研究的结果可能有助于阐明并确认一些年前由 Subbarao 和 Miller^[6]所做的观察以及同期由 Jih 和 Hurlbut^[7]所做的观察。这里，图 3a 和图 3b (引自 Barker 等人的文献 [4]) 给出入射能量为 6.8 eV 和 1.17 eV 时散射强度和最终平均能量的计算和实验值。入射角从表面法线测量是 30°。在这两个图中，x 表示平均离开能量的计算值，空心圆表示散射强度的计算值。计算值和实验值的符合情况在各个区域是很显著的。如果我们用标准的定义表示热适应系数，应用到两种情况的强度峰值，并忽略根据 Maxwell 散射律会从靶上散射的很小的能量，我们发现 $\alpha = 0.49$ 对应较小能量粒子， $\alpha = 0.66$ 对应较大能量的粒子。另一个引人注目的观察，是看到了散射粒子的能量在低能量情况下通过散射强度峰值减少，而在高能量情况下散射粒子的能量通过峰值明显上升。

Jih 和 Hurlbut 的实验结果 (文献 [6]) 见图 4a 和图 4b, Subbarao 和 Miller 的结果 (文献 [7]) 见图 5。这两组实验结果都考察了氩从银 (111) 表面的散射。在分析散射后

的速度中应用了机械断续器 (mechanical chopper). Jih 和 Hurlbut 对 0.8 eV 的氙原子束实验结果表明, 散射的氙的速度从接近表面法向的最小值增加到超过强度峰值的最大值. 然

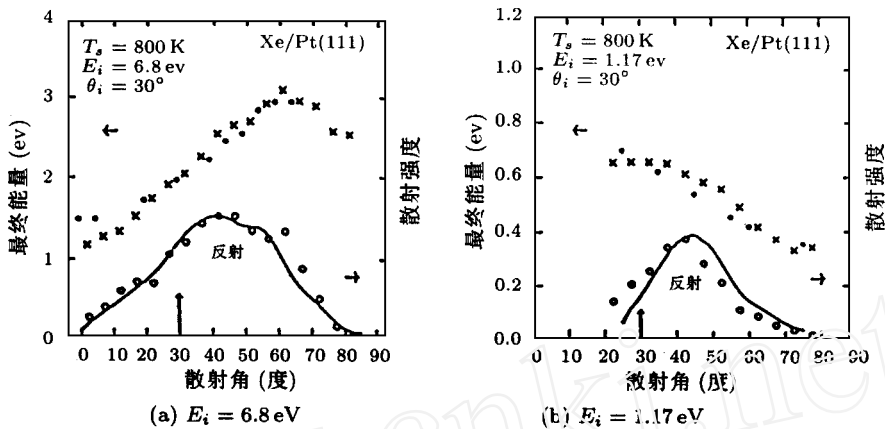


图3 氙在铂(111)表面的散射强度和能量的实验值与计算值的比较. 计算的散射强度用°, 能量用×表示. 实验值, 实线代表散射强度, 实心圈代表能量, 入射角为30°, 表面温度为800 K

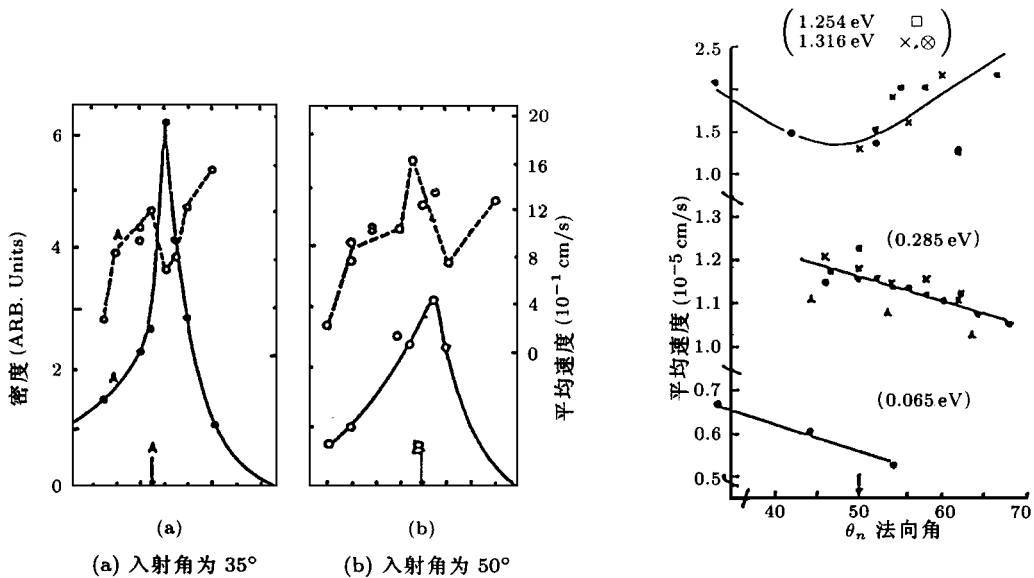


图4 $E_i = 0.89 \text{ eV}$ 的氙从银(111)表面散射. 实线代表散射强度分布, 虚线代表平均速度, 入射角从表面法向测量

图5 入射能为0.6 eV到1.31 eV的氙从银(111)表面散射. 入射角为50°

而, 通过10度到20度, 在顶点的强度分布有一个显著的下降. Subbarao 和 Miller 的结果在这个范围显示一个缓慢下降的速度, 而在大能量情况, 先下降而后改变到增加速度. 这些结果的相似性远远胜过小的差异, 毕竟这些差异可容易地归因于气体和晶体系统的不同. 这些研究清晰地表明, 现代动力学轨迹模拟可以得到有价值的与现在和早些时候的实

验的结果的比较. 随着过渡到结构散射, 会出现离开的分子速度分布形式的显著变化.

在过去五年内, 进行了许多粒子-表面相互作用的研究, 并伴随着进行了计算比较. 由于时间关系, 这里不详细评述这些工作. 但提请注意 Wiskerke 等人^[8]的关于能量为 0.46 eV ~ 1.7 eV 的氧分子从铂 (111) 表面散射的研究. 发现在所有情况下散射强度都分布在较狭的波瓣区 (lobe). 当粒子束以 40 度入射, 且具有平动能 1.73 eV 时, 发现平均散射能量通过离开角范围逐渐上升, 如图 6 所示. 在入射能量为 1.26 eV 和 0.46 eV 时, 当离开角从低到高移动时, 离开能量升高, 通过一个峰值然后下降. 氧的表现非常类似于氩. 氩的结果来自 Hurst 等人^[9]所进行的广泛的一系列的观测. 其中, 初始能量与平均最终能量的比值对每个表面坐标轴都做了观测. 氩原子束能量高达 1.7 eV. 束速度亏损在 y 方向 (坐标轴在靶表面内) 近似为 0.04, 而在 z 方向 (垂直靶平面) 有些变化, 约为 0.18. 粗略估计, 热适应系数大约为 0.1.

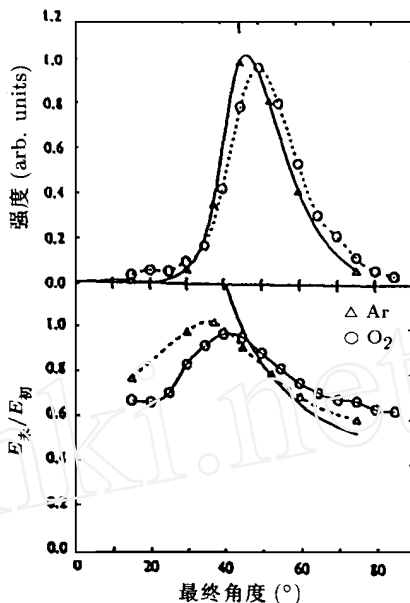


图 6 氩及氧 (O₂) 从铂 (111) 表面散射. 氩能量为 0.34 eV (文献 [9]), 氧能量为 0.46 eV (文献 [8]), 表面温度为 500 K, 两种情形下入射角都为 45°

van Slooten 等人^[10,11]所做的很有启发性的研究, 是进行了银 (111) 表面的快速 H₂ 散射的实验和经典动力学模拟, 结果见图 7a 和图 7b. 在模拟中, 联系 31 个表面原子的 H-Ag 对偶势的总和, 与 H-H 相互作用的 Morse 势相结合. 由动力学试验发现, 仅需 3 个

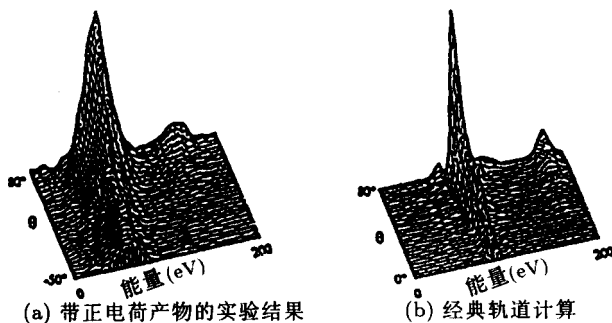


图 7 200 eV 的氢 (H₂) 从银 (111) 表面散射的动力学模拟与实验测量的比较. 入射角从表面法线测量是 70°

第二层原子. 撞击的位置是随机选取的. 在这种情况下, $i = 70$ 的模拟显著地与实验结

果相匹配，特别是考虑到入射能量的广泛的范围。二个图样中主要差别之一在于实验结果的附加宽度。作者们设想，由于在模拟中缺少电子方面的考虑可能可以说明这种不大的差异。

这里我做一点说明，它适用于这里新讲的大多数情况，就是气体-表面相互作用的观测和动力学模拟之间可能也应该建立共生的关系。一种信息与另一种信息对话。实验系统提供可靠的数据，或者如果愿意可以称之为基准点，这些数据使数值模拟与现实世界相联系。模拟添补实验的空白，同时拓广了观察（否则观察中可能有些细节被屏蔽掉）。

上述的说明在许多场合并以不同形式给出过。如在 Head+ Gordon 等人的论文^[12]中，将氩在铂（111）表面散射的实验研究与动力学模拟相结合，发现二种研究模式的结果符合得很好。证明散射分布的 Maxwell 分量具有一个高于表面温度几度的温度。在这个系统中入射原子的切向动量慢慢适应，以便一些分子被解除吸附，而仍具有其初始动量的残余。这个结果的一个例子在图 8 给出。

氟在制造微电子器件中经常用做反应物。就这个意义而言，表征氟入射至硅表面引起的微观效应是重要的。Carter 等^[13]报告了对氟在硅（100）-2 × 1 表面的散射和相互作用的分子动力学研究。Carter 的小组利用了每层 72 个原子共 9 层深的一块硅片，最低一层位置固定。Si-Si 和 F-F 相互作用势根据了 Weber 和 Stillinger 的论文^[14]。轨道是在平动能为 18 kcal/mole 到 20 kcal/mole 范围，而没有转动动能情况下开始的，但有分子轴线的固定取向和不同能级的振动能量（直到 19 kcal/mole）。结果表明振动激发水平在确定作用模式方面起主导作用。当振动能低时，反应包括一个氟原子的分离和另一原子的超热发射。在振动能级较高时，带有两个 Si-F 键的离解化学吸附对这表面变得较为重要。

微电子机械系统（Micro-electro-mechanical systems (MEMS)）的平面可以做得很平，在几个埃内。并可以刻花纹，其边缘公差为同样量级。在伯克利分校机械工程系正在进行磁盘存贮设备的研究，拾取头在运动的存贮磁盘上方运动，间距小到 15×10^{-9} m。在标准大气密度下，分子的平均自由程大约 75×10^{-9} m。这使拾取头处于近自由分子流中，它的 Knudsen 数大约为 5。尽管机械形状可能是复杂的且热源和汇的分布可能造成模拟的困难，在微型设备中力学和热过程的模拟将用数值方法进行，这在类似尺寸的系统通常是通常的做法。

3 上层大气中热和动量的传递

前一节中引述过的研究工作已给出了重要而富有启发性的数据。然而大多对这一工作做出贡献的研究者并没有直接地从事高速飞行问题的研究。而有很多研究者却是更直接地涉及在上层大气中的飞行问题上的应用。现在我们来考察在这一广泛的领域进行的研究，可能可以用新的结果和稍微早些时候的一些工作，做一个相当好的关于气体-表面碰撞的最新信息的综述。当然，知道气体分子和表面碰撞的反应是极为重要的，而稀薄气体力学包含的内容更多，它的本质是弄清这整个气体-物体系统的反应，这就要求知道碰撞后分子速度分布，以便能够进行流动模拟。

在第一节中讨论的工作大多处理的是单晶体的清洁表面。而另一方面，航天器表面一

一般是金属、玻璃和漆，被吸附的气体的数量由材料、飞行历史和当时的温度决定。Onji^[15]在1984年日本Tsukuba第14届国际稀薄气体动力学会议上报告了相关的很有意思的工作。其中，他讨论了从镍、银和铂的受污染的工业产品表面散射的稀薄气体的角分布。在实验过程中，表面保持室温，当用氩气时，气体粒子束具有能量0.06 eV以上，最大可到3.8 eV。对每种气体和表面系统组合，散射特性是相似的。在室温入射流情况下观测了Maxwell强度分布，在入射流能量近似0.5 eV时，这分布出现了一个较宽的峰。当达到最大能量时，这峰变得尖锐得多，峰值位于镜面反射的方向附近。散射强度与射流能量关系的结果见图8。它们与Onji工作的其他结果强化了这样一个认识：高能入射分子可以穿过弱吸附在表面的分子层，然后直接与固体作用。到目前为止，涉及这种作用的信息对于设计运载工具而言既不明确也不完整。

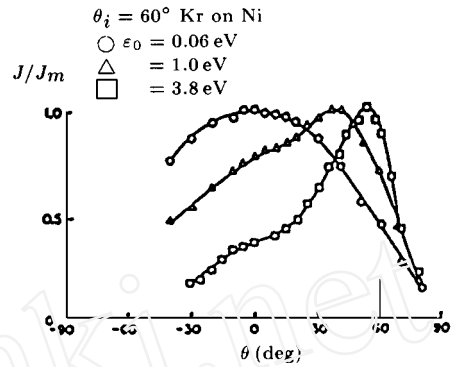


图8 氩从镍表面散射的强度分布，入射角从表面法向测量为60°

众所周知，大量的分子与表面碰撞的平均效应，是根据切向和法向动量传递系数和与热适应系数进行讨论的。它们每一个代表着法向动量或切向动量或者热能的总量的一部分，它们通过从一个特别的方向入射的分子的散射传递给表面。在包括宇宙飞船的应用中，最感兴趣的方向通常是由自由来流速度矢量确定的。这些系数中的每一个都依赖于：入射分子轨迹在撞击点与表面成的角度，分子相对表面的速度，还有各种系统参数如气体和表面的分子质量。工业产品表面传递系数的实验确定已由一些研究者用能量高达几电子伏的气体或离子流完成。以下的2个图给出了20年前实验的结果，我认为它为当代的研究提供了坚实的基础。来自初始资料的数据，在第四届国际绳系卫星会议报告^[16]中归纳为现在的形式，我把它们引用于此。

最有兴趣的结果可能是NASA Ames研究中心Knechtel和Pitts^[17]给出的。能量为5 eV到150 eV氮离子和氩离子射向铝表面，这些表面设定为真空微平衡，用来安排测量所要求的法向或切向动量传递。这里只报告这个观测的一小部分。对它们而言，实验的能量接近在近地轨道上飞船遇到的情形。如图9所表明的，法向动量传递系数的所有的值都小于1，并且随着入射流方向从平面法向向接近切向变化时数值一直减小。相比之下，观测到的切向动量传递系数较少看出一致的特性，如图10所示。虽然已经发现这个系数的值在大多数情况下是小于1的，且对包括单晶的研究这结论一定是对的。但Doughty和Schaezle^[18]多次发现，在入射角小于50°时，反向散射占优势。在该项工作中入射角是从表面法线测量的。其他人包括Lord和Thomas^[19]在宏观的实验中观测到反向散射的影响，他们测量了旋转的磁悬浮的粗糙表面球的能量衰减，并且发现的值比1稍大。同样这些球，光滑表面给出小于1的值。同期的其他研究人员的结果已经包括在图9

中. Abauf 和 Marsden^[20]用在氩中加入氦能量高达 4.11 eV 的粒子束, 研究了对云母和光滑与粗糙铝表面的法向动量传递. 的值从低能时的 0.65 降到在较高能量时的最小值 0.6. Mair, Viney 和 Colligan^[21]用能量从 5 eV 到 100 eV 的离子流射向铜表面, 发现 的值降低到能量为 6.0 eV 时的最小值 0.4, 之后升到能量为 69 eV 时的最大值 0.75.

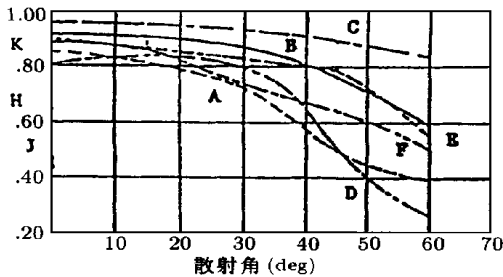


图9 使用能量为 5 ~ 25 eV 的离子束和中性粒子束对铝和铜的工程表面的法向动量传递, 有关作者及参考文献号参见表 1

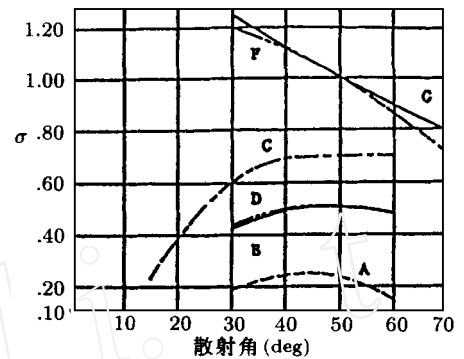


图10 使用能量为 5 ~ 25 eV 的离子束和中性粒子束对铝和铜的工程表面的切向动量传递. 有关作者及参考文献参见表 1.

表 1 图 9 及图 10 的作者及参考文献

曲线	能量	系统
	Knechtel and Pitts [17]	
A	5 eV	N2 ⁺ - Al
B	10 eV	N2 ⁺ - Al
C	15 eV	N2 ⁺ - Al
	Knechtel and Pitts [17]	
D	15 eV	N2 - Al
	Doughty and Schaetzle [18]	
E	25 eV	N2 - Al
F	25 eV	Ar - Al
G	75 eV	N2 - Al
	Abauf and Marsden [20]	
H	5 eV	Ar - Al
	Mair, Viney, and Colligan [21]	
J	4.4 ~ 100 eV	N2 - Cu
	Boring and Humphris [31]	
K	8 ~ 200 eV	N2 - Al

很多研究人员从动量传递的测量计算了热适应系数的值. 比如, Doughty 和 Schaetzle 发现当能量为 25 eV 的氦粒子流射向铝表面时, 的值从 60°入射 (从表面法向计算) 时的 0.89 减少到 30°入射时的 0.75. 关于这些问题的更详细的叙述和类似的发现可见作者的一篇综述论文, 文献 [22]. 似乎应该有理由得到这样的结论: 对许多实际系统, 法向动量传递和热能传递系数明显小于 1. 对一些外形, 尽管对气动阻力没有很大影响, 但对热传递有很强的效果. 并且对平表面, 对升力有重要的影响.

我们必须注意, 关于在玻璃表面分子相互作用的实验研究奇缺, 直到 1994 年秋才设计了一个关于热和动量传递的在宇宙飞船上的实验研究. 很多人会记得, Magellan 风车实验在 1992 年提出, 在 Vancouver

第十八次国际稀薄气体会议上进行了讨论. 最近的初步结果在 Oxford 第十九次国际稀薄气体会议上由 Lyons^[23]做了讨论. 热适应系数的测量值从开始气动制动时的 0.8 增加到较低高度时的 0.9. 大的太阳电池板, 分别倾斜形成风车, 产生绕飞行器长轴的转矩. 此转矩为反作用轮所平衡, 从而提供了估计动量传递的基础. 直到 Magellan 1994 年 10 月

12 日最后进入金星大气层，这些实验一直在进行。这些数据的分析一直在 NASA Langley 中心以及在 NASA Ames 中心进行。关于在 Langley 进行的这个工作的报告要到秋天才能完成。Magellan 风车实验将提供一个很有意义的基准，以便同将来的实验做比较。同时它提起我们注意，现在研究计划中的一个严重的不足。现在还算有一个研究气体表面相互作用的将实验室和空间实验协调起来的规划。有限的空间实验将对更详细的实验室研究提供基本的依据。

在过去 5 年内，70°半角的头锥引起很多的关注，这种形状是火星探索者（Mars Pathfinder of MESUR）减速伞外形。由于它可能用于气动制动和作为行星探测器，该项外形研究在一些欧洲和美国许多实验室受到 NASA-AGARD 计划的支持。还进行了相关外形的研究，例如在 DLR 的 V3G 真空风洞中，Legge, Nanbu 和 Igarashi^[24]所做的氮和氩的高超音速流中铜圆盘的升力、阻力和热传递的研究。驻点温度值为 297 K 或 500 K，流动的 Knudsen 数为 0.05 ~ 10，其结果同 DSMC 分析结果做了比较。在分析中表面相互作用是通过熟知的部分 Maxwell 散射和部分镜面反射的模型引入的。对氮实验热适应系数用 0.6，对氩用 1.0 时，发现与 DSMC 比较最为接近。在这个模型中热适应系数数值上等于进行 Maxwell 散射的分子所占比例。在以后的工作中，Legge^[25]研究了探索者（Pathfinder）外型的力系数和热传导。

在 Dogra, Moss, Wilmoth, Taylor 和 Hassan^[26]最近的论文中报告了探索者的方法比较研究。论文中 DSMC 和 Navier-Stokes 方程两种方法都用来检验 Navier-Stokes 方程计算仍然有效的 Knudsen 数的范围。研究的注意力集中在高度为 75 km ~ 105 km 的地球轨道飞行时尾流的温度和密度。一直到 95 km ($Kn = 0.0154$, $d = 2.65$ m) 发现好的到尚可的符合。但似乎在 Kn 数较大时，N-S 方程的有效性不大。假定了能量完全适应。应该注意到，在前方的表面，那里气体的密度高，部分适应的重要性应该较小，但对预测弹体后部的加热率很可能是有本质的重要性。

应用 DSMC 方法模拟作用在弹体上的气动力和确定弹体周围流场参数主要依赖于表面碰撞后（离开）速度分布的研究，正如离开的速度必须是根据气相碰撞求出一样。许多研究者愿意假设一个模型，使一定比例的分子按 Maxwell 速度分布漫散射，剩余的做镜面反射处理。这个混合模型，如果它可以这样叫的话，在一定条件下是有用的，即在气相中的分子碰撞比在表面上要多得多，并且流动的动能温度同表面温度没有很大的区别。然而，大家知道，许多分子散射，特别是在几个电子伏特能量情况下，离开速度分布遵守漂移 Maxwell 分布，而离开密度分布呈畸变椭球型。这些观测使 Nocilla 应用自由参数 S_r , α_{\max} 和 β 表述了离开分布的模型。随后，Hurlbut 和 Sherman^[27]将 Nocilla 的假设应用到稀薄流场的分析模式，其中离开分布以系统的方式同入射条件相联系，当与 DSMC 结合时，可提供确定气动系数的一个完整的方法。应该承认，对 Nocilla 模型，正确的参数必须从自然界的观测中确定。1992 年 Hurlbut^[28]建立了从平板的法向和切向动量传递和热适应系数的测量值计算 Nocilla 参数的方法。很快由 Collins 与 Knox^[29]和 Gaposchkin^[30]分别发现，我们不能用参数 α , β 和 γ 的任意选择的组合说明这些方法。可以被反转换到 Nocilla 参数的参数，必定是确定的组合。在这两篇论文中，都建立了选择这样组合的方法。在轨

道飞行中测量的传递系数可望构成完全可转换的组合。毫无疑问,发展现象论模型的工作将继续下去。在适当的时候,更精确的模型会发现。在此以前,HSN模型¹⁾提供重要的可能性,以用这些从基于空间实验得到的结果比较和验证实验室的观测。

4 总 结

本文第一部分讨论了应用于粒子表面相互作用的实验室研究的现代方法。实验在几乎任何适宜的平动能量下都是可能的。用脉冲激光束进行状态选择所做的探测和用飞行时间进行速度测量使全面描述离开分布成为可能。计算方法的进展与实验工作保持同步。我们讨论了分子模拟的结果,它们显示出与实验结果符合得很好。在随后的一节注意力集中在稀薄气体条件下,高速飞行中,直接与表面相互作用有关的实验和计算。对1到几个电子伏特粒子能量时动量传递的基本研究做了评述。然后,讨论了模拟的问题,给出了最近风洞实验的例子。建议了三个相互支持的研究要素:第一是重新开始应用于空间和工业的气体表面相互作用的现代分子束的研究;第二是动力学模拟和实验室研究的协调;第三可能是最重要的,是空间实验的规划,它应为实验室实验验证和发展方向提供关键的基准。

参 考 文 献

- 1 Roth C, Hager J and Walther H. Scattering of NO molecules from adiamond (110) surface. *J Chem Phys*, 1992, 97: 6880 ~ 6889
- 2 Smith F U, Kara A and Holloway S. A molecular dynamics study forthe trapping and scattering of Ar/ Pt (111). *Sur-
face Science*, 1993, 281: 296 ~ 308
- 3 Berendsett H J C, Postma J P M, van Gunsteren W F, DiNola A andHaak J R. Molecular dynamics with coupling to an external bath. *JChem Phys*, 1984, 81: 3684 ~ 3690
- 4 Barker J A and Rettner CT. Accurate potential energy surfacc forXc/ Pt (111): a benchmark gas/ surface interaction potential. *J Chem Phps*, 1992, 97: 5849 ~ 5850
- 5 Rettner Ct, Barker J A and Bethune D S. Angular and velcity distributions characteristic of the transition between the thermal andstructure regimes of gas-surfacc scattering. *Phys Rev Lett*, 1991, 67: 2183 ~ 2186
- 6 Jih C T R and Hurlbut F C. Time of flight studies of argom beamsscattered from a silver (111) crystal surface. In: Pot-
ter JL Ed. Progress in aeronautics and astronautics Vol 51, RGD 10, 539 ~ 554, AIAA, New York. 1976
- 7 Subbarao R B and Miller D G. Velocity distribution measurements of 0. 06 ~ 1. 4 eV neon and argon atoms scattered from the (111) plane of a silver crystal. *J Chem Phys*, 1973, 58: 5247 ~ 5257
- 8 Wiskerke A E, Greutzbroek F H, Keyns A W and Hayden B E. Amolecular beam study of the O2-Pt (111) interac-
tion. *SurfaceScience*, 1992, 272: 256 ~ 263
- 9 Hurst J E, Wharton L, Janda K C and Auerbach DJ. Directinelastic scattering of Ar from Pt (111). *J Chem Phys*, 1983, 78: 1559 ~ 1581P
- 10 van Slooten U, Kirchner EJ J and Kleyn A W. Classical trajectory study of fast H² Scattering from Ag (111). *Sur-
faceScience*, 1993, 283: 27 ~ 35
- 11 van Slooten U, Andersson O, Kleyn A W and Gislason E A. Scattering of fast molecular hydrogen from Ag (111). *SurfaceScience*, 1992, 274: 1 ~ 20

1) 指 Hurlbut-Sherman-Nocihl 模型。

- 12 Head-Gordon M, Tully J C, Rettner C T, Mullins C B and Auerbach D J. On the nature of trapping and desorption at high surface temperatures. Theory and experiments for the Ar-Pt (111) system. *J Chem Phys*, 1991, 94: 1516 ~ 1527
- 13 Carter L E, Khodabandeh S, Weakliem P C and Carter E A. First-principles-derived dynamics of F₂ reactive scattering on Se (100) 2 × 1. *J Chem Phys*, 1994, 100: 2277 ~ 2288
- 14 Weber T A and Stillinger F H. Dynamical branching during fluorination of the dimerized Si (100) surface: a molecular dynamics study. *J Chem Phys*, 1990, 92: 6239 ~ 6245
- 15 Onji A. Scattering of rare gases for the contaminated metal plane. In: Oguchi H. Ed. *Rarefied Gas Dynamics*. Univ. of Tokyo Press, 1984. 376 ~ 382
- 16 Hurlbut F C. Sub-satellites for aerothermodynamic studies in the lower thermosphere. In: Wood G Ed. *Fourth Int Conf on Tethers in Space*. 211 ~ 220. NASA, 1995
- 17 Knechtel E D and Pitts W C. Normal and tangential momentum accommodation for earth satellite conditions. *Astro Acta*. 1973, 18: 171 ~ 183
- 18 Doughty R O and Schaeztle W J. Experimental determination of momentum accommodation coefficients at velocities up to and exceeding earth escape velocities. Trilling L and Wachman H Y Ed. *Rarefied Gas Dynamics*. New York: Academic Press, 1969. 1035 ~ 1054
- 19 Thomas L B and Lord R G. Comparative measurement of tangential momentum and thermal accommodation on polished and roughened steel spheres. In Karamcheti R Ed. *Rarefied Gas Dynamics*. New York: Academic Press, 1974. 405 ~ 412
- 20 Abauf N and Marsden D G H. Momentum accommodation of argon in the 0.06 to 5.0 eV range. In: Brundin C L Ed. *Rarefied Gas Dynamics*. New York: Academic Press, 1967. 199 ~ 210
- 21 Mair W N, Viney B W and Colligan J S. Experiments on the accommodation of normal momentum. In: Brundin C L Ed. *Rarefied Gas Dynamics*. New York: Academic Press, 1967. 187 ~ 189
- 22 Hurlbut F C. Particle interactions in the orbital context: a survey. In: Muntz E P, Weaver D P and Campbell A H Ed: *Progress in aeronautics and astronautics*. Vol. 116, RGD 16, 419 ~ 450, AIAA, 1989, New York
- 23 Lyons D T. Measuring the thermal accommodation coefficient while aerobraking magellan. In: Harvey J K and Lord R G Ed. *Rarefied Gas Dynamics 19*. Oxford: Oxford University Press, 1994. 1408 ~ 1414
- 24 Legge H, Nanbu K and Igarashi S. Force and heat transfer on a disk in rarefied flow. In: Beylich A E Ed: *Rarefied Gas Dynamics*. Aachen. V C H, Weinheim, 1991. 679 ~ 686
- 25 Legge H. Heat transfer and forces on a blunted 70 deg half angle cone measured in hypersonic free jet flow. IB222-93A DLR, Gottingen, 1992
- 26 Dogra V K, Moss J N, Wilmoth R G, Taylor J C and Hassan H A. Blunt body rarefied wake for earth entry. *J. Thermophysics and Heat Transfer*, 1995, 9: 464 ~ 470
- 27 Hurlbut F C and Sherman F S. Applications of the Nocilla wall reflection model to free molecule kinetic theory. *Phys Fluids*, 1968, 11: 486 ~ 496
- 28 Hurlbut F C. Two contrasting modes for the description of wall-gas interactions. In: Shizgal B D and Weaver D P Ed: *Rarefied Gas Dynamics*, 494 ~ 506. Vol. 158 Progress Series AIAA Wash. DC, 1994
- 29 Collins F G and Knox E C. Method for determining wall boundary conditions at high speed ratios. AIAA Paper 94-0036, 1994
- 30 Gaposchkin E M. Calculation of satellite drag coefficients. Technical report 998, Lincoln Laboratory, MIT, 1994
- 31 Boring J W and Humphris R R. Momentum transfer to solid surfaces by N₂ molecules in the energy range 7-200 eV. Trilling L and Wachman H Y Ed: *Rarefied Gas Dynamics*. New York: Academic Press, 1969. 1303 ~ 1310

中国科学院力学研究所 赵大刚 何川萍译自：
Rarefied Gas Dynamics 20

——Proceedings of the 20th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics,
edited by Shen Ching, Beijing: Peking University Press, 1997. pp. 355 ~ 357

中国科学院力学研究所 沈青校