

球体-平面黏附模型分析

樊康旗, 霍海东, 王波

(西安电子科技大学机电工程学院, 710071, 西安)

摘要: 为确定 Bradley 黏附模型与 Hamaker 假设黏附模型之间的关系和差异, 运用 Hamaker 假设和原子间的 Lennard-Jones 势能推导出了两平面间的相互作用力, 通过与平面间的 Lennard-Jones 势能进行对比分析, 得到了原子势参数与平面势参数间的关系式. 根据此关系式将 Bradley 模型转化为由 Hamaker 常数描述的黏附模型, 并根据 Hamaker 常数的定义式将 Bradley 模型最终转化为由原子势参数和 Hamaker 常数描述的黏附模型. 理论分析与仿真结果表明, 基于 Hamaker 假设的黏附模型与 Bradley 黏附模型完全一致, 证实了原子势参数与平面势参数间关系式的正确性, 为采用连续介质力学方法研究微观离散世界的黏附问题提供了理论基础.

关键词: 黏附; Bradley 模型; Hamaker 假设; Lennard-Jones 势能

中图分类号: TN16; O48 **文献标志码:** A **文章编号:** 0253-987X(2011)11-0106-06

Adhesion Between Sphere and Plane

FAN Kangqi, HUO Haidong, WANG Bo

(School of Electrical & Mechanical Engineering, Xidian University, Xi'an 710071, China)

Abstract: To determine the relationship between the Bradley model and the Hamaker hypotheses-based adhesion model, the Hamaker hypotheses and interatomic Lennard-Jones potential are employed to obtain the interaction force between two planes. The comparison of the interaction force obtained with the interfacial Lennard-Jones potential is conducted to determine the definite relationships between the parameters of the interatomic potential and that of the interfacial potential, by which the Bradley model is expressed in terms of Hamaker constant. The definition of Hamaker constant, the Bradley model is further described by interatomic potential parameters and Hamaker constant. Theoretical analysis and numerical simulation indicate that the Bradley model is identical to the Hamaker hypotheses-based adhesion model. The relationships between the parameters of the interatomic potential and that of the interfacial potential are confirmed.

Keywords: adhesion models; Bradley model; Hamaker hypotheses; Lennard-Jones potential

微机电系统(MEMS)是将微型机构、微型传感器、微型执行器等集于一体的微型器件和系统, 具有体积小、质量轻、能耗低等优点, 在医疗器械、航空航天、汽车工业等领域具有潜在的应用前景. 随着 MEMS 技术的发展与进步, 器件的特征尺度不断减小, 面积力与体积力之比迅速增大, 因而宏观领域中

被忽略的表面间的黏附力对 MEMS 性能的影响日益突出, 有时甚至成为决定微系统能否工作的关键因素^[1-2]. 因此, 研究并控制黏附力已成为提高 MEMS 工作性能、实现产业化、并最终走向市场的关键.

目前, 关于黏附问题的研究主要有 3 条途径: ①

将 Dupre 黏着能与连续介质理论相结合进行求解计算^[3-4];②基于 Hamaker 假设,通过对原子间的作用力进行体积积分得到^[2,5-7];③采用分子动力学方法进行数值模拟分析^[8-9].在这 3 条途径中,有 2 种 Lennard-Jones 势能被广泛应用^[2,4,9-10],一种是原子间的 Lennard-Jones 势能,描述的参数(原子势参数)是势阱和零势能间距;另一种是平面间的 Lennard-Jones 势能,描述的参数(平面势参数)是 Dupre 黏着能和平面间的平衡间距. Bradley 根据平面间的 Lennard-Jones 势能建立了由平面势参数描述的两球体间的黏附模型^[3-4].田文超等^[7,11]根据 Hamaker 假设和原子间的 Lennard-Jones 势能,给出了由原子势参数描述的两球体间的黏附模型.由于原子势参数和平面势参数间的关系目前尚未得到明确定义,因此无法对上述 2 种黏附模型的关系和差异进行对比分析.

本文基于 Hamaker 假设和原子间的 Lennard-Jones 势能推导出两平面间的相互作用力表达式,通过与平面间的 Lennard-Jones 势能进行对比,给出了原子势参数与平面势参数之间的关系,并由此关系对上述 2 种黏附模型进行了对比分析.

1 Lennard-Jones 势能

1.1 平面间的作用力

两固体相互黏着接触后,其 Dupre 黏着能为^[12]

$$\Delta\gamma = \gamma_1 + \gamma_2 - \gamma_{12} \tag{1}$$

式中: γ_1 、 γ_2 分别为两固体表面的自由能; γ_{12} 为界面能.平面间的 Lennard-Jones 势能给出了距离为 z 的两平面间单位面积上的相互作用力^[13],即

$$f_1 = \frac{8\Delta\gamma}{3z_0} \left[\left(\frac{z_0}{z} \right)^9 - \left(\frac{z_0}{z} \right)^3 \right] \tag{2}$$

式中: z_0 为两平面间的平衡间距.根据式(2)可得两平面间单位面积上的相互作用力随间距的变化规律(见图 1).

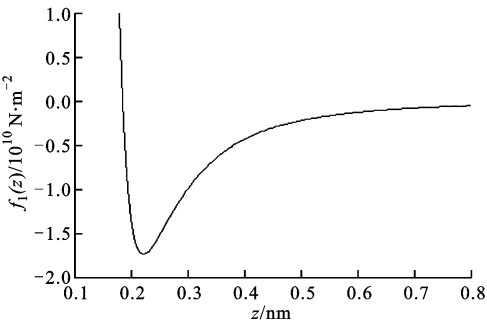


图 1 平面间的相互作用力随间距的变化

1.2 原子间的作用力

两原子间的相互作用可由 Lennard-Jones 势能定律表示为

$$\omega(l) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{l} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{l} \right)^6 \right] \tag{3}$$

式中: l 为原子间距; σ 为零势能间距; ϵ 为势阱.由式(3)可得到的两原子间的相互作用力为

$$f_2(l) = -\frac{d\omega}{dl} = \frac{12B}{l^{13}} - \frac{6A}{l^7}$$
$$A = 4\epsilon\sigma^6; \quad B = 4\epsilon\sigma^{12} = A\sigma^6 \tag{4}$$

式中: A 、 B 分别为引力和斥力系数.由式(4)可得两原子间的平衡间距为

$$l_0 = 2^{1/6}\sigma \tag{5}$$

根据式(4)可得的两原子间的相互作用力随间距的变化规律如图 2 所示.

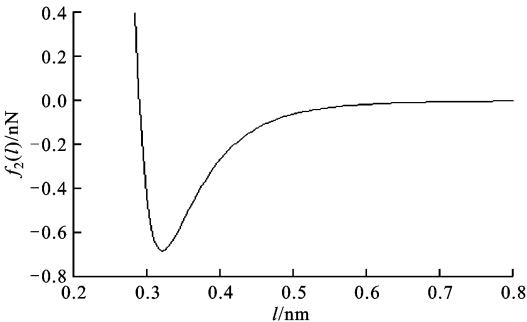


图 2 原子间的相互作用力随间距的变化

2 原子势参数与平面势参数

半径分别为 R_1 和 R_2 的两球体间的黏附模型可等效为 $R=R_1R_2/(R_1+R_2)$ 的球体与平面间的黏附模型^[4].为了简化描述,本文将球体间的黏附、球体与平面间的黏附统称为球体与平面的黏附.

2.1 原子-球体相互作用

原子与球体的相互作用如图 3 所示.在图 3 的坐标系中存在如下关系

$$l = [(d+R)^2 + r^2 - 2r(d+R)\cos\theta]^{1/2}$$
$$\cos\alpha = \frac{R+d-r\cos\theta}{l}$$

由对称性可知 $f_x = f_y = 0$, $f_z = f_1\cos\alpha$.根据 Hamaker 假设,原子与球体间的相互作用力为

$$f_{as}(d) = \rho_{sl} \int_{V_s} f_2(l) dV_s = f_{asl}(d) - f_{as2}(d) \tag{6}$$

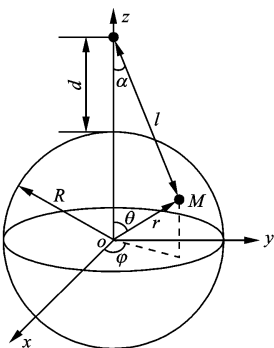
$$f_{asl}(d) = 12B\rho_{sl} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^R \frac{r^2 \sin\theta \cos\alpha}{l^{13}} dr d\theta d\varphi =$$
$$\frac{16\pi B\rho_{sl} R^3 (d+R) [d^2 + 2R(d+R)]}{5d^{10} (d+2R)^{10}} \cdot$$

$$\{5d^4 + 4R(d+R)[5d^2 + 8R(d+R)]\}$$

$$f_{as2}(d) = 6A\rho_{s1} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^R \frac{r^2 \sin\theta \cos\alpha}{l^7} dr d\theta d\varphi =$$

$$\frac{8\pi A\rho_{s1} R^3 (d+R)}{d^4 (d+2R)^4}$$

式中: ρ_{s1} 为球体数字密度.



d : 原子与球面的间距; l : 原子与球体上任意一点 M 的间距;
 r : 坐标原点与点 M 间的距离; R : 球体的半径; α : z 轴的
 负向夹角; θ : z 轴的正向夹角; φ : x 轴的正向夹角

图3 原子-球体相互作用的示意图

2.2 球体-平面相互作用

如图4所示,球面与平面上点 k 的间距为

$$d_k = [(R+h)^2 + r^2]^{1/2} - R$$

根据 Hamaker 假设,球体与平面上环形区域 $[r, r+dr]$ 间的相互作用力为

$$f_{ss}(h) = f_{ss1}(h) - f_{ss2}(h) =$$

$$\rho_{s2} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \int_r^{r+dr} f_{as1}(d) \cos(\beta) r dr dz d\varphi -$$

$$\rho_{s2} \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \int_r^{r+dr} f_{as2}(d) \cos(\beta) r dr dz d\varphi$$

式中: ρ_{s2} 为平面的数字密度. 当 $dr \rightarrow 0$ 时,球体与平面上单位面积的相互作用力为

$$f_d(h) = f_{d1}(h) - f_{d2}(h) = \lim_{dr \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi r dr} f_{ss}(h) =$$

$$\lim_{dr \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi r dr} [f_{ss1}(h) - f_{ss2}(h)] \quad (7)$$

根据 Hamaker 常数^[5]的定义

$$H = \pi^2 A \rho_{s1} \rho_{s2} \quad (8)$$

$f_{d1}(h)$ 和 $f_{d2}(h)$ 可分别表示为

$$f_{d1}(h) = \frac{4HR^3\sigma^6}{45\pi(h^2 + 2hR + r^2)^9} [15h^6 + 15r^6 +$$

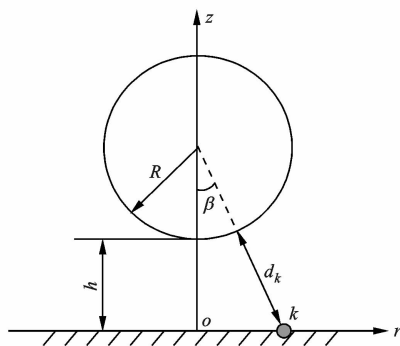
$$90h^5R + 108r^4R^2 + 216r^2R^4 + 128R^6 +$$

$$9h^4(5r^2 + 32R^2) + 12h^3(15r^2R + 46R^3) +$$

$$9h^2(5r^4 + 44r^2R^2 + 72R^4) +$$

$$18h(5r^4R + 24r^2R^3 + 24R^5)]$$

$$f_{d2}(h) = \frac{4HR^3}{3\pi(h^2 + 2hR + r^2)^3}$$



h : 球面与平面的间距; β : z 轴的负向夹角

图4 球体-平面相互作用的示意图

2.3 平面-平面相互作用

当 $R \rightarrow \infty$ 时,球体趋向于平面,因而式(7)可简化为

$$f'_d(h) = \lim_{R \rightarrow \infty} [f_d(h)] = \frac{H\sigma^6}{45\pi h^9} - \frac{H}{6\pi h^3} \quad (9)$$

式(9)描述了平面与另一平面单位面积上的相互作用力. 根据式(9),间距为 h 的两平面单位面积上的相互作用力为

$$f(h) = \lim_{s \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi s^2} \int_0^{2\pi} \int_0^s f'_d(h) r dr dz d\varphi =$$

$$\frac{H\sigma^6}{45\pi h^9} - \frac{H}{6\pi h^3} \quad (10)$$

令 $f(h)=0$, 可得两平面间的平衡间距为

$$z_0 = \left(\frac{2}{15}\right)^{1/6} \sigma \quad (11)$$

由于 Dupre 黏着能的定义是将两平面从其平衡间距移至无穷远处所做的功^[14], 即

$$\Delta\gamma = - \int_{z_0}^\infty f(h) dh = \frac{H}{16\pi z_0^2} \quad (12)$$

因此式(10)可被表述为

$$f(h) = \frac{8\Delta\gamma}{3z_0} \left[\left(\frac{z_0}{h}\right)^9 - \left(\frac{z_0}{h}\right)^3 \right] \quad (13)$$

式(13)与式(2)给出的平面间作用力是完全相同的.

2.4 原子势参数与平面势参数

由于 σ 与 z_0 的相互关系可由式(11)给出, 因此对比式(5)和式(11)可得原子间的平衡间距与 z_0 的关系如下

$$l_0 = (15)^{1/6} z_0 \quad (14)$$

由式(14)可知,原子间的平衡间距与平面间的平衡间距并不相同,如果产生黏附的两平面为同一种材料,则 Hamaker 常数为

$$H = \pi^2 A \rho_{s1}^2 \quad (15)$$

$$\rho_{sl} = \frac{3}{4\pi r_0^3}, \quad r_0 = l_0/2 \tag{16}$$

式中: r_0 为原子半径. 将引力系数、式(16)代入式(15), 可将 Hamaker 常数表示为

$$H = 72\epsilon \tag{17}$$

根据式(8)、(12)和式(17), Hamaker 常数可表述为以下 3 种形式

$$H = \pi^2 A \rho_1 \rho_2 = 16\pi z_0^2 \Delta\gamma = 72\epsilon \tag{18}$$

因此, Dupre 黏着能与势阱间的关系为

$$\Delta\gamma = \frac{9\epsilon}{2\pi z_0^2} \tag{19}$$

当产生黏附的两平面的材料并不相同时, 势阱和零势能间距可通过 Lorentz-Berthelot 混合规则^[15]得到

$$\sigma_{12} = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2) \tag{20}$$

$$\epsilon_{12} = (\epsilon_1 \epsilon_2)^{1/2} \tag{21}$$

当原子势参数 σ_{12} 和 ϵ_{12} 得到后, z_0 和 $\Delta\gamma_{12}$ 可通过式(11)和式(19)获得.

3 黏附模型分析

3.1 Bradley 黏附模型

Bradley 将原子之间的作用力考虑为表面之间的作用力, 并使用抛物面近似表示球面, 得到 $h = r^2/2R$. Bradley 用 $f_1(z)$ 表示单位面积上的作用力, 得到球体与平面间的黏附力为

$$f_{sp}(z) = \int_0^\infty 2\pi r f_1(z) dr = 2\pi R \int_0^\infty f_1(z) dh \tag{22}$$

将式(2)代入式(22)得到

$$f_{sp}(z) = 2\pi R \Delta\gamma \left[\frac{1}{3} \left(\frac{z_0}{z} \right)^8 - \frac{4}{3} \left(\frac{z_0}{z} \right)^2 \right] \tag{23}$$

式(23)一般也被称为 Bradley 方程^[16].

3.2 Hamaker 假设黏附模型与分析

田文超等^[7,11]根据 Hamaker 假设和原子间的 Lennard-Jones 势能, 给出

$$f_{sp}(z) = \frac{TR}{180z^8} - \frac{HR}{6z^2}, \quad T = \pi^2 B \rho_1 \rho_2 \tag{24}$$

在 Hamaker 假设的黏附模型中, 斥力和引力的特性分别由 T 和 H 决定, 而在 Bradley 黏附模型中, 斥力和引力的特性则分别由 $\Delta\gamma$ 和 z_0 决定. 根据式(19), 式(23)可化为

$$f_{sp}(z) = \frac{3R\epsilon z_0^6}{z^8} - \frac{12R\epsilon}{z^2} \tag{25}$$

由式(11), 式(25)可转化为

$$f_{sp}(z) = 72\epsilon \sigma^6 \frac{R}{180z^8} - \frac{12R\epsilon}{z^2} \tag{26}$$

根据式(18)、式(4), 式(26)可表达和简化为

$$f_{sp}(z) = H\sigma^6 \frac{R}{180z^8} - H \frac{R}{6z^2} \tag{27}$$

$$f_{sp}(z) = T \frac{R}{180z^8} - H \frac{R}{6z^2} \tag{28}$$

Bradley 黏附模型和 Hamaker 假设的黏附模型给出的黏附力如图 5 所示. Bradley 黏附模型是一种连续介质的力学模型, 而 Hamaker 假设的黏附模型通过对原子间的作用力进行体积分得到, 这表明 Hamaker 假设黏附模型具有微观世界离散模型的特性. 对比式(24)和式(28)可知, Hamaker 假设的黏附模型与 Bradley 黏附模型完全一致, 这表明 Hamaker 假设为采用连续介质力学方法研究微观离散世界的黏附问题提供了一条思路. Greenwood^[17]指出, 当归一化参数 $\rho = R/z_0 < 10$ 时, 原子间的相互作用力具有明显的离散特性, 需采用离散的黏附模型(如原子力学模型)来研究球体与平面间的黏附特性. 当 $\rho \geq 10$ 时, 原子间作用力的离散特性并不明显, 可采用连续介质力学模型来研究球体与平面间的黏附问题. 对于连续介质力学模型, Johnson 等^[18]通过 Tabor 数($\mu = (R\Delta\gamma^2/E^2 z_0^3)^{1/3}$)给出了现有黏附理论的应用范围, 并指出 Bradley 黏附模型的 Tabor 数 μ 小于 0.1. 本文的研究结果表明, 基于 Hamaker 假设的黏附模型与 Bradley 黏附模型完全一致, 在本文的计算条件下, $\mu = 0.012$, 因此可根据 Hamaker 假设将离散的黏附问题转化为连续介质问题进行处理.

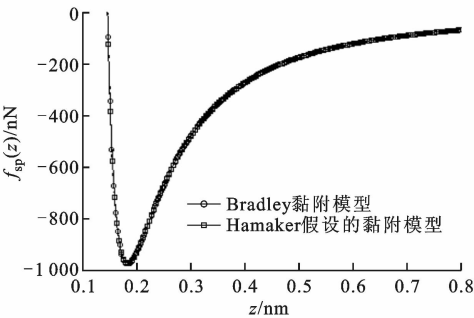


图 5 本文势参数下黏附力随间距的变化

原子势参数与平面势参数的相互关系对黏附模型中参数值的确定非常重要, 随着分子动力学的发展

展,越来越多的原子势能被确定,根据本文得到的原子势参数与平面势参数间的关系,可直接得到连续介质黏附模型所需的平面势参数.在对黏附问题的以往研究中,由于对 z_0 的准确值并不明确,Muller等^[13]和 Attard等^[19]对 z_0 在 0.3 nm 和 0.6 nm 之间随意取值.Yu等^[14]认为,由于研究人员过去只关注基于连续介质力学的黏附模型,或者对黏附模型进行了归一化处理,因此并不需要研究原子势参数与平面势参数的相互关系.但是,随着 MEMS 技术的发展,器件的尺度不断减小,原子间的 Lennard-Jones 势能也被广泛地用于材料间黏附、接触、摩擦、磨损等问题的研究^[9,20],如果原子势参数与平面势参数间的相互关系得不到正确的定义,则有可能得出错误的结论.例如,当平面势参数中的 z_0 取为 0.4 nm(Attard等^[19]将 z_0 取为 0.4 nm)并保持与其他参数间的关系正确时,Bradley 黏附模型给出的黏附力则远小于 Hamaker 假设的黏附模型给出的黏附力,如图 6 所示.但是,根据本文推导出的原子势与平面势参数间的关系,这 2 种黏附模型是完全一致的.

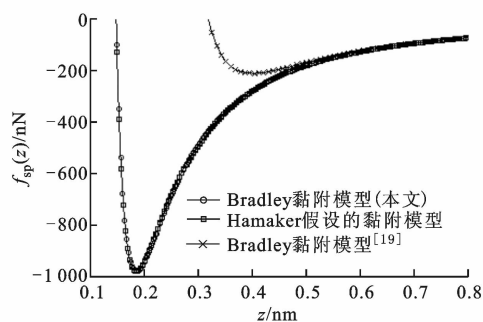


图6 不同势参数下黏附力随间距的变化

4 结 论

本文采用 Hamaker 假设和原子间的 Lennard-Jones 势能推导出两平面间的相互作用力,通过与平面间的 Lennard-Jones 势能进行对比分析,得到了原子势参数与平面势参数之间的关系式和 Hamaker 常数的 3 种表达式.根据原子势参数与平面势参数间的关系式,研究了 Bradley 黏附模型与 Hamaker 假设的黏附模型间的相互关系.结果表明,Bradley 黏附模型与 Hamaker 假设的黏附模型完全一致,这表明 Hamaker 假设对微观离散世界黏附问题的研究具有可行性.本文通过 Tabor 数给出了黏附模型的定义域,同时证实了 Hamaker 常数的 3 种表达式、原子势参数与平面势参数之间关系式

的正确性,从而为离散黏附模型和连续介质模型之间的对比分析提供了理论基础.

参考文献:

- [1] HARIRI A, ZU J W, MRAD R B. Modeling of dry stiction in micro electro-mechanical systems [J]. Journal of Micromechanics and Microengineering, 2006, 16 (7): 1195-1206.
- [2] 樊康旗,贾建援,朱应敏,等.原子力显微镜在轻敲模式下的动力学模型[J].物理学报,2007,56(11): 6345-6351.
FAN Kangqi, JIA Jianyuan, ZHU Yingmin, et al. Dynamic model of atomic force microscopy in tapping-mode [J]. Acta Physica Sinica, 2007, 56(11): 6345-6351.
- [3] BRADLEY R S. The cohesive force between solid surfaces and the surface energy of solids [J]. Philosophical Magazine, 1932, 13(86): 853-862.
- [4] GREENWOOD J A. Adhesion of elastic spheres [J]. Proceedings of the Royal Society of London: A, 1997, 453(9): 1277-1297.
- [5] HAMAKER H C. The London-van der Waals attraction between spherical particles [J]. Physica, 1937, 4 (10): 1058-1072.
- [6] 樊康旗,贾建援,朱应敏,等.基于 Hamaker 假设的黏着接触弹性模型[J].西安交通大学学报,2007,41 (5): 606-610.
FAN Kangqi, JIA Jianyuan, ZHU Yingmin, et al. Elastic model of adhesive contact based on Hamaker hypotheses [J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2007, 41(5): 606-610.
- [7] 田文超,贾建援. Hamaker 均质材料假设修正 [J]. 物理学报,2003,52(5): 1061-1065.
TIAN Wenchao, JIA Jianyuan. Amelioration of the Hamaker homogeneous material hypothesis [J]. Acta Physica Sinica, 2003, 52(5): 1061-1065.
- [8] LUAN B, ROBBINS M O. Contact of single asperity with varying adhesion: comparing continuum mechanics to atomistic simulations [J]. Physical Review: E, 2006, 74(2): 026111.1-026111.17
- [9] LUAN B Q, ROBBINS M O. The breakdown of continuum models for mechanical contacts [J]. Nature, 2005, 435(24): 929-932.
- [10] FENG J Q. Adhesive contact of elastically deformable spheres: a computational study of pull-off force and contact radius [J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2001, 238(2): 318-328.
- [11] 田文超,贾建援. AFM 针尖-试样面作用力连续介质

方法研究 [J]. 中国机械工程, 2003, 14(22): 1903-1905.

TIAN Wenchao, JIA Jianyuan. Research on force between tip of AFM and sample by continuum medium [J]. China Mechanical Engineering, 2003, 14(22): 1903-1905.

[12] MAUGIS D. Adhesion of spheres: the JKR-DMT transition using a Dugdale model [J]. Journal of Colloid and Interface Science, 1992, 150(1): 243-269.

[13] MULLER V M, YUSHCHENKO V S, DERJAGUIN B V. On the influence of molecular force on the deformation of an elastic sphere and its sticking to a plane [J]. Journal of Colloid and Interface Science, 1980, 77(1): 91-101.

[14] YU N, POLYCARPOU A A. Adhesive contact based on the Lennard-Jones potential: a correction to the value of the equilibrium distance [J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2004, 278(2): 428-435.

[15] HITCHCOCK M R, HALL C K. Solid-liquid phase equilibrium for binary Lennard-Jones mixtures [J]. Journal of Chemical Physics, 1999, 110(23): 11433-11444.

[16] JOHNSON K L, KENDALL K, ROBERT A D. Surface energy and the elastic solids [J]. Proceedings of the Royal Society of London: A, 1971, 324(1558): 301-313.

[17] GREENWOOD J A. Adhesion of small spheres [J]. Philosophical Magazine, 2009, 89(11): 945-965.

[18] JOHNSON K L, GREENWOOD J A. An adhesion map for the contact of elastic spheres [J]. Journal of Colloid and Interface Science, 1997, 192(2): 326-333.

[19] ATTARD P, PARKER J L. Deformation and adhesion of elastic bodies in contact [J]. Physical Review: A, 1992, 46(12): 7959-7971.

[20] FAN K Q, JIA J Y, ZHU Y M, et al. Adhesive contact: from atomistic model to continuum model [J]. Chinese Physics: B, 2011, 20(4): 043401.1-043401.9.

(编辑 管咏梅)