

基于 Hamaker 假设的黏着接触弹性模型

樊康旗¹, 贾建援¹, 朱应敏¹, 陈光焱²

(1. 西安电子科技大学机电工程学院, 710071, 西安; 2. 中国工程物理研究院电子工程研究所, 621900, 绵阳)

摘要: 为研究微纳米系统中的黏着接触问题, 基于 Hamaker 假设和 Lennard-Jones 的势能定律, 通过积分方法得到了球体与平面间的黏着力, 同时结合经典弹性理论建立了一种新型的球体与平面黏着接触的弹性模型. 该模型可以同时得到平面轮廓随间距的变形过程及黏着力和平面变形量随间距的变化规律, 当球体半径较大时, 所建模型与基于 Derjaguin 近似的黏着模型给出的结果基本一致, 随着球体半径的逐渐减小, 2 种模型的差异逐渐增大, 这是由于 Derjaguin 近似的误差随球体半径的减小而增大引起的. 因此, 当球体的半径趋近纳米级时, 基于 Hamaker 假设的黏着接触模型消除了 Derjaguin 近似所带来的误差, 可以更加准确地给出黏着力和平面变形量随间距的变化规律.

关键词: 黏着接触; 弹性模型; Hamaker 假设; 微纳米系统

中图分类号: O48; TH724 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-987X(2007)05-0606-05

Elastic Model of Adhesive Contact Based on Hamaker Hypotheses

Fan Kangqi¹, Jia Jianyuan¹, Zhu Yingmin¹, Chen Guangyan²

(1. School of Electro-Mechanical Engineering, Xidian University, Xi'an 710071, China; 2. Institute of Electronic Engineering, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China)

Abstract: Based on Hamaker hypotheses and Lennard-Jones potential, the adhesive force between a sphere and a plane is revealed with an integral method. Simultaneously, a novel model of adhesive contact between a rigid sphere and an elastic plane is established to investigate the adhesion problems in micro- and nano-systems, which is capable of obtaining the variations with the distance of the adhesive force, the deformation and the contour of the plane. For a large sphere, the results from the proposed model are coincident with that from the model based on the Derjaguin approximation. For a nano-scale sphere, the discrepancies appear between the two models due to the increased the error of the Derjaguin approximation with decreasing spheres. So for a nano-scale sphere, the proposed model enables to lead more accurate solutions.

Keywords: adhesive contact; elastic model; Hamaker hypotheses; micro/nano-system

随着器件特征尺寸的不断减小, 黏着接触问题对微纳米系统性能的影响日益突出^[1]. 为了研究发生在固体界面上原子、分子尺度范围内的黏着、接触、变形及摩擦等微观现象, 必须将由表面能所引起的黏着力与经典接触理论相结合, 发展微尺度的黏着接触理论.

Johnson 等^[2]通过 Griffith 能量方法提出了

JKR 黏着接触理论, Derjaguin 等^[3]根据 Bradley 理论^[4]给出了考虑接触表面黏着作用的 DMT 理论. 但是, 由于 JKR 理论和 DMT 理论给出的最大黏着引力并不相同, Tabor^[5]引入了归一化的 Tabor 数来解释这 2 种理论的矛盾, 即 JKR 和 DMT 理论分别在 Tabor 数较大和较小时能给出与实验符合较好的结果. Maugis^[6]基于 Dugdale 模型建立了适用

于 JKR 理论与 DMT 理论过渡区域的 MD 理论. 由于黏着力和表面变形随间距的变化而具有非线性特性, 因此 Muller 等^[7]基于 Derjaguin^[3]近似提出的数值算法被认为是研究黏着接触问题的更准确的方法, 并被广泛地用于黏着接触、纳米摩擦和 AFM (Atomic Force Microscopy) 扫描成像等研究^[8-10].

由于 Derjaguin 近似仅在当球面半径与两球面间距之比较大时准确^[11], 因此 Argento 等^[12]提出了一种基于 Hamaker 假设的新思路来研究半径在纳米量级的两刚性球体间的黏着力. 本文旨在基于 Hamaker 假设^[13]和 Lennard-Jones 势能定律^[7]建立一种新型的纳米级黏着接触弹性模型, 研究当球面半径接近纳米量级时, 黏着力和表面变形量等随间距的变化规律.

1 Lennard-Jones 势和 Hamaker 假设

1.1 Lennard-Jones 势能定律

在微观世界中, 两原子间的相互作用(黏着能)由 Lennard-Jones 势能定律描述为^[7]

$$W(l) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{l} \right)^6 - \left(\frac{\sigma}{l} \right)^{12} \right] \quad (1)$$

式中: ϵ 为势阱参数; σ 为零势能间距; l 为两原子间距.

两原子间的黏着力可通过对 Lennard-Jones 势能求导得到

$$F_a(l) = \frac{dW(l)}{dl} = -\frac{6A}{l^7} + \frac{12B}{l^{13}} \quad (2)$$

式中: $A=4\epsilon\sigma^6$ 为引力系数; $B=4\epsilon\sigma^{12}$ 为斥力系数, 且 $B=A\sigma^6$.

1.2 Hamaker 假设

由于物质在微观世界具有离散性, 为了采用连续方法计算两物质间的相互作用, Hamaker 提出了 3 个假设^[13], 为采用连续方法解决微观物质世界的离散问题奠定了理论基础: ①可加性假设, 任何 2 个物体间的作用力由构成 2 个物体的原子对之间的作用力累加求和得到; ②连续介质假设, 每个原子所占体积为 dV , 作用力的累加求和可以通过对相互作用的两物体进行体积积分得到, 并且任何物体均由数字密度为 ρ 的 dV 连续构成; ③均质材料假设, 数值密度和相互作用力系数对任何物体保持不变.

根据 Hamaker 假设, 通过数字密度分别为 ρ_1 和 ρ_2 的两物体间的黏着力, 可对其进行体积积分得到总原子力

$$F = \rho_1 \rho_2 \int_{V_2} \int_{V_1} F_a(l) dV_1 dV_2 \quad (3)$$

2 黏着接触弹性模型的建立

由于两球体间的接触通常被认为是研究纳米黏着接触问题的基本模型, 且两球体间的接触可以等效为刚性球体与弹性平面的接触或弹性球体与刚性平面的接触, 所以本文将纳米黏着接触问题简化为刚性球体与弹性平面的接触.

2.1 原子-球体黏着模型

原子与球体的黏着作用如图 1 所示, 在图 1 坐标系中存在如下关系

$$l = [(d+R)^2 + r^2 - 2r(d+R)\cos\theta]^{1/2} \quad (4)$$

$$\cos\alpha = (R+d-r\cos\theta)/l \quad (5)$$

由对称性可知 $F_x = F_y = 0$, $F_z = F\cos\alpha$, 根据 Hamaker 假设, 原子与数字密度为 ρ_s 的球体间的黏着力可通过将式(2)代入式(3)对球体进行积分得到

$$F_{as}(d) = \rho_s \int_{V_s} F(l) dV_s = -F_{as1}(d) + F_{as2}(d) \quad (6)$$

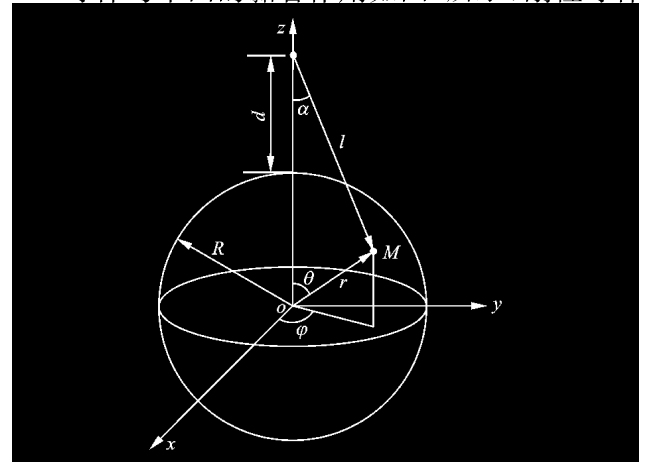
式中: $F_{as1}(d)$ 和 $F_{as2}(d)$ 分别为引力和斥力, 其积分结果为

$$F_{as1}(d) = 6A\rho_s \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^R \frac{r^2 \sin\theta \cos\alpha}{l^7} dr d\theta d\varphi = \frac{8\pi A\rho_s R^3 (d+R)}{d^4 (d+2R)^4} \quad (7)$$

$$F_{as2}(d) = 12B\rho_s \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^R \frac{r^2 \sin\theta \cos\alpha}{l^{13}} dr d\theta d\varphi = \frac{16\pi B\rho_s R^3 (d+R) [d^2 + 2R(d+R)]}{5d^{10} (d+2R)^{10}} \cdot [5d^4 + 4R(d+R)(5d^2 + 8R(d+R))] \quad (8)$$

2.2 球体-平面黏着模型

球体与平面的黏着作用如图 2 所示, 刚性球体



d : 原子与球体的间距; r : 球体上 M 点的半径; R : 球体的半径;

α : 原子与 M 点的连线与 z 轴的夹角; θ : $\overline{OM}$ 与 z 轴的

夹角; φ : $\overline{OM}$ 在 xoy 面的投影与 x 轴的夹角

图 1 原子与球体间的相互作用

与弹性平面间距在 r 处的实际间距为

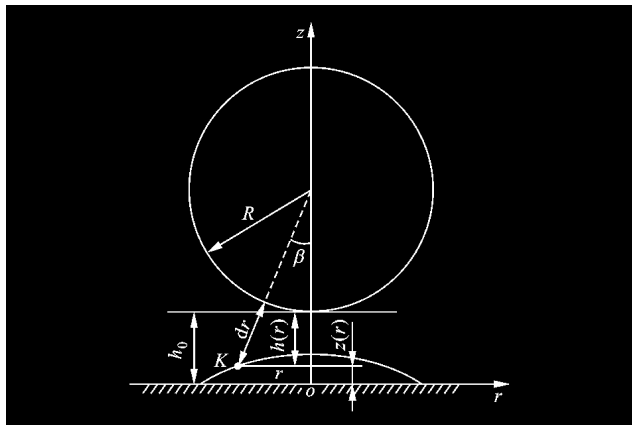
$$h(r) = h_0 + z(r) \quad (9)$$

球体与平面上 r 的任意一点的间距为

$$d(r) = \{[R + h(r)]^2 + r^2\}^{1/2} - R \quad (10)$$

同时,在图2坐标系中存在如下关系

$$\cos\beta = \frac{R + h(r)}{d(r) + R} \quad (11)$$



h_0 :球体与平面的名义间距; $z(r)$:平面上点K的变形量

图2 刚性球体与弹性平面的黏着接触

由球体与平面的对称性,根据 Hamaker 假设可得球体与平面上 $[r, r+dr]$ 环形区域的黏着力为

$$F_a(d) = -F_{a1}(d) + F_{a2}(d) \quad (12)$$

式中 d 由式(10)给出,而

$$F_{a1}(d) = \rho_p \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \int_r^{r+dr} F_{a1}(d) \cos\beta r dr dz d\varphi \quad (13)$$

$$F_{a2}(d) = \rho_p \int_0^{2\pi} \int_0^\infty \int_r^{r+dr} F_{a2}(d) \cos\beta r dr dz d\varphi \quad (14)$$

式中: ρ_p 为平面的数字密度. 式(13)、式(14)的积分结果很冗长,由于篇幅所限,其结果在此省略.

当 $dr \rightarrow 0$ 时,可得球体与平面上任意一点的黏着力,即黏着分布力(同时注意到 $F_d(d)$ 、 $F_{d1}(d)$ 、 $F_{d2}(d)$ 已转变为以 $h(r)$ 为变量的函数)为

$$F_d(h) = -F_{d1}(h) + F_{d2}(h) = \lim_{dr \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi r dr} F_a(d) = \lim_{dr \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi r dr} [-F_{a1}(d) + F_{a2}(d)] \quad (15)$$

其中

$$F_{d1}(h) = \frac{4HR^3}{3\pi(h^2 + 2hR + r^2)^3} \quad (16)$$

$$F_{d2}(h) = \frac{2HR^3 r_N^6}{45\pi(h^2 + 2hR + r^2)^9} [15h^6 + 15r^6 + 90h^5R + 108r^4R^2 + 216r^2R^4 + 128R^6 + 9h^4(5r^2 + 32R^2) + 12h^3(15r^2R + 46R^3) +$$

$$9h^2(5r^4 + 44r^2R^2 + 72R^4) + 18h(5r^4R + 24r^2R^3 + 24R^5)] \quad (17)$$

式中: r_N 为晶体中 2 原子的最近间距^[14],对于面心、体心和金刚石晶体, r_N 分别为 $2^{1/2}a/2$ 、 $3^{1/2}a/2$ 和 $3^{1/2}a/4$ (a 为晶格常数); H 为 Hamaker 常数^[7],即

$$H = \pi^2 A \rho_s \rho_p \quad (18)$$

2.3 球体-平面弹性黏着模型

将球体和平面原子间的相互作用力等效为球体与平面间的黏着分布力. 对于球体-平面弹性接触模型,黏着力分布具有轴对称性,由弹性理论^[15]可得 $F_d(h)$ 引起球面上任意一点的变形量为

$$z(\hat{r}) = \frac{1}{\pi E} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \frac{F_d(h)}{(\hat{r}^2 + r^2 - 2\hat{r}r\cos\theta)^{1/2}} r d\theta dr = \frac{4}{\pi E} \int_0^\infty \frac{r F_d(h)}{\hat{r} + r} k\left(\frac{2(\hat{r}r)^{1/2}}{\hat{r} + r}\right) dr \quad (19)$$

$$F = \int_0^{2\pi} \int_0^\infty F_d(h) r dr d\varphi \quad (20)$$

式中: $k(X)$ 为模 $X = 2(\hat{r}r)^{1/2}/(\hat{r} + r)$ 的第 1 类完全椭圆积分; E 为球体与平面的接触模量.

基于 Hamaker 假设,由式(9)、式(15)和式(19)确定的弹性纳米接触模型,结合了经典弹性理论和 Lennard-Jones 势能定律,同时考虑了平面的变形效应和球体与平面间的黏着力,可以处理黏着力为引力和斥力时的多种问题. 当 $h(r) > r_N$ 时,黏着力为引力($F_d(h) < 0$),平面被拉伸($z(r) < 0$);当 $h(r) < r_N$ 时,黏着力为斥力($F_d(h) > 0$),球面被压缩($z(r) > 0$).

3 结果与分析

为了对比分析基于 Hamaker 假设和 Derjaguin 近似的 2 种黏着模型,图3~图5给出了当球体半径分别为 50 nm、100 nm 和 200 nm 时,平面中心点 ($r=0$) 的变形量 $z(0)$ 随黏着力的变化曲线. 当球体与平面间距较大时,黏着力为引力,且导致的平面变形量较小,不易观察 2 种模型的差异. 为了同时减少计算时间和 2 种黏着模型的对比分析量,将球体与平面的初始间距取为 1.1 nm,而在此间距下,球体与平面间的黏着力和变形量并不为 0,所以图3~图5中的曲线起始点并不在原点. 由图3可见,当球体半径为 50 nm 时,2 种模型给出的结果相差较大,这是由于当球体半径较小时,Derjaguin 近似的误差较大引起的. 随着球体半径的逐渐增大,2 种黏着模型给出的平面变形量的差值逐渐减小,当球体半径为 200 nm 时,Derjaguin 近似的误差很小,2 种黏着模

型给出的曲线几乎完全相同。

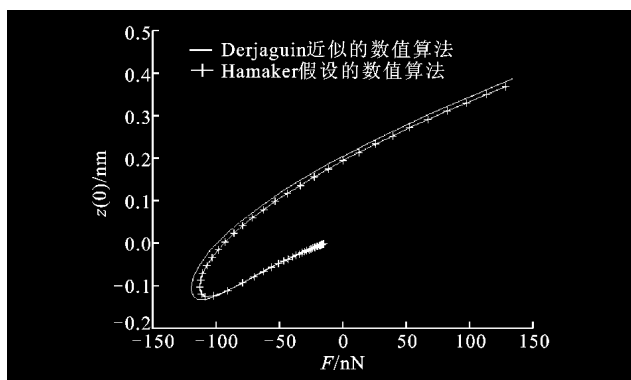


图3 z 随载荷的变形过程($R=50$ nm)

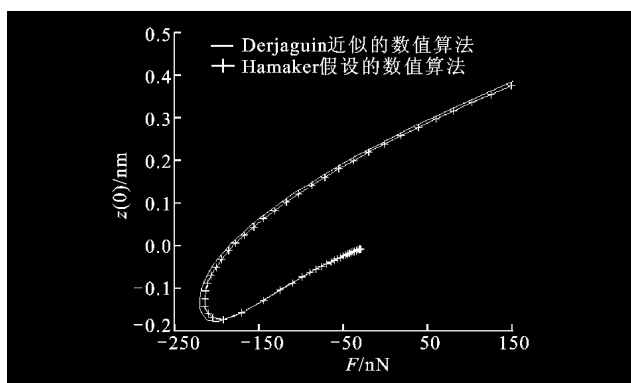


图4 z 随载荷的变形过程($R=100$ nm)

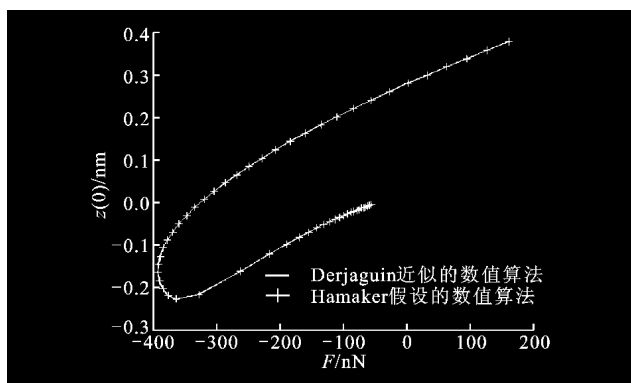


图5 z 随载荷的变形过程($R=200$ nm)

图6给出了当球体逐渐趋近平面时,平面轮廓的变形过程.图中平面的变形可分为2个阶段:实线为拉伸变形阶段,随着球体的逐渐趋近,平面在黏着引力作用下的拉伸量逐渐增大;虚线为压缩变形阶段,球体与平面相接触,在接触区内外,黏着力分别为斥力和引力,所以平面在接触区内外的部分分别被压缩和拉伸,随着球体的不断趋近,接触区域内平面的压缩变形量不断增大。

在 AFM 的扫描中,经常出现 AFM 的“突跳接触”现象^[16],即 AFM 针尖与样品突然接触或分离。

由于实际使用的 AFM 针尖的等效半径很小,且弹性模量很大,变形量很小,所以 Hamaker 假设的刚性球体与弹性平面的黏着接触模型可以反映出 AFM“突跳接触”的物理机理.图7给出了当半径为 50 nm 的球体逐渐趋近平面时,球体与平面的“突跳接触”过程.为了反映“突跳”现象随间距的变形过程,以及“突跳”过程中黏着力与平面变形量间的关系,图7给出了黏着力和平面变形量随间距的变化曲线.由图7可见,在发生“突跳接触”的过程中,间距的很小变化将引起平面拉伸变形的迅速增大,同时导致黏着引力的突然增加.由于黏着引力的突然变化会导致球体与平面组成的系统突然失稳,因此可以推断 AFM“突跳接触”的主要原因是由样品表面在黏着引力作用下发生拉伸变形,并与 AFM 针尖迅速接触引起的。

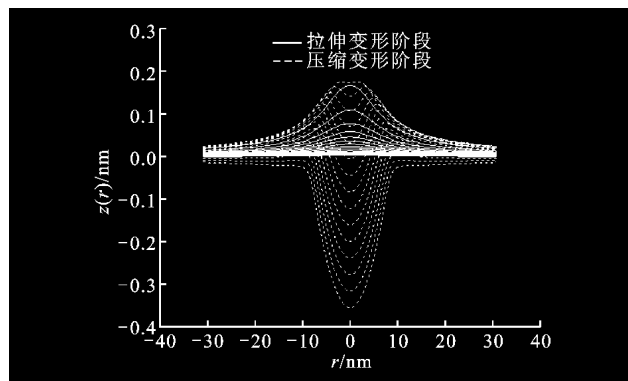


图6 平面轮廓曲线的变形过程

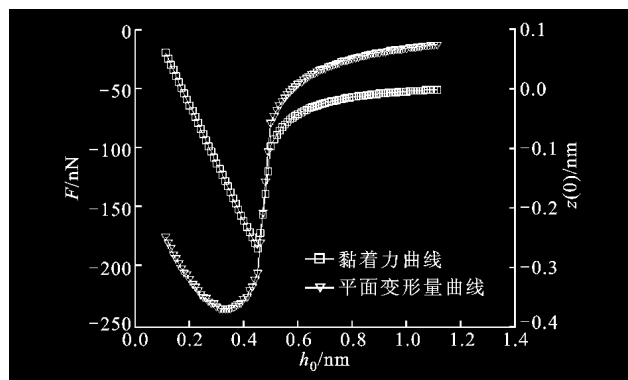


图7 AFM 中的“突跳接触”现象

4 结 论

本文基于 Hamaker 假设和 Lennard-Jones 势能定律,建立了刚性球体与弹性平面的纳米级黏着接触模型.当球体半径较大时,本文建立的模型与基于 Derjaguin 近似的黏着模型得出的结果基本一致.随着球体半径的逐渐减小,Derjaguin 的近似误差也逐渐增大,引起 2 种模型给出结果的差别逐渐

增大.因此,当球体的半径在纳米级时,基于 Hamaker 假设的黏着模型可以给出更加合理的结果.同时,根据所建模型研究了 AFM 的“突跳接触”机理,所得结论与现有的实验结果相一致,证实了所建模型在研究纳米级黏着接触问题中的有效性.

参考文献:

- [1] Boer M P, Michalske T A. Accurate method for determining adhesion of cantilever beams[J]. Journal of Applied Physics, 1999, 86(2): 817-827.
- [2] Johnson K L, Kendall K, Roberts A D. Surface energy and the contact of elastic solids[J]. Proceedings of the Royal Society of London, 1971, 324(1): 301-313.
- [3] Derjaguin B V, Muller V M, Toprov Y P. Effect of contact deformation on the adhesion of particles[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 1975, 53 (2): 314-326.
- [4] Bradley R S. The cohesive force between solid surfaces and the surface energy of solids [J]. Philosophical Magazine, 1932, 13: 853-862.
- [5] Tabor D. Surface forces and surface interactions[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 1977, 58 (1): 2-13.
- [6] Maugis D. Adhesion of sphere: the JKR-DMT transition using a Dugdale model[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 1992, 150(1): 243-269.
- [7] Muller V M, Yushchenko V S, Derjaguin B V. On the influence of molecular forces on the deformation of an elastic sphere and its sticking to a rigid plane[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 1980, 77(1): 91-101.
- [8] Attard P, Paker J L. Deformation and adhesion of elastic bodies in contact [J]. Physical Review: A, 1992, 46(12): 7959-7971.
- [9] Feng J Q. Contact behavior of spherical elastic particles: a computational study of particle adhesion and deformations[J]. Colloid and Surfaces A: 2000, 172 (3): 175-198.
- [10] 樊康旗, 贾建援. 微机械黏着接触问题的建模和分析 [J]. 西安交通大学学报, 2006, 40(11): 1280-1284. Fan Kangqi, Jia Jianyuan. Adhesive contact model and calculation of micro-mechanical systems[J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2006, 40(11): 1280-1284.
- [11] Jagota A, Argento C. An intersurface stress tensor [J]. Journal of Colloid and Interface Science, 1997, 191(2): 326-336.
- [12] Argento C, French R H. Parametric tip model and force-distance relation for Hamaker constant determination from atomic force microscopy[J]. Journal of Applied Physics, 1996, 80(11): 6081-6090.
- [13] Hamaker H C. The London-van der Waals attraction between spherical particles[J]. Physica, 1937, 10: 1058-1072.
- [14] Yu Ning, Polycarpou A A. Adhesive contact based on the Lennard-Jones potential: a correction to the value of the equilibrium distance as used in the potential[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2004, 278 (2): 428-435.
- [15] Johnson K L. Contact mechanics [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1985: 11-80.
- [16] Landman U, Luedtke W D, Nancy A B. Atomistic mechanisms and dynamics of adhesion, nanoindentation and fracture[J]. Science, 1990, 248(4): 454-461.

(编辑 管咏梅)

[文摘预登]

谱元方法求解含吸收边界的声学问题

许靖, 秦国良, 朱昌允

(西安交通大学流体机械研究所, 710049, 西安)

推导并实现了带吸收边界条件的二维波动方程的切比雪夫谱元解法. 该解法引入一阶 Clayton-Engquist-Majda 吸收边界条件, 在空间上利用谱元方法, 在时间上利用中心差分的积分方法得到波动方程的离散形式, 并给出具体算例进行了验证. 结果表明: 该解法在空间上具有谱精度, 在时间上达到二阶精度; 与第一类边界条件相比, 吸收边界有效地削弱了边界上的数值反射, 避免了解的失真; 使用的中心差分的时间积分方法相比于隐式积分方法, 也具有适合波传播特性、避免矩阵求逆运算和占用计算机内存小等优点.