

表面黏附导致的接触行为转变*

段芳莉[†] 杨继明 仇和兵 吴聪颖

(重庆大学机械传动国家重点实验室, 重庆 400030)

(2011年1月27日收到; 2011年3月5日收到修改稿)

应用大规模分子动力学方法, 模拟了具有不同原子级粗糙形貌的两种刚性球形探头与弹性平面基体的黏附接触行为. 研究了载荷与真实接触面积、接触界面排斥力与真实接触面积, 以及黏附力与真实接触面积之间的关系. 分子模拟得到的载荷与真实接触面积的关系, 与连续力学接触理论预测很好地定性一致. 无论是原子级光滑探头还是粗糙探头, 黏附接触下的排斥力与真实接触面积的关系, 都与无黏附接触时的规律相一致, 即黏附力对接触行为的影响作用, 可以等效为附加在真实外载荷基础上的虚拟载荷, 将对黏附接触行为的分析转变为无黏附接触分析. 两种探头的黏附力随真实接触面积都呈幂函数形式的增长, 但是, 原子级光滑探头的幂指数大于 1, 而原子级粗糙探头的幂指数小于 1.

关键词: 接触行为, 表面黏附, 分子动力学模拟

PACS: 62.20.Qp

1 引言

早在 1882 年, Hertz^[1] 提出了第一个均质、各向同性、线弹性球体的无黏附接触模型, 它表明真实接触面积是载荷的 $2/3$ 次方. 这之后发展的多个模型都考虑了表面黏附作用. 根据表面作用力程与它所引起弹性变形的相对大小、接触行为可分为两种极端情形: 当相对于引起的弹性变形, 表面力为短程作用时 (例如, 柔性材料、强黏附作用和较大的接触体半径), 接触行为由 Johnson-Kendall-Roberts (JKR) 模型^[2] 描述; 另一个极端 (例如, 刚性材料、弱黏附作用和较小的接触体半径) 由 Derjaguin-Muller-Toporov (DMT) 模型^[3] 描述. Maugis-Dugdale (MD) 理论^[4] 适于描述 JKR 模型和 DMT 模型之间的转变状态, 而被频繁使用. 所有这些单粗糙峰理论的共同特征是, 真实接触面积是载荷的亚线性函数. 另一方面, Greenwood-Williamson (G-W) 模型^[1]、Persson 模型^[5,6] 等粗糙接触理论也被发展起来, 它们都预测真实接触面积与载荷呈线性关系. 这些连续接触理论, 被大量

地应用于分析实验和模拟所得到的载荷 - 摩擦力数据, 以揭示摩擦力与接触面积的内在关系.

随着 MEMS/NEMS 的日益微型化, 一个关键问题是连续理论是否适用于纳米尺度接触. 应用分子动力学模拟, Luan 和 Robbins^[7,8] 研究了具有不同粗糙形貌的球形探头与晶体平面基体的弹性接触, 发现原子级粗糙形貌导致接触行为明显地偏离了光滑接触模型 (Hertz 模型、M-D 模型). Mo 和 Szlufarska^[9,10] 模拟了非晶态碳探头与金刚石基体的接触、摩擦行为, 他们发现原子级的多凸体特性已改变了接触的物理机制, 其无黏附接触行为与粗糙接触模型 (G-W 模型、Persson 模型) 的预测相一致. 这些研究主要揭示了表面粗糙形貌导致的接触行为转变.

另一个问题是, 表面黏附如何导致接触行为的转变? JKR 模型和 DMT 模型分别作为黏附接触的两种极端情形, 它们基于不同的前提假设和推导原理, 但在得到的计算公式中有相似之处. 在 JKR 模型中, 接触半径 a 与载荷 P 的关系为: $a = ((R/K)(P + 3\pi\gamma R + \sqrt{6\pi\gamma RP + 3\pi\gamma R^2}))^{1/3}$,

* 国家自然科学基金 (批准号: 50875271)、重庆市自然科学基金 (批准号: CSTC2009BB4200) 和中央高校基本科研业务费 (批准号: CDJZR11 28 00 01) 资助的课题.

[†] E-mail: flduan@cqu.edu.cn

其中 R 为曲率半径, K 为等效弹性模量, γ 为黏着功. 在 DMT 模型中, 相应的关系为: $a = ((R/K)(P + 2\pi\gamma R))^{1/3}$. 这两个公式都可看成是 Hertz 模型 ($a = (RP/K)^{1/3}$) 的基础上, 在载荷部分添加了一项. 但是, 没有研究阐明这一添加项和接触界面黏附力的关系. 我们的问题是, 黏附力的影响可否等效为附加在真实外载荷基础上的虚拟载荷.

本文应用大规模分子动力学方法, 模拟了刚性球形探头与弹性平面基体的纳米尺度接触行为, 影响因素包括具有不同原子级粗糙形貌的探头, 以及探头与基体之间不同程度的黏附作用. 我们关注载荷与真实接触面积的关系, 接触界面排斥力与真实接触面积, 以及黏附力与真实接触面积之间的关系. 研究了从无黏附到黏附条件下探头与基体之间的接触行为转变.

2 模拟方法

为了模拟出探头与基体表面之间不同程度的黏附作用, 我们采用了截断 Lennard-Jones (LJ) 势函数:

$$E = 4\epsilon_i \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (r < r_{\text{cut}}), \quad (1)$$



图 1 探头的原子构型 (a) 原子级光滑探头; (b) 原子级粗糙探头

在模拟中, 首先让探头与基体的距离大于 r_{cut} . 然后, 给探头施加一个很小的载荷, 并保持探头在水平方向的位置不变. 逐次增加施加在探头上的载荷, 使系统在每个载荷下充分弛豫, 在达到平衡态之后, 提取出各个载荷下的表面作用力和接触面积, 从而模拟得到探头与基体之间的接触过程. 采用了 Langevin 方法进行控温, 使控温层温度保持在 $0.0001\epsilon/k_B$ 附近, 其中 k_B 是 Boltzmann 常数. 模拟使用的是由美国 Sandia 国家实验室开发的大规模分子动力学开源代码软件 LAMMPS^[11].

在原子尺度上, 对原子或固体之间的接触没有一个唯一的定义标准^[10,12]. 我们采用原子间距离进行判断, 如果基体原子处于任何一个探头原子的

其中, r_{cut} 为截断半径, 即当两个原子之间的距离大于 r_{cut} 时, 原子间作用力为零. 将描述基体原子之间作用的 LJ 势能量参数、长度参数和截断半径分别取为 1.0ϵ , 1.0σ , 1.5σ . 对于探头原子与基体原子之间的作用, 通过调整 r_{cut} 和 ϵ_i 的取值, 来获得表面间不同程度的黏附作用. 当 r_{cut} 取为 $2^{1/6}\sigma$ 时, 截断 LJ 势只描述了原子间的排斥力, 因而探头与基体表面间没有黏附作用. 当 r_{cut} 取为 1.5σ 时, 探头与基体表面间存在黏附作用, 进而将 ϵ_i/ϵ 分别取为 $0.2, 0.5, 1.0$, 以模拟表面间不同程度的黏附力.

基体表面由面心立方晶体的 (001) 面构成, 晶体原子的最近邻间距为 $2^{1/6}\sigma$. 基体尺寸为 $79.4\sigma \times 79.4\sigma \times 47.6\sigma$, 共 305000 个原子. 为了消除系统边界对模拟结果的影响, 在基体的接触表面采用自由边界条件, 而在基体四周表面上采用周期性边界条件. 我们模拟了具有相同名义半径 (半径为 23.8σ , 约 7.1 nm) 的两种探头: 原子级光滑探头和原子级粗糙探头, 它们的原子构型示于图 1. 原子级光滑探头是将一块面心立方晶体弯曲成球形得到; 原子级粗糙探头则是从非晶态体块中切割出球形得到.

排斥力力程 (这里为 $2^{1/6}\sigma$) 范围内, 这个原子被定义为接触原子. 进而, 将探头与基体间的真实接触面积 A_{real} 定义为: $A_{\text{real}} = N_{\text{at}}A_{\text{at}}$, 其中 N_{at} 为接触原子数, A_{at} 为单个原子的平均表面面积. A_{at} 的取值由基体表面面积除以其表面原子数得到.

3 结果与讨论

3.1 纳米接触行为与连续接触模型

我们分别模拟了无黏附、不同程度黏附作用 ($\epsilon_i/\epsilon = 0.5, 1.0$) 下的接触行为, 图 2 给出了两种探头的载荷 - 真实接触面积曲线. 对于原子级

光滑探头 (图 2(a)), 期待其接触行为可以用单粗糙峰理论给予描述, 分别将无/有黏附下的模拟数据与 Hertz 模型和 M-D 模型进行了拟合. 由于 M-D 模型缺乏一个接触面积与载荷的解析表达式, 我们应用了由 Carpick, Ogletree 和 Salmeron (COS) 发展的插值公式 [13,14]. 拟合曲线如图中虚线 (Hertz 模型) 和实线 (M-D 模型) 所示, 模拟数据与相应的连续模型很好地相一致. Hertz 拟合得到的等效弹性模量为 $46.5\epsilon/\sigma^3$; COS 拟合得到的拉离力为 $65.52\epsilon/\sigma$, Maugis 转变参数为 0.06. 我们的结果与 Luan 和 Robbins[8] 关于弯曲相称和非相称探头的研究结果相一致. 尽管他们采用的是根据接触压力计算名义接触面积, 由于原子级光滑探头的接触原子分布为连通、近似圆形的区域, 两种方法计算得到的接触面积相差无几.

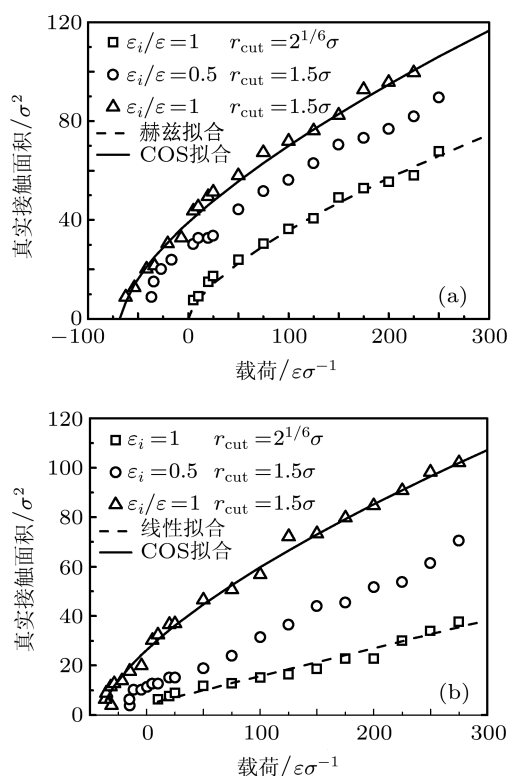


图 2 真实接触面积与载荷的关系 (a) 原子级光滑探头; (b) 原子级粗糙探头

对于原子级粗糙探头 (图 2(b)), 分别对无/有黏附下的模拟数据进行了线性拟合和 COS 拟合. 这里我们采用线性函数, 是因为 G-W 模型和 Persson 模型等粗糙表面接触理论, 都预测载荷与真实接触面积之间为线性关系. 拟合曲线如图所示, 模拟数据与相应的连续模型很好地一致. COS 拟合得到的拉离力为 $39.52\epsilon/\sigma$, Maugis 转变参数为 0.03. 我们

采用更一般的 L-J 势, 证实了 Mo 和 Szlufarska 的结论 [10], 即非晶态探头所具有的原子级粗糙形貌, 改变了接触变形机制, 其接触行为应该用粗糙接触模型来描述. 但是, 原子级粗糙探头的黏附接触行为, 仍与光滑表面黏附接触 (M-D) 模型相一致. 这是因为表面黏附的增大, 相当于接触发生在较大外载荷作用下, 接触行为主要由基体的体相性质所决定, 从而表面形貌的影响不再具有决定性作用.

3.2 排斥力与接触面积的关系

我们将接触界面上的表面作用力分解为排斥力和黏附力, 尝试分别研究它们与接触面积的关系. 表面力的分解借鉴了 Mo 和 Szlufarska 的方法 [9], 通过下述计算得到: 首先, 得到黏附条件下的系统平衡态原子构型; 将 LJ 势函数的 r_{cut} 减小为 $2^{1/6}\sigma$, 重新计算该平衡态构型的表面作用力. 这时的表面力就是有黏附条件下接触界面上的排斥力; 排斥力与黏附力的绝对值之差就是外载荷的大小由此可以计算出表面黏附力.

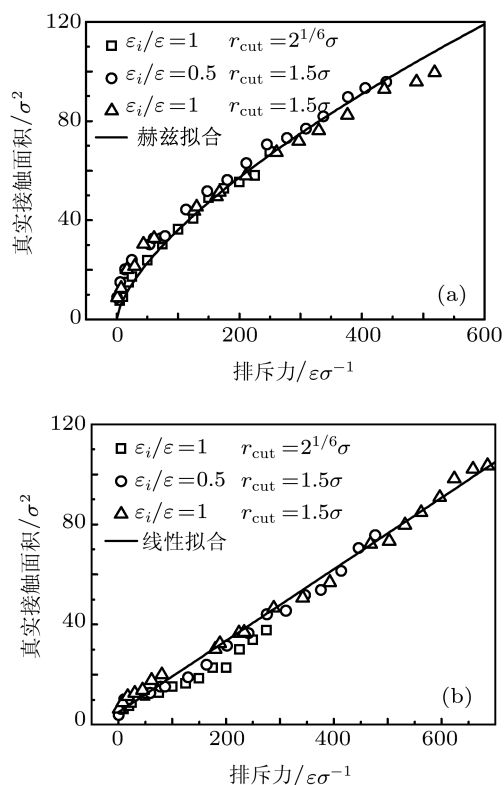


图 3 真实接触面积与表面排斥力的关系 (a) 原子级光滑探头; (b) 原子级粗糙探头

采用上述分解方法, 将图 2 数据用表面排斥力与真实接触面积的关系来表示, 示于图 3. 图中分别

给出了无黏附、两种黏附程度 ($\epsilon_i/\epsilon = 0.5, 1.0$) 下的 3 组数据. 我们对原子级光滑探头的模拟数据进行了 Hertz 拟合 (图 3(a)), 对原子级粗糙探头的的数据进行了线性拟合 (图 3(b)). 无论是原子级光滑探头还是粗糙探头, 3 组模拟数据都表现出相同的变化规律, 均与拟合曲线符合得很好. 结果表明, 黏附接触下的真实接触面积与排斥力的关系与无黏附接触时的规律相一致, 根据表面粗糙度的不同, 分别为 Hertz 光滑接触模型和 G-W (或 Persson) 粗糙接触模型. 因而, 表面黏附力对接触行为的影响作用, 可以等效为附加在外载荷基础上的、与黏附力大小相等的虚拟载荷, 将对黏附接触行为的分析转变为无黏附接触分析.

可以将黏附力的作用等效为虚拟载荷, 表明黏附力没有使基体发生显著变形, 否则不同的作用力方向会导致不同的变形效果. 这一点得到了拟合 Maugis 转变参数的证实, 它们都在 0—0.1 范围内, 说明我们的算例很接近于 DMT 模型. 在 DMT 模型中, 接触半径 a 与载荷 P 的关系为:

$a = ((R/K)(P + 2\pi\gamma R))^{1/3}$, 其添加项 $2\pi\gamma R$ 为表面间拉离力. 对于变形很小的近刚性黏附接触, 拉离力可以近似为接触过程中的黏附力. 我们的模拟表明, 对于弹性黏附接触, 在一定条件下可以将黏附力作为附加的虚拟载荷, 应用到 Hertz 计算公式中.

3.3 黏附力导致的接触行为转变

图 4 分别给出了 3 种黏附程度 ($\epsilon_i/\epsilon = 0.2, 0.5, 1.0$) 下, 黏附力随真实接触面积的变化. 无论是原子级光滑探头还是粗糙探头, 3 组数据都呈现出相似的变化规律, 我们对模拟数据进行了幂指数拟合. 对于原子级光滑探头 (图 4(a)), 拟合得到的幂指数都大于 1, 曲线呈凹型增长; 对于原子级粗糙探头 (图 4(b)), 幂指数都小于 1, 曲线呈凸型增长. 原子级粗糙形貌的差异, 不仅导致了无黏附接触行为的不同, 也导致了接触过程中黏附力的增长趋势具有不同的规律.

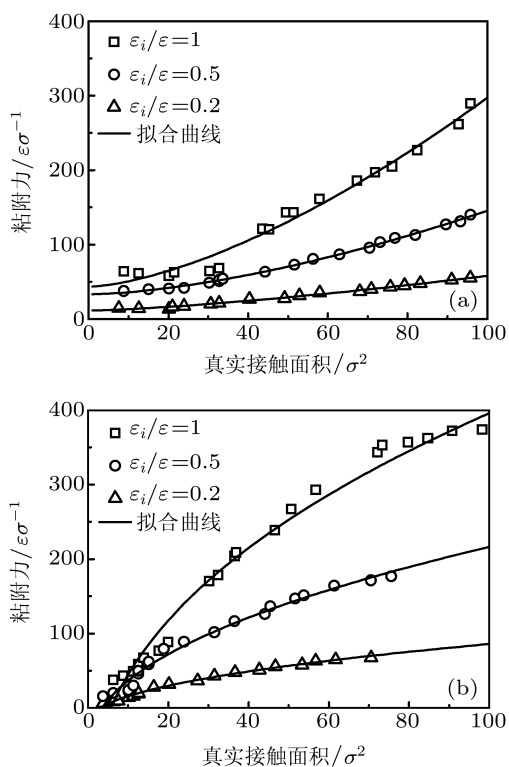


图 4 表面黏附力随真实接触面积的变化 (a) 原子级光滑探头; (b) 原子级粗糙探头

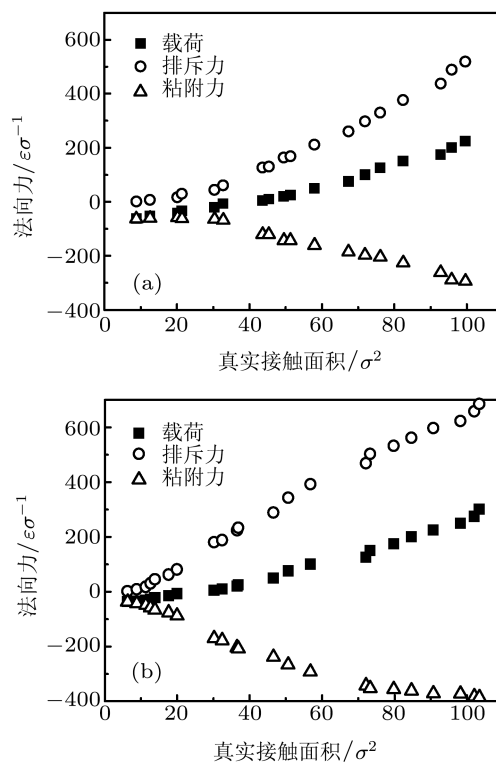


图 5 表面黏附导致的接触行为转变 (a) 原子级光滑探头; (b) 原子级粗糙探头

为了显示出黏附力对接触行为的转变作用,我们将与真实接触面积相对应的载荷、排斥力和黏附力放在一起,示于图 5. 由于载荷、排斥力和黏附力之间的联系,排斥力与真实接触面积的关系和黏附力与真实接触面积的关系,两者之和决定了载荷与真实接触面积的关系. 对于原子级光滑探头(图 5(a)),排斥力是真实接触面积的 $3/2$ 次方(图中圆圈),它与 Hertz 模型相一致. 图中三角代表的黏附力随真实接触面积呈幂指数增长,这里幂指数大于 1. 这两者的叠加,构成了载荷与真实接触面积之间的非线性关系(图中方块),它服从 M-D 模型. 同样地,对于原子级粗糙探头(图 5(b)),排斥力与真实接触面积之间的线性关系,与黏附力随真实接触面积的幂指数增长规律,共同决定了载荷与真实接触面积之间的 M-D 接触行为.

4 结论

应用大规模分子动力学方法,模拟了刚性球形探头与弹性平面基体之间的纳米尺度接触,研究了具有不同原子级粗糙形貌的探头,以及探头与基体之间不同程度的黏附作用. 我们关注载荷与

真实接触面积的关系. 分子模拟得到的载荷与真实接触面积的关系与宏观理论预测很好地定性一致. 在无黏附条件下,原子级光滑探头与基体之间的真实接触面积为载荷的 $2/3$ 次方,服从 Hertz 光滑弹性接触模型;原子级粗糙探头的真实接触面积与载荷成线性关系,与粗糙表面接触模型(G-W 模型, Persson 模型)的预测相一致. 在黏附条件下,两种探头的接触行为都服从 M-D 光滑黏着接触模型,真实接触面积是载荷的非线性函数. 我们的结果分别与 Robbins 和 Szlufarska 的结果^[7-10]相一致.

通过将接触界面上的表面力分解为排斥力和黏附力,研究了排斥力与真实接触面积、黏附力与真实接触面积之间的关系. 无论是原子级光滑探头还是粗糙探头,黏附接触下的排斥力与真实接触面积的关系都与无黏附接触时的规律相一致,即黏附力对接触行为的影响作用,可以等效为附加到真实外载荷基础上的虚拟载荷,将对黏附接触行为的分析转变为无黏附接触分析. 在无黏附接触行为的基础上,黏附力与真实接触面积的变化关系,决定了黏附条件下的接触行为. 两种探头的黏附力都随真实接触面积呈幂函数形式的增长,但是,原子级光滑探头的幂指数大于 1,而原子级粗糙探头的幂指数小于 1.

-
- [1] Johnson K L 1985 *Contact Mechanics* (Cambridge: Cambridge University Press)
 - [2] Johnson K L, Kendall K, Roberts A D 1971 *Proc. Roy. Soc. London Ser. A* **324** 301
 - [3] Derjaguin B V, Muller V M, Toporov Y P 1975 *J. Colloid Interface Sci.* **53** 314
 - [4] Maugis D 1992 *J. Colloid Interface Sci.* **150** 243
 - [5] Persson B N J 2001 *J. Chem. Phys.* **115** 3840
 - [6] Persson B N J 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 125502
 - [7] Luan B, Robbins M O 2005 *Nature* **435** 929
 - [8] Luan B, Robbins M O 2006 *Phys. Rev. E* **74** 026111
 - [9] Mo Y, Turner K, Szlufarska I 2009 *Nature* **457** 1116
 - [10] Mo Y, Szlufarska I 2010 *Phys. Rev. B* **81** 035405
 - [11] <http://www.cs.sandia.gov/sjplimp/lammps.html>
 - [12] Yang C, Tartaglino U, Persson B N J 2006 *Eur. Phys. J. E* **19** 47
 - [13] Carpick W, Ogletree D F, Salmeron M 1999 *J. Colloid Interface Sci.* **211** 395
 - [14] Schwarz U D 2003 *J. Colloid Interface Sci.* **261** 99

Transition of contact behavior induced by interfacial adhesion*

Duan Fang-Li[†] Yang Ji-Ming Qiu He-Bing Wu Cong-Ying

(State Key Laboratory of Mechanical Transmissions, Chongqing University, Chongqing 400030, China)

(Received 27 January 2011; revised manuscript received 5 March 2011)

Abstract

Large-scale molecular dynamics simulations are performed to study the adhesive contact between a rigid spherical tip and an elastic flat substrate. We focus on the relations between the real contact area and the external load and between the repulsive force and attractive force on contact interface. The simulated results are consistent with the corresponding continuum contact theories, which are Hertz model, Greenwood-Williamson (or Persson) model and Maugis-Dugdale model according to surface roughness and interfacial adhesion. We show that there are same relations between the real contact area and the repulsive force for both non-adhesive and adhesive contact, which means that the effect of adhesion on contact behavior can be equivalent to that of a virtual load. We demonstrate that the attractive force on contact interface increases with the real contact area in a power-law function, with a power exponent larger than 1 for the atomic-scale smooth tip and with a power exponent smaller than 1 for the atomic-scale rough tip.

Keywords: nanoscale contact, adhesion, molecular dynamics simulation

PACS: 62.20.Qp

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50875271), the Natural Science Foundation of Chongqing, China (Grant No. CSTC 2009BB4200), and the Fundamental Research Funds for the Central Universities, China (Grant No. CDJZR11280001).

[†] E-mail: flduan@cqu.edu.cn