

一种描述介质对范德瓦耳斯力影响的模型*

文婷^{1)†} 王曾晖^{2)‡}

1) (湖州学院电子信息学院, 湖州 313000)

2) (电子科技大学基础与前沿研究院, 成都 610054)

(2026年3月27日收到; 2026年4月6日收到修改稿)

范德瓦耳斯力是一种基本但相对较弱且短程的相互作用, 在自然界中广泛存在, 对理解多种物理过程及纳米材料与器件设计具有重要意义. 然而, 现有理论多基于均匀或不可极化介质的简化假设, 缺乏对材料极化响应影响的系统刻画, 从而限制了对复杂介电环境中范德瓦耳斯力的定量描述. 基于此, 本文提出一种将材料极化性质引入范德瓦耳斯力计算的理论方法. 通过在相互作用模型中引入极化率或等效介电响应, 定量描述不同介质环境下涨落电场的传播与耦合行为, 实现对范德瓦耳斯力强度及其距离依赖关系的修正. 该方法为复杂介电环境中范德瓦耳斯相互作用提供了统一且可推广的分析框架, 尤其适用于二维异质结构体系, 并为低维材料界面耦合行为的理解与调控提供了重要理论依据.

关键词: 范德瓦耳斯力, 二维材料, 层间相互作用, 极化

DOI: 10.7498/aps.75.20260426

CSTR: 32037.14.aps.75.20260426

1 引言

范德瓦耳斯 (van der Waals, vdW) 力是物理中一种基本且重要的相互作用. 范德瓦耳斯力源于材料中电子密度的涨落, 相较于库仑相互作用, 范德瓦耳斯力更弱且衰减更快, 因此作用范围更短^[1-4]. 尽管作用距离很短, 范德瓦耳斯力在自然界中普遍存在^[5-7], 对很多基本的物理过程的理解以及纳米材料与器件的设计均具有重要意义^[8,9]. 特别地, 在基于二维层状体系的纳米物理中, 范德瓦耳斯力扮演着至关重要的角色, 诱导了多种新奇物理现象的产生, 如范德瓦耳斯结构中的莫尔激子^[10-13]、反常超导^[14-16]以及关联绝缘态^[17-19]等. 因此, 对范德瓦耳斯力的深入理解, 特别是范德瓦耳斯力在二维体系中的行为, 对于深入理解这类低

维原子结构中的物理现象具有核心意义^[20,21].

目前, 范德瓦耳斯力表达式已经有了被广泛采用的理论表述, 如 Israelachvili^[2]等; 但在真实材料体系中, 其强度与空间分布有可能受介质的材料性质影响. 例如, 作为刻画电子云对外场响应的关键参数, 材料极化率决定了涨落电偶极子的形成与耦合过程, 因而对范德瓦耳斯力可能具有重要影响. 特别在二维异质结中, 由于材料原子级的厚度与范德瓦耳斯力的作用距离数量级相近, 范德瓦耳斯力的衰减可能要考虑材料的影响. 然而, 已有的理论表述多将材料简化为均匀、不可极化介质或采用有效介电常数近似, 其极化响应对范德瓦耳斯力中的影响规律仍缺乏明确的理论框架. 这一局限在低维、强各向异性及介电环境高度不均匀 (如二维异质结中, 在原子尺度上就可以出现材料性质的多次陡变) 的体系中尤为突出, 制约了对范德瓦耳斯力

* 浙江省自然科学基金 (批准号: ZCLQN25A0407)、湖州市自然科学基金 (批准号: 2025YZ20) 和国家自然科学基金 (批准号: T2325007, 62450003, W2541020) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: wenting@zjhzu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: zenghui.wang@uestc.edu.cn

的定量描述与精确调控.

针对上述问题, 本文提出一套将材料极化性质融入范德瓦耳斯力计算过程的方法. 本文的出发点主要是从唯像角度构建一个形式简洁、物理图像清晰易懂且具有可推广性的理论模型, 通过在相互作用模型中引入材料的极化率或等效介电常数, 这一方法有效量化了不同介质环境下涨落电场的传播与耦合行为, 从而为对介质中范德瓦耳斯力强度及其距离依赖关系进行修正提供理论框架. 该方法为定量分析二维异质结构中范德瓦耳斯力提供了统一、可推广的计算思路, 进而为理解和调控低维材料体系中的界面耦合行为提供了行之有效的理论工具.

2 经典的范德瓦耳斯力计算

在讨论介质带来的修正之前, 我们先回顾一下现有的范德瓦耳斯作用力表达式. 在大多数情况下, 由于物体间距远小于所研究物体的尺寸, 范德瓦耳斯力可以很好地用两个半无限平面来近似描述. 然而, 对于二维结构这种近似可能不成立, 因为所研究对象的厚度可能与间距处于同一数量级. 故此, 在这里我们给出两个有限厚度平板之间范德瓦耳斯力的明确推导.

我们首先从经典的例子之一: 半无限大的平板开始出发, 这一物理模型已经得到了充分讨论. 遵循 Israelachvili^[2] 的推导, 两个相距为 r 的原子之间的范德瓦耳斯力为

$$F_{\text{vdW}} = -\frac{C}{r^7}, \quad (1)$$

其中 C 是与两种原子相关的一个系数, 而负号代表范德瓦耳斯力相互吸引.

通过对不同成对原子之间的作用进行积分, 我们可以得到间距为 h 的两个半无限大平板之间的 vdW 力为^[2]

$$F_{\text{vdW}} = -\frac{C\pi a^2 \rho_1 \rho_2}{6} \frac{1}{h^3}, \quad (2)$$

其中, ρ_1, ρ_2 分别是两个平板材料中的原子密度, $a^2 = 1$ 表示单位面积 (保留 a^2 是为了确保表达式的量纲正确).

从半无限大平板的表达式出发, 我们可以推导出两个薄板 (有限厚度) 之间的范德瓦耳斯力. 如图 1 所示, 两个半无限平板间的相互作用, 可以等

效地视为左侧的半无限平板 $1'$ 和厚度为 t_1 的薄板 1, 与右侧的半无限平板 $2'$ 和厚度为 t_2 的薄板 2 的相互作用.

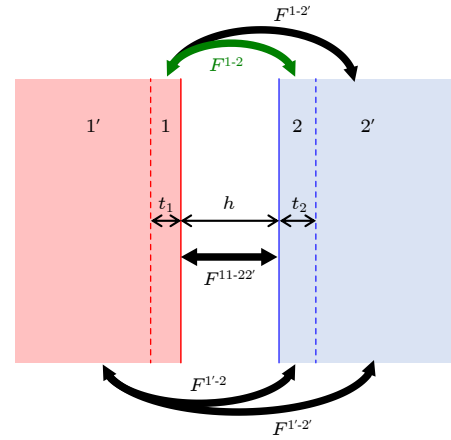


图 1 两个半无限大平板间的相互作用可以等效为 4 项相互作用之和

Fig. 1. The interaction between two semi-infinite parallel slabs can be viewed as the sum of four interaction terms.

左侧半无限大平板与右侧半无限大平板的相互作用可表示为 4 项之和:

$$F_{\text{vdW}}^{11'-22'} = F_{\text{vdW}}^{1'-2} + F_{\text{vdW}}^{1'-2'} + F_{\text{vdW}}^{1'-2} + F_{\text{vdW}}^{1'-2'} \quad (3)$$

其中, $F^{1'-2}$ (文字部分省略 $_{\text{vdW}}$ 角标) 就是我们要求的项. 余下各项中, 左边的 $F^{11'-22'}$ 和右边的 $F^{1'-2'}$ 可以利用已知的两个半无限平面间的 (1) 式直接得到:

$$F_{\text{vdW}}^{11'-22'} = -\frac{C\pi a^2 \rho_1 \rho_2}{6} \cdot \frac{1}{h^3}, \quad (4)$$

$$F_{\text{vdW}}^{1'-2'} = -\frac{C\pi a^2 \rho_1 \rho_2}{6} \cdot \frac{1}{(h + t_1 + t_2)^3}. \quad (5)$$

而 $F^{1'-2}$ 可视为两项之差, 即 $F^{1'-2} = F^{11'-2'} - F^{1'-2'}$, 恰好右侧两项均为两个半无限平面间的作用, 亦可通过 (2) 式直接得到. 因此可得

$$F_{\text{vdW}}^{1'-2} = -\frac{C\pi a^2 \rho_1 \rho_2}{6} \left[\frac{1}{(h + t_2)^3} - \frac{1}{(h + t_1 + t_2)^3} \right]. \quad (6)$$

同理, $F^{1'-2} = F^{11'-22'} - F^{1'-2'}$:

$$F_{\text{vdW}}^{1'-2} = -\frac{C\pi a^2 \rho_1 \rho_2}{6} \left[\frac{1}{(h + t_1)^3} - \frac{1}{(h + t_1 + t_2)^3} \right]. \quad (7)$$

接下来, 通过对 (3) 式中的各项进行移项, 即可得到厚度分别为 t_1 和 t_2 、材料为 ρ_1, ρ_2 、间距为 h 的两个有限厚度平板之间的范德瓦耳斯力为

$$F_{\text{vdW}}^{1-2} = -\frac{C\pi a^2 \rho_1 \rho_2}{6} \left[\frac{1}{h^3} - \frac{1}{(h+t_1)^3} - \frac{1}{(h+t_2)^3} + \frac{1}{(h+t_1+t_2)^3} \right]. \quad (8)$$

可以迅速检验: 当 $t_1, t_2 \rightarrow \infty$ 时, (8) 式即恢复成 (2) 式, 符合相应的物理图像. 因此, 在现有的理论框架下, 无论是半无限大还是有限厚度的平板, 范德瓦耳斯力均以 h^{-3} 的速率随距离衰减, 远快于库仑力.

3 极化效应下的范德瓦耳斯力

现在考虑介质存在时的范德瓦耳斯力. 之前的推导都是基于以下假设: 两原子之间的范德瓦耳斯力不受原子所处空间的介质影响, 与真空中的相互作用完全相同. 从第 2 节的推导可以看出, 目前的处理方法中, 范德瓦耳斯力的计算只考虑到这两种原子的类型、材料中的原子 (数量) 密度, 以及间距, 并未明确引入材料的极化性质可能带来的效应, 例如在介质环境中由极化响应引起的对此类涨落电场的调制. 然而, 鉴于范德瓦耳斯力的本质 (来源于材料中电偶极矩的涨落) 与静电力密不可分, 两个原子之间的空间如果有介质的存在, 可能会对涨落的电偶极场产生屏蔽或增强等扰动. 因此, 需要引入一种模型来描述这一效应.

3.1 范德瓦耳斯力与静电力的类比

这里采用一种简单直观的方法: 将范德瓦耳斯力场与电荷产生的库仑场进行类比. 在电磁学中, 自由电荷 (free charge, 与极化无关的电荷) 会产生电场. 电场会使介质发生极化, 产生非零的极化率 (偶极矩的集体激发), 并使得介质中出现极化电荷 (即由极化产生的电荷分布, 也称为束缚电荷 (bound charge)), 从而影响空间中的总电场, 并可能对物体间库仑力带来修正.

作为类比, 将两个平板 (1 和 2) 之间的范德瓦耳斯力重新表述: 将它们各自的原子密度 ρ_1 和 ρ_2 替换为自由电荷密度 (这里的自由电荷 free charge 并不意味着电荷可以在平板上自由移动, 而是指这些电荷不是由极化产生的; 实际上, 这些电荷可以被视为“固定”在平板的特定位置上; 这里我们遵循 Israelachvili^[2] 的范例, 用体密度来描述单位体

积内自由电荷的个数 (而非电荷量), 因此量纲设置为 m^{-3} , 而非电磁学中大家熟悉的 C/m^3), 如图 2 所示. 我们称这些电荷为“vdW 电荷”, 因为它们本质上是涨落偶极子; 但将其视为电荷可以更好地借用静电学的思路来讨论极化的概念. 在此基础上, 采用连续介质模型描述材料的介电响应, 以刻画涨落电场在介质中的传播与耦合. 由于极化电荷可以是源于电子云在外场作用下的微小位移, 其空间偏移远小于原子尺度且响应连续可调, 因此在理论处理上可等效为连续电荷分布.

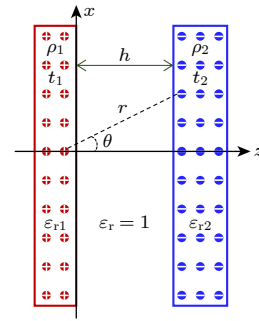


图 2 两相距为 h 且带相反“vdW 电荷”的有限厚度板
Fig. 2. Two finite-thickness plates separated by a distance h and carrying oppositely signed “vdW charges”.

随后, 假设对这些 vdW 电荷适用一种新的库仑定律, 其中任意两点的 vdW 电荷之间的成对力为 (补充材料 S1(online)):

$$dF_{\text{vdW}} = -\frac{6Ca^2 d\rho_1 d\rho_2}{r^7}. \quad (9)$$

为确保力为吸引力, 将 ρ_1 和 ρ_2 设置为具有相反的符号. 这样处理在数学上简单且直观, 并可套用库仑力对符号的定义. 为不失一般性, 令 $\rho_1 > 0$ 而 $\rho_2 < 0$. 利用这一表达式, 对两个平板上每一对 vdW 电荷之间的作用力进行积分 (基于对称性, 可以只对作用力沿 z 轴方向的水平分量进行积分, 因为所有垂直于 z 轴方向的力积分后都会抵消), 可以得到两个有限厚度平板间的 vdW “静电力” (计算与补充材料 S1 (online) 中的过程完全相同):

$$F_{\text{vdW}} = -\frac{C\pi a^2 \rho_1 \rho_2}{6} \left[\frac{1}{h^3} - \frac{1}{(h+t_1)^3} - \frac{1}{(h+t_2)^3} + \frac{1}{(h+t_1+t_2)^3} \right], \quad (10)$$

与第 2 节的计算完全相同.

接下来引入“极化”的概念. 从微观角度来看, 涨落偶极场 (范德瓦耳斯力的物理本质) 可能会

在材料中诱导非零的四极矩, 从而产生“极化”偶极密度. 这些“极化”偶极可能会对范德瓦耳斯力产生扰动. 为了与静电学术语建立类比, 将这些诱导产生的四极矩强度称为“vdW 极化率 (vdW polarization)”, 将诱导产生的偶极密度称为“vdW 极化电荷 (vdW bound charge)”.

3.2 范德瓦耳斯“电场”“电位移矢量”和“极化率”

有了 vdW 极化电荷的概念, 就可以进一步引入 vdW 电位移矢量 D_{vdW} , vdW 极化强度 P_{vdW} , 和 vdW 电场 E_{vdW} (需要强调的是, 本文量纲遵循了 Israelachvili 的范例, 因此 D_{vdW} , P_{vdW} 和 E_{vdW} 的量纲均不包含电荷量 (单位为 C), 其量纲分别为: m^{-2} , m^{-2} 和 N, 而非电磁学中大家熟悉的 C/m^2 , C/m^2 和 N/C). 参照库仑定律下静电场的情况, 令这些物理量之间的关系满足:

$$D_{\text{vdW}} = \varepsilon_{0,\text{vdW}} E_{\text{vdW}} + P_{\text{vdW}}, \quad (11)$$

其中, $\varepsilon_{0,\text{vdW}}$ 为“真空的 vdW 介电常数”, 将真空中的 vdW 电场和 vdW 电位移矢量场联系起来.

引入电位移矢量概念的一个优势在于其散度仅依赖于自由电荷分布 (参见文献 [22] 中的 (4.22) 式), 而不受极化电荷分布的影响. 因此, 在高对称性情况下 (例如 D 的旋度为零时), 可以像在无介质的自由空间中求解 E 一样直接求解 D , 而无需提前知道 P 的分布.

假设这一情况对 D_{vdW} (vdW 电位移) 和 E_{vdW} 同样适用. 因此, 对于我们关注的问题, 当“vdW 自由电荷”分布已知时, 可以使用“vdW 库仑定律” ((11) 式) 写出源于 ρ_1 (板 1 所带的“自由电荷”) 的电位移 D_{vdW} 分布为 (计算见补充材料 S2 (online)):

$$D_{\text{vdW}}^{\rho_1} = \frac{C\pi\varepsilon_{0,\text{vdW}}\rho_1}{2} \left[\frac{1}{(-z)^4} - \frac{1}{(-t_1 - z)^4} \right]. \quad (12)$$

如图 3(a) 左图所示. 从图中可见, (12) 式所代表的 D_{vdW} 分布包括了板 1 左侧、板 1 内部、板 1 右侧 3 个区域; 其值在局域间的交界处发散, 对应括号中的两个 4 次方分之一项.

同理, 可得源于 ρ_2 的电位移 D_{vdW} 分布为

$$D_{\text{vdW}}^{\rho_2} = \frac{C\pi\varepsilon_{0,\text{vdW}}\rho_2}{2} \left[\frac{1}{(h+t_2-z)^4} - \frac{1}{(h-z)^4} \right]. \quad (13)$$

如图 3(a) 右图所示. 接下来, 假设两块平板均为

vdW 线性介质, 即其 vdW 极化率正比于 vdW 电场强度:

$$P_{\text{vdW}} = \varepsilon_{0,\text{vdW}}(\varepsilon_{r,\text{vdW}} - 1)E_{\text{vdW}}, \quad (14)$$

其中, $\varepsilon_{r,\text{vdW}}$ 为“vdW 相对介电常数”, 反映了材料在 vdW 场下的“极化”. 例如在真空中 $\varepsilon_{r,\text{vdW}} = 1$, 而在板 1 中则是 $\varepsilon_{r1,\text{vdW}}$. 结合 (11) 式和 (14) 式, 可得 E_{vdW} 和 D_{vdW} 的正比关系 ($D_{\text{vdW}} = \varepsilon_{0,\text{vdW}} \times \varepsilon_{r,\text{vdW}} E_{\text{vdW}}$), 进而得出 E_{vdW} 在整个空间的分布 (详见补充材料 S2 (online)), 结果如图 3(b) 所示.

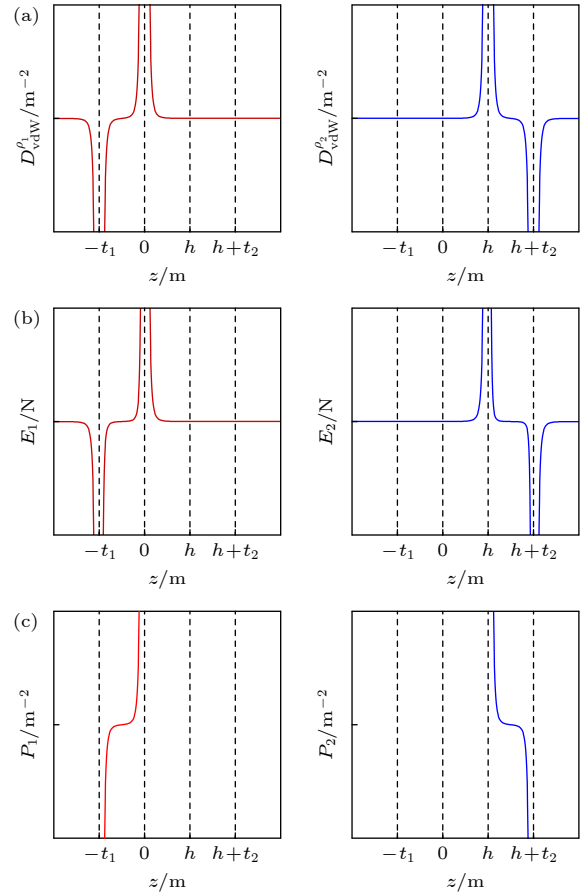


图 3 (a) vdW 电位移、(b) vdW 电场、(c) vdW 极化率在空间中的分布; 红色和蓝色 (为了清晰分开绘制在左右两侧) 分别代表了来自板 1 和板 2 的贡献

Fig. 3. Distributions of (a) vdW electric displacement, (b) vdW electric field, and (c) vdW polarization in space; the red and blue curves (plotted on the left and right) represent the contributions from plate 1 and plate 2, respectively.

在确定了整个空间的 E_{vdW} 场之后, 可以利用 (14) 式计算其内部的 vdW 极化进而确定极化电荷的空间分布. 不过, 在计算 vdW 极化率和极化电荷之前, 我们注意到来自板 1 和板 2 的贡献都具有很强的局域性 (图 3). 这是因为与库仑力相比, 范德瓦耳斯力的衰减要快得多: 两原子之间的范德瓦

耳斯力随距离按 h^{-7} 衰减、两表面之间随间距按 h^{-3} 衰减, 而库仑力则分别按 h^{-2} (点电荷之间) 和 h^{-0} (两无限平面之间) 变化. 因此, 当平板厚度与其间距处于相同数量级时, vdW 场 (D_{vdW} 和 E_{vdW}) 几乎完全由所在平板上的 vdW 自由电荷所决定, 而来自另一平板的影响则完全可以忽略. 基于此, 在对 P_{vdW} 进行计算时, 可以仅保留最大项进行简化:

$$P_1 |_{-t_1 < z < 0} = \frac{C\pi\varepsilon_{0,\text{vdW}}(\varepsilon_{r1,\text{vdW}} - 1)\rho_1}{2\varepsilon_{r1,\text{vdW}}} \times \left[\frac{1}{(-z)^4} - \frac{1}{(-t_1 - z)^4} \right], \quad (15)$$

$$P_2 |_{h < z < h+t_2} = \frac{C\pi\varepsilon_{0,\text{vdW}}(\varepsilon_{r2,\text{vdW}} - 1)\rho_2}{2\varepsilon_{r2,\text{vdW}}} \times \left[\frac{1}{(h+t_2 - z)^4} - \frac{1}{(h - z)^4} \right]. \quad (16)$$

由此可以得到 P_{vdW} , 如图 3(c) 所示.

3.3 范德瓦耳斯“极化电荷”

在确定了 P_{vdW} 后即可计算极化电荷. 参照静电学中的相关推导 (见文献 [22] 中的公式 (4.11) 极化面电荷的计算为 $\sigma_b \equiv P \cdot \hat{n}$, 下标 b 代表极化电荷 (bound charge), \hat{n} 为平面的法向量), 并结合本问题的对称性, 可以得到板 1 左右两个表面的 vdW 极化电荷密度分别为

$$\sigma_{b1} = -P|_{z=-t_1}, \quad \sigma'_{b1} = P|_{z=0}. \quad (17)$$

同理, 板 2 左右两个表面的 vdW 极化电荷密度分别为

$$\sigma_{b2} = -P|_{z=h}, \quad \sigma'_{b2} = P|_{z=h+t_2}. \quad (18)$$

值得注意的是, 在数学上, 表面 vdW 极化电荷密度是发散的. 这是因为 D_{vdW} 在两块板的边缘本身就是发散的. 在物理上, 假设表面 vdW 极化发生在一个虽小但非零的厚度 Δt 内, 而 $1/\Delta t$ 则是一个很大但有限的量 (这里引入 Δt 用于避免在积分或求和过程中出现的发散行为, 是一种常见的数学处理, 对我们的最终计算结果不构成影响). 这样, 极化面电荷就可以顺利地表达出来 (注意 $\Delta t \rightarrow 0$ 对应着 $\sigma \rightarrow \infty$, 计算见补充材料 S3 (online)):

$$\sigma_{b1} = \sigma'_{b1} = \frac{C\pi\varepsilon_{0,\text{vdW}}(\varepsilon_{r1,\text{vdW}} - 1)\rho_1}{2\varepsilon_{r1,\text{vdW}}} \left[\frac{1}{\Delta t^4} - \frac{1}{t_1^4} \right], \quad (19)$$

$$\sigma_{b2} = \sigma'_{b2} = \frac{C\pi\varepsilon_{0,\text{vdW}}(\varepsilon_{r2,\text{vdW}} - 1)\rho_2}{2\varepsilon_{r2,\text{vdW}}} \left[\frac{1}{\Delta t^4} - \frac{1}{t_2^4} \right]. \quad (20)$$

接下来, 根据 Griffiths 中的 (4.12) 式 ($\rho_b \equiv -\nabla \cdot P$), 可推导得到两板中极化电荷体密度的表达式 (计算见补充材料 S3 (online)):

$$\rho_{b1} = \frac{2C\pi\varepsilon_{0,\text{vdW}}(\varepsilon_{r1,\text{vdW}} - 1)\rho_1}{\varepsilon_{r1,\text{vdW}}} \times \left[\frac{1}{(-t_1 - z)^5} - \frac{1}{(-z)^5} \right], \quad (21)$$

$$\rho_{b2} = \frac{2C\pi\varepsilon_{0,\text{vdW}}(\varepsilon_{r2,\text{vdW}} - 1)\rho_2}{\varepsilon_{r2,\text{vdW}}} \times \left[\frac{1}{(h - z)^5} - \frac{1}{(h + t_2 - z)^5} \right]. \quad (22)$$

两平板的 vdW 极化电荷分布如图 4 所示. 我们还可以进行一项简单却有效的检验, 即确认各板上的极化电荷总和 (面电荷+体电荷) 均为 0 (补充材料 S3 (online)), 来确保计算结果完全符合极化电荷的物理图像.

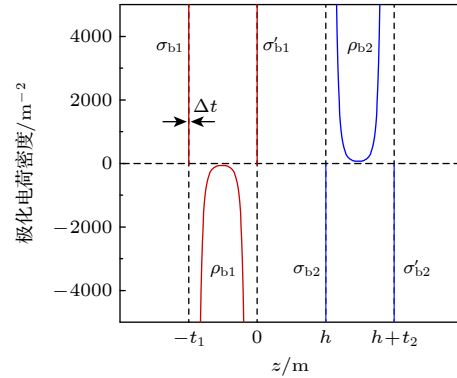


图 4 vdW 极化电荷密度的计算值在空间中的分布
Fig. 4. Spatial distribution of the calculated vdW bound charge (due to polarization) density.

3.4 包含范德瓦耳斯“极化电荷”时的范德瓦耳斯力

在考虑“范德瓦耳斯极化”的情况下, 计算板 1 与板 2 之间的范德瓦耳斯力. 由于“极化”的影响已经完整地体现在极化电荷及相应产生的场中, 可以将问题等效为一个仍在真空中但具有新的电荷分布的问题来求解: 也就是不再区分“自由电荷”和“极化电荷”, 也不再考虑介质的极化效应, 而是将所有的电荷一视同仁, 并且认为全部的电荷都分布在真空中.

同时, 鉴于同一平板内任意两部分“vdW”电荷之间的相互作用只会贡献于平板内部的“内力”, 并在对整个平板积分后相互抵消, 我们在计算两板间相互作用力的时候, 仅考虑属于不同平板的电荷对之间的力. 基于此, 可以将两平板之间的作用力表达为板 1 上的 4 组不同电荷 (自由电荷、极化体电荷, 以及两个表面的极化面电荷) 各自与板 2 之间范德瓦耳斯力的总和. 接下来对这 4 组范德瓦耳

斯力分别进行计算.

其一, 对于位于板 1 左表面 ($z = -t_1$ 处) 的 vdW 极化面电荷 σ_{b1} , 其受到来自板 2 的作用力由 4 部分组成 (自由电荷 ρ_2 、极化体电荷 ρ_{b2} , 以及两个表面的极化面电荷 σ_{b2} 和 σ'_{b2}), 如图 5 所示.

经计算 (补充材料 S4 (online)), 这 4 项分力之和为

$$\begin{aligned}
 F_{\text{vdW}}^{\sigma_{b1}-\rho_2} &= F_{\text{vdW}}^{\sigma_{b1}\sigma_{b2}} + F_{\text{vdW}}^{\sigma_{b1}\sigma'_{b2}} + F_{\text{vdW}}^{\sigma_{b1}\rho_{b2}} + F_{\text{vdW}}^{\sigma_{b1}\rho_2} \\
 &= -\frac{C^2\pi^2a^2\varepsilon_{0,\text{vdW}}(\varepsilon_{r1,\text{vdW}}-1)\rho_1\rho_2}{4\varepsilon_{r1,\text{vdW}}\Delta t^4} \left[\frac{1}{(h+t_1)^4} - \frac{1}{(h+t_1+t_2)^4} \right] \\
 &\quad + \frac{C^3\pi^3a^2\varepsilon_{0,\text{vdW}}^2(\varepsilon_{r1,\text{vdW}}-1)(\varepsilon_{r1,\text{vdW}}-1)\rho_1\rho_2}{2\varepsilon_{r1,\text{vdW}}\varepsilon_{r2,\text{vdW}}\Delta t^4} \frac{1}{t_2^4} \left[\frac{1}{(h+t_1)^5} + \frac{1}{(h+t_1+t_2)^5} \right] \\
 &\quad + \frac{C^2\pi^2a^2\varepsilon_{0,\text{vdW}}(\varepsilon_{r1,\text{vdW}}-1)\rho_1\rho_2}{4\varepsilon_{r1,\text{vdW}}} \frac{1}{t_1^4} \left[\frac{1}{(h+t_1)^4} - \frac{1}{(h+t_1+t_2)^4} \right]. \tag{23}
 \end{aligned}$$

其二, 通过类似的计算过程, 可以得到位于板 1 右表面 ($z = 0$ 处) 的 vdW 表面极化电荷 σ'_{b1} 所受到的来自板 2 的总的范德瓦耳斯力 (图 6):

$$\begin{aligned}
 F_{\text{vdW}}^{\sigma'_{b1}-\rho_2} &= F_{\text{vdW}}^{\sigma'_{b1}\sigma_{b2}} + F_{\text{vdW}}^{\sigma'_{b1}\sigma'_{b2}} + F_{\text{vdW}}^{\sigma'_{b1}\rho_{b2}} + F_{\text{vdW}}^{\sigma'_{b1}\rho_2} \\
 &= -\frac{C^2\pi^2a^2\varepsilon_{0,\text{vdW}}(\varepsilon_{r1,\text{vdW}}-1)\rho_1\rho_2}{4\varepsilon_{r1,\text{vdW}}\Delta t^4} \left[\frac{1}{h^4} - \frac{1}{(h+t_2)^4} \right] \\
 &\quad + \frac{C^3\pi^3a^2\varepsilon_{0,\text{vdW}}^2(\varepsilon_{r1,\text{vdW}}-1)(\varepsilon_{r1,\text{vdW}}-1)\rho_1\rho_2}{2\varepsilon_{r1,\text{vdW}}\varepsilon_{r2,\text{vdW}}\Delta t^4} \frac{1}{t_2^4} \left[\frac{1}{h^5} + \frac{1}{(h+t_2)^5} \right] \\
 &\quad + \frac{C^2\pi^2a^2\varepsilon_{0,\text{vdW}}(\varepsilon_{r1,\text{vdW}}-1)\rho_1\rho_2}{4\varepsilon_{r1,\text{vdW}}} \frac{1}{t_1^4} \left[\frac{1}{h^4} - \frac{1}{(h+t_2)^4} \right]. \tag{24}
 \end{aligned}$$

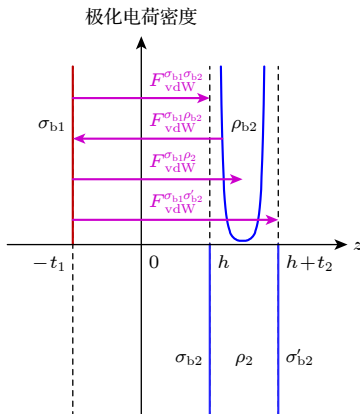


图 5 板 1 的 vdW 极化面电荷 σ_{b1} 受到来自板 2 的 4 部分电荷的 vdW 力示意图

Fig. 5. Schematic illustration of the vdW force on the plate 1 vdW surface bound charge σ_{b1} , exerted by the four charge components on plate 2.

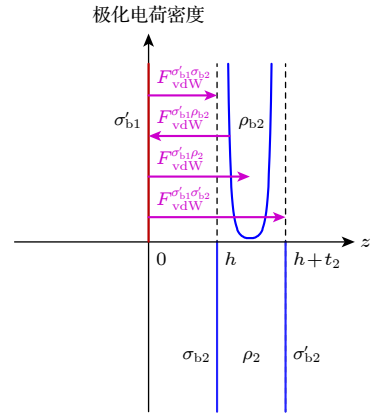


图 6 板 1 的 vdW 极化面电荷 σ'_{b1} 受到来自板 2 的 4 部分电荷的 vdW 力示意图

Fig. 6. Schematic illustration of the vdW force on the plate 1 vdW surface bound charge σ'_{b1} , exerted by the four charge components on plate 2.

其三, 对于板 1 上的 vdW 体极化电荷 ρ_{b1} , 其受到来自板 2 的作用力同样由 4 部分组成, 如图 7 所示。经计算 (补充材料 S4 (online)), 这 4 项分力之和为

$$\begin{aligned}
 F_{\text{vdW}}^{\rho_{b1}-p2} &= F_{\text{vdW}}^{\rho_{b1}\rho_{b2}} + F_{\text{vdW}}^{\rho_{b1}\sigma'_{b2}} + F_{\text{vdW}}^{\rho_{b1}\rho_2} + F_{\text{vdW}}^{\rho_{b1}\rho_2} \\
 &= \frac{C^2\pi^2 a^2 \varepsilon_{0,\text{vdW}} (\varepsilon_{r1,\text{vdW}} - 1) \rho_1 \rho_2}{4\varepsilon_{r1,\text{vdW}} \Delta t^4} \left[\frac{1}{h^4} - \frac{1}{(h+t_2)^4} + \frac{1}{(h+t_1)^4} - \frac{1}{(h+t_1+t_2)^4} \right] \\
 &\quad - \frac{C^3\pi^3 a^2 \varepsilon_{0,\text{vdW}}^2 (\varepsilon_{r1,\text{vdW}} - 1) (\varepsilon_{r2,\text{vdW}} - 1) \rho_1 \rho_2}{2\varepsilon_{r1,\text{vdW}} \varepsilon_{r2,\text{vdW}} \Delta t^4} \frac{1}{t_2^4} \left[\frac{1}{h^5} + \frac{1}{(h+t_1)^5} + \frac{1}{(h+t_2)^5} + \frac{1}{(h+t_1+t_2)^5} \right]. \quad (25)
 \end{aligned}$$

其四, 板 1 上的 vdW 自由体电荷 ρ_1 受到来自板 2 的作用力也一样由 4 部分组成, 如图 8 所示。经计算 (补充材料 S4 (online)), 这 4 项分力之和为

$$\begin{aligned}
 F_{\text{vdW}}^{\rho_1-p2} &= F_{\text{vdW}}^{\rho_1\sigma_{b2}} + F_{\text{vdW}}^{\rho_1\sigma'_{b2}} + F_{\text{vdW}}^{\rho_1\rho_{b2}} + F_{\text{vdW}}^{\rho_1\rho_2} \\
 &= -\frac{C\pi a^2 \rho_1 \rho_2}{6} \left[\frac{1}{h^3} - \frac{1}{(h+t_1)^3} - \frac{1}{(h+t_2)^3} + \frac{1}{(h+t_1+t_2)^3} \right] \\
 &\quad + \frac{C^2\pi^2 a^2 \varepsilon_{0,\text{vdW}} (\varepsilon_{r2,\text{vdW}} - 1) \rho_1 \rho_2}{4\varepsilon_{r2,\text{vdW}} t_2^4} \left[\frac{1}{h^4} - \frac{1}{(h+t_1)^4} + \frac{1}{(h+t_2)^4} - \frac{1}{(h+t_1+t_2)^4} \right]. \quad (26)
 \end{aligned}$$

最后, 将板 1 和板 2 的作用力相加, 得到在考虑极化情况下两板间的范德瓦耳斯力:

$$\begin{aligned}
 F_{\text{vdW}}^{p1-p2} &= F_{\text{vdW}}^{\sigma_{b1}-p2} + F_{\text{vdW}}^{\sigma'_{b1}-p2} + F_{\text{vdW}}^{\rho_{b1}-p2} + F_{\text{vdW}}^{\rho_1-p2} \\
 &= -\frac{C\pi a^2 \rho_1 \rho_2}{6} \left[\frac{1}{h^3} - \frac{1}{(h+t_1)^3} - \frac{1}{(h+t_2)^3} + \frac{1}{(h+t_1+t_2)^3} \right] \\
 &\quad + \frac{C^2\pi^2 a^2 \varepsilon_{0,\text{vdW}} (\varepsilon_{r2,\text{vdW}} - 1) \rho_1 \rho_2}{4\varepsilon_{r2,\text{vdW}} t_2^4} \left[\frac{1}{h^4} - \frac{1}{(h+t_1)^4} + \frac{1}{(h+t_2)^4} - \frac{1}{(h+t_1+t_2)^4} \right] \\
 &\quad + \frac{C^2\pi^2 a^2 \varepsilon_{0,\text{vdW}} (\varepsilon_{r1,\text{vdW}} - 1) \rho_1 \rho_2}{4\varepsilon_{r1,\text{vdW}} t_1^4} \left[\frac{1}{h^4} + \frac{1}{(h+t_1)^4} - \frac{1}{(h+t_2)^4} - \frac{1}{(h+t_1+t_2)^4} \right], \quad (27)
 \end{aligned}$$

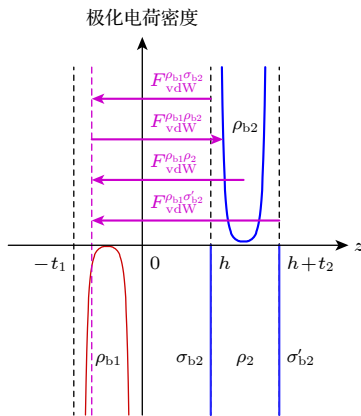


图 7 板 1 的 vdW 极化体电荷 ρ_{b1} 受到来自板 2 的 4 部分电荷的 vdW 力示意图

Fig. 7. Schematic illustration of the vdW force on the plate 1 vdW volume bound charge ρ_{b1} , exerted by the four charge components on plate 2.

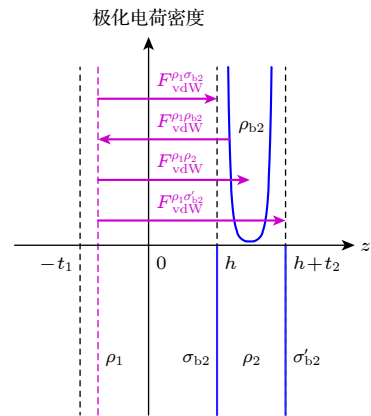


图 8 板 1 的 vdW 自由体电荷 ρ_1 受到来自板 2 的 4 部分电荷的 vdW 力示意图

Fig. 8. Schematic illustration of the vdW force on the plate 1 vdW volume free charge ρ_1 , exerted by the four charge components on plate 2.

其中的第 1 项即为 (10) 式, 也就是不考虑极化效应时的范德瓦耳斯力; 其余 3 项则为“范德瓦耳斯极化”带来的修正项. 我们还可以进行一项简单却有效的检验: 当两板的极化率均为 0 时 ($\epsilon_{r1,\text{vdW}} = \epsilon_{r2,\text{vdW}} = 1$), (27) 式即成为 (10) 式, 完全符合应有的物理图像.

为了简化表达式, 在这里定义两系数 A 和 B 分别为

$$A = -\frac{C\pi a^2 \rho_1 \rho_2}{6}, \quad B = \frac{C^2 \pi^2 a^2 \epsilon_{0,\text{vdW}} \rho_1 \rho_2}{4}.$$

$$F_{\text{vdW}}^{p1-p2} = A \left[\frac{1}{h^3} - \frac{1}{(h+t_1)^3} - \frac{1}{(h+t_2)^3} + \frac{1}{(h+t_1+t_2)^3} \right] + B \frac{(\epsilon_{r1,\text{vdW}} - 1)}{\epsilon_{r1,\text{vdW}} t_1^4} \left[\frac{1}{h^4} + \frac{1}{(h+t_1)^4} - \frac{1}{(h+t_2)^4} - \frac{1}{(h+t_1+t_2)^4} \right] + B \frac{(\epsilon_{r2,\text{vdW}} - 1)}{\epsilon_{r2,\text{vdW}} t_2^4} \left[\frac{1}{h^4} - \frac{1}{(h+t_1)^4} + \frac{1}{(h+t_2)^4} - \frac{1}{(h+t_1+t_2)^4} \right]. \quad (29)$$

(29) 式的第 1 项就是修正前的范德瓦耳斯力 ((28) 式, 亦即 (10) 式), 后两项则为范德瓦耳斯极化所带来的修正项. 值得注意的是, 当其中任意一板的极化率为 0 时 ($\epsilon_{r1,\text{vdW}} = 1$ 或 $\epsilon_{r2,\text{vdW}} = 1$), 其对应的修正项则为 0, 完全符合应有的物理图像.

4 讨论

通过绘制 (28) 式和 (29) 式对应的曲线, 可以直观地对比不考虑极化和考虑极化这两种不同情形下的范德瓦耳斯力. 图 9 绘制了两平行板之间范德瓦耳斯力 F_{vdW} 随板 2 厚度变化的计算结果. 这里选取 t_2 而不是 h 作为横坐标, 是因为在二维材料的此类实验中, 改变其中一层二维材料的厚度比改变两层二维材料间的真空间距要可行得多. 因此, 以 t_2 为横坐标计算范德瓦耳斯力对于实验更具有参考意义.

从图中可以看出, 当两板均较薄时, 材料的极化效应对板间范德瓦耳斯力的修正更为显著; 随着板 2 厚度 t_2 的逐渐增大, 极化效应对 F_{vdW} 的影响呈现出明显减弱的趋势. 从数学上看, 极化效应的修正项均和各尺度量 (厚度或间距) 均为 4 次方反比. 因此无论哪项尺度增加, 其效应均会比不含极化的范德瓦耳斯力 (尺度 3 次方反比) 更快地衰减,

由定义式可知 $A > 0, B < 0$.

这样, 两有限厚度板之间, 经典 (不考虑极化作用) 的范德瓦耳斯力为

$$F_{\text{vdW}}^{1-2} = A \left[\frac{1}{h^3} - \frac{1}{(h+t_1)^3} - \frac{1}{(h+t_2)^3} + \frac{1}{(h+t_1+t_2)^3} \right]. \quad (28)$$

而在考虑极化的情况下, 两有限厚度板间的范德瓦耳斯力为

导致其带来的修正可忽略.

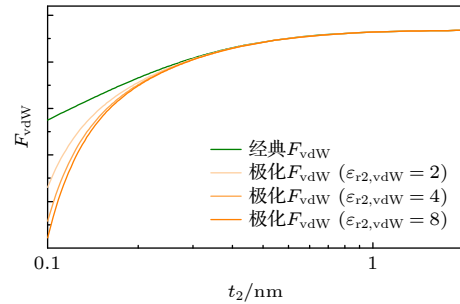


图 9 当板 1 厚度 ($t_1 = 0.7 \text{ nm}$) 不变时, F_{vdW} 的理论计算值随板 2 厚度 (t_2) 变化的关系图; 其中 $h = 0.3 \text{ nm}$, A 和 B 的数值取值分别为 0.65 和 0.000009, $\epsilon_{r1,\text{vdW}} = 4$ 保持不变 Fig. 9. Variation of the calculated F_{vdW} as a function of the thickness of plate 2 (t_2), with the thickness of plate 1 fixed at $t_1 = 0.7 \text{ nm}$, here, $h = 0.3 \text{ nm}$, the values of A and B are set to be 0.65 and 0.000009, respectively, and $\epsilon_{r1,\text{vdW}} = 4$ is kept constant.

5 结论

本工作系统研究了材料“极化”对范德瓦耳斯力带来的修正, 通过借鉴电磁学的框架, 提出了一套将材料“极化率”引入范德瓦耳斯力计算的理论方法. 包括几种特殊情况在内的多项验算均完全符合应有的物理图像. 计算结果表明, 在低维或薄层体系中, 材料的“范德瓦耳斯”极化有可能对范德瓦

耳斯力产生一定的影响,特别是在原子尺度(材料厚度、间距)下相对更为明显.因此,在二维体系中对范德瓦耳斯力的定量描述有可能需要考虑到材料“极化”特性带来的这一修正,而本工作则为定量描述这一潜在的修正作用提供了一种理论方案.进一步,本工作探究的这种二维材料几何尺度(厚度、间距)与极化响应之间的关联,为通过调节二维材料的层厚或介电环境来实现界面范德瓦耳斯力的可控调制提供了物理依据,并有望通过后期的第一性原理计算结果以及相应的实验结果对比,来为研究和理解低维异质结构中范德瓦耳斯力诱导的界面耦合行为提供新的物理视角.

参考文献

- [1] Liu Y, Huang Y, Duan X F 2019 *Nature* **567** 323
- [2] Israelachvili J N 2011 *Intermolecular and Surface Forces* (Waltham: Academic Press)
- [3] Hirschfelder J O, Curtiss C F, Bird R B 1954 *Molecular Theory of Gases and Fluids* (New York: Wiley)
- [4] Ramsden J 2016 *Nanotechnology: An Introduction* (Kidlington: William Andrew)
- [5] Gobre V, Tkatchenko A 2013 *Nat. Commun.* **4** 2341
- [6] Meng Y, Feng J G, Han S M, Xu Z H, Mao W B, Zhang T, Kim J S, Roh I, Zhao Y P, Kim D H, Yang Y, Lee J W, Yang L, Qiu C W, Bae S H 2023 *Nat. Rev. Mater.* **8** 498
- [7] Wen T, Su Z, Wang Y, Cai S, Wu J, Qin J, Jiao C, Wang Z, Zhang Z, Pei S, Xia J 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 241302 (in Chinese) [文婷, 苏子洛, 王雅兰, 蔡霜, 巫佳琦, 秦嘉泽, 焦陈寅, 王曾晖, 张泽娟, 裴胜海, 夏娟 2025 物理学报 **74** 241302]
- [8] Geim A K, Grigorieva I V 2013 *Nature* **499** 419
- [9] Zhang Q, Hu G W, Ma W L, Li P N, Krasnok A, Hillenbrand R, Alù A, Qiu C W 2021 *Nature* **597** 187
- [10] Tran K, Moody G, Wu F C, Lu X B, Choi J, Kim K, Rai A, Sanchez D A, Quan J M, Singh A, Embley J, Zepeda A, Campbell M, Autry T, Taniguchi T, Watanabe K, Lu N S, Banerjee S K, Silverman K L, Kim S, Tutuc E, Yang L, MacDonald A H, Li X Q 2019 *Nature* **567** 71
- [11] Yan X D, Zheng Z R, Sangwan V K, Qian J H, Wang X Q, Liu S E, Watanabe K, Taniguchi T, Xu S Y, Jarillo-Herrero P, Ma Q, Hersam M C 2023 *Nature* **62** 551
- [12] Chen D X, Lian Z, Huang X, Su Y, Rashetnia M, Yan L, Blei M, Taniguchi T, Watanabe K, Tongay S, Wang Z H, Zhang C W, Cui Y T, Shi S F 2022 *Nat. Commun.* **13** 4810
- [13] Miao S N, Wang T M, Huang X, Chen D X, Lian Z, Wang C, Blei M, Taniguchi T, K Watanabe, Tongay S, Wang Z H, Xiao D, Cui Y T, Shi S F 2021 *Nat. Commun.* **12** 3608
- [14] Cao Y, Fatemi V, Fang S A, Watanabe K, Taniguchi T, Kaxiras E, Jarillo-Herrero P 2018 *Nature* **556** 43
- [15] Oh M, Nuckolls K P, Wong D, Lee R L, Liu X, Watanabe K, Taniguchi T, Yazdani A 2021 *Nature* **600** 240
- [16] Qiao Y J, Zhang Z T, Shao T N, Zhao Q, Chen X Y, Chen M H, Zhu F H, Nie J C 2023 *Acta Phys. Sin.* **72** 137302 [乔宇杰, 张子涛, 邵婷娜, 赵强, 陈星宇, 陈美慧, 朱芳慧, 聂家财 2023 物理学报 **72** 137302]
- [17] Cao Y, Fatemi V, Demir A, Fang S, Tomarken S L, Luo J Y, Sanchez-Yamagishi J D, Watanabe K, Taniguchi T, Kaxiras E, Ashoori R C, Jarillo-Herrero P 2018 *Nature* **556** 80
- [18] Xu Y, Liu S, Rhodes D A, Watanabe K, Taniguchi T, Hone J, Elser V, Mak K F, Shan J 2020 *Nature* **587** 214
- [19] Chen D X, Lian Z, Huang X, Su Y, Rashetnia M, Ma L, Yan L, Blei M, Xiang L, T Taniguchi, Watanabe K, Tongay S, Smirnov D, Wang Z H, Zhang C W, Cui Y T, Shi S F 2022 *Nat. Phys.* **18** 1171
- [20] Regan E C, Wang D, Paik E Y, Zeng Y, Zhang L, Zhu J, MacDonald A H, Deng H, Wang F 2022 *Nat. Rev. Mater.* **7** 778
- [21] Akamatsu T, Ideue T, Zhou L, Dong Y, Kitamura S, Yoshii M, Yang D, Onga M, Nakagawa Y, Watanabe K, Taniguchi T, Laurienzo J, Huang J, Ye Z, Morimoto T, Yuan H, Iwasa Y 2021 *Science* **372** 68
- [22] Griffiths D J 2023 *Introduction to electrodynamics*(Glenview: Pearson Education)

A model for describing van der Waals force in the presence of medium*

WEN Ting^{1)†} WANG Zenghui^{2)‡}1) (*School of Electronic Information, Huzhou College, Huzhou 313000, China*)2) (*Institute of Fundamental and Frontier Sciences, University of Electronic Science and Technology of China, Chengdu 610054 China*)

(Received 27 March 2026; revised manuscript received 6 April 2026)

Abstract

van der Waals (vdW) force, a relatively weak and short-ranged fundamental physical interaction, is ubiquitous in nature. It plays a crucial role in understanding a wide range of physical processes as well as in the design of nanoscale devices. Existing theoretical descriptions are mostly based on the assumption that vdW interaction only “propagates” in the very small vacuum gap between two surfaces given its very short range, so that material polarization can be safely ignored. However, such assumption might not be entirely true for two-dimensional (2D) materials, for which the material thickness is comparable with the range of vdW force, and often vdW interaction “propagates” not only in vacuum but also through the 2D materials. In this work, we propose a theoretical approach that explicitly takes into account material polarization for the calculation of vdW force. By introducing “vdW polarization”, i.e. an effective dielectric response, and borrowing concepts from electrostatics, our theory quantifies the propagation and coupling of fluctuating electromagnetic fields in heterogeneous space where 2D material and vacuum are both present. We find that such “vdW polarization” can result in a perturbation term to both the strength and distance dependence of vdW force. Our theoretical framework provides a practical approach for describing and analyzing vdW force in complex dielectric environments, particularly in 2D heterostructures, and offers a useful theoretical basis for understanding and tuning interfacial coupling in low-dimensional material systems.

Keywords: van der Waals force, 2-dimensional materials, interlayer interaction, polarization

DOI: [10.7498/aps.75.20260426](https://doi.org/10.7498/aps.75.20260426)

CSTR: [32037.14.aps.75.20260426](https://cstr.net/urn:nid:CN:32037.14.aps.75.20260426)

* Project supported by the Natural Science Foundation of Zhejiang Province, China (Grant No. ZCLQN25A0407), the Natural Science Foundation of Huzhou, China (Grant No. 2025YZ20), and the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. T2325007, 62450003, W2541020).

† Corresponding author. E-mail: wenting@zjhzu.edu.cn

‡ Corresponding author. E-mail: zenghui.wang@uestc.edu.cn



一种描述介质对范德瓦耳斯力影响的模型

文婷 王曾晖

A model for describing van der Waals force in the presence of medium

WEN Ting WANG Zenghui

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 080711 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20260426

CSTR: 32037.14.aps.75.20260426

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20260426>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

二维范德瓦耳斯铁电材料的研究进展

Recent progress of two-dimensional van der Waals ferroelectric materials

物理学报. 2026, 75(1): 080711 <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251367>

二维MoS₂压痕过程异质界面范德瓦耳斯力引起的撕裂行为

Tearing behavior induced by van der Waals force at heterogeneous interface during two-dimensional MoS₂ nanoindentation

物理学报. 2022, 71(19): 194601 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220875>

二维范德瓦耳斯材料的超导物性研究及性能调控

Two-dimensional van der Waals: Characterization and manipulation of superconductivity

物理学报. 2022, 71(18): 187401 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220638>

范德瓦耳斯材料的原位应变工程与应用

In-situ strain engineering and applications of van der Waals materials

物理学报. 2024, 73(11): 110701 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240353>

几种范德瓦耳斯铁电材料中新奇物性的研究进展

Research progress of novel properties in several van der Waals ferroelectric materials

物理学报. 2022, 71(12): 127305 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220349>

二维范德瓦耳斯异质结构的制备与物性研究

The fabrication and physical properties of two-dimensional van der Waals heterostructures

物理学报. 2022, 71(4): 048502 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212033>