

不同力程排斥相互作用胶体粒子系统的摩擦特性*

段浩炀 杨柯欣 曹义刚†

(郑州大学物理学院: 中原之光实验室, 郑州 450001)

(2023 年 10 月 25 日收到; 2024 年 6 月 5 日收到修改稿)

利用朗之万分子动力学, 数值研究了无序点钉扎衬底上二维胶体粒子系统的摩擦特性. 本文考虑了三种不同的模型胶体粒子系统, 每种系统中胶体粒子之间的相互作用均被模拟为两种不同力程的排斥势. 研究发现: 每种模型系统均存在两个最大静摩擦力 (第一最大静摩擦力 f_{c1}^d 和第二最大静摩擦力 f_{c2}^d); 力程相近的短程排斥相互作用之间的干涉会导致粒子间排斥增强, 从而导致 f_{c1}^d 的明显降低和 f_{c2}^d 以上沿外场驱动力方向上运动有序的加强. 本文的研究结果有助于揭示具有不同力程相互作用胶体粒子系统的摩擦机制.

关键词: 摩擦, 胶体, 塑性流动, 运动有序

PACS: 62.20.Qp, 82.70.Dd, 64.60.Ht, 05.45.-a

DOI: 10.7498/aps.73.20231701

1 引言

摩擦发生在从纳米尺度到地球物理尺度的各种系统中, 并起着至关重要的作用^[1]. 随着纳米技术的发展, 我们可以深入地了解摩擦的微观本质^[2,3]. 最近一些研究讨论了多尺度相互作用胶体粒子系统的动力学摩擦特性^[4-6].

胶体是一个典型的多尺度相互作用粒子系统, 其中胶体粒子之间的相互作用具有不同的作用力程. 在一些胶体粒子系统中, 胶体粒子之间通过排斥和吸引相互作用的竞争, 自发地从环境中吸取能量, 并将其存储于自身, 用以克服阻力做功^[7-10]. 研究表明, 这类系统能够呈现出各种动态有序结构, 如群集、活性团簇^[11,12] 和生命岛状结构^[13-17] 等. 有序结构被认为与自驱动密切相关^[14,18-20], 并在外场中会表现出各种非平衡行为^[8,21,22]. 因此, 可以利用外场控制和调节群集、相分离^[17,23,24]、甚至生物组织等^[25,26].

多粒子系统中的有序性曾被公认为源于粒子

之间的吸引^[27], 而有些学者却在具有不同力程的排斥相互作用粒子系统中发现了动力学有序现象^[28,29]. 蒙特卡罗模拟^[30] 结果显示, 条纹相等有序结构的形成可能是由于粒子之间存在不同力程的排斥相互作用. 目前, 相互作用多粒子系统动态有序结构的起因仍存在争议.

本文数值研究无序钉扎衬底上二维胶体粒子系统的摩擦特性. 这里用随机分布的点钉扎中心模拟无序衬底, 并考虑三种不同的模型胶体粒子系统, 其中胶体粒子之间的相互作用均具有两种不同的力程. 通过比较不同模型胶体粒子系统在外场力作用下的摩擦特性, 发现三种系统均存在两个最大静摩擦力, 且在第二最大摩擦力以上, 两个相近短程的排斥相互作用会使胶体粒子系统在外场驱动力方向上的运动有序加强.

2 模型

每种模型胶体粒子系统均由 400 个胶体粒子组成, 它们最初被放置在一个理想的三角格点中,

* 河南省高等学校重点科研项目 (批准号: 22A140029)、河南省自然科学基金 (批准号: 222300420552) 和河南省研究生教育改革与质量提升工程项目 (批准号: YJS2024KC06) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: physycao@zsu.edu.cn

x 和 y 方向上满足周期性边界条件. 胶体粒子的运动用过阻尼朗之万方程描述:

$$\eta \frac{dR_i}{dt} = - \sum_{i \neq j} \nabla_i U(R_i - R_j) - \sum_j \nabla_j U_p(R_i - r_j) + f^d + f_i^T, \quad (1)$$

其中 η 是黏度系数; R_i 和 r_j 分别是第 i 个胶体粒子和第 j 个钉扎中心的坐标; U 是胶体粒子之间的相互作用; U_p 是胶体粒子和衬底上钉扎中心之间的相互作用; f^d 是外场驱动力 (例如, 电场或磁场); f_i^T 是随机涨落力, 满足 [3,8,15,31] $\langle f_i^T(t) \rangle = 0$ 和 $\langle f_{i\alpha}^T(t) f_{j\beta}^T(t') \rangle = 2\eta T \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \delta(t - t')$, 其中 T 是温度, α 和 β 分别是 f_i^T 和 f_j^T 的分量.

本文考虑了三种模型胶体粒子系统, 其中粒子之间相互作用势随粒子之间距离的变化如图 1 所示. 在模型 1 中, 粒子之间的相互作用势为

$$U(r_{ij}) = U_{\text{Coulomb}}(r_{ij}) + U_{\text{dipole}}(r_{ij}), \quad (2)$$

式中 $r_{ij} = |R_i - R_j|$; $U_{\text{Coulomb}}(r_{ij})$ 和 $U_{\text{dipole}}(r_{ij})$ 分别为长程库仑势和短程磁偶极子势, $U_{\text{Coulomb}}(r_{ij}) = \frac{Q^2}{r_{ij}}$, $U_{\text{dipole}}(r_{ij}) = \frac{\mu_0 \chi^2 B^2}{4\pi r_{ij}^3}$. 这里, Q 是胶体粒子电量, μ_0 是真空磁导率, χ 是磁化率, B 是磁场强度. 图 2 给出了库仑相互作用势、磁偶极子势以及库仑+磁偶极子势随距离的变化. 显然, 模型 1 中粒子之间的相互作用势在钉扎中心的尺度附近接近于库仑势.

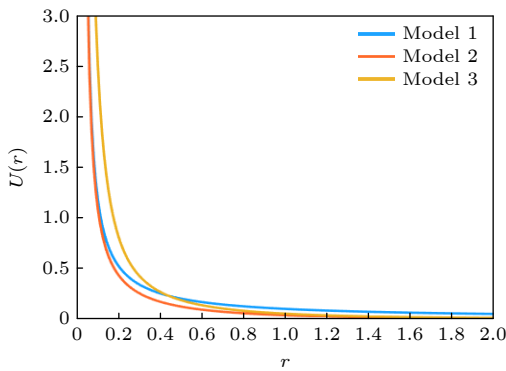


图 1 三种模型胶体粒子系统中粒子间相互作用势随粒子间距离的变化

Fig. 1. Distance dependences of the interaction potentials in three model systems.

在模型 2 中, 粒子之间的相互作用势为

$$U_{ij}(r_{ij}) = U_{\text{dipole}}(r_{ij}) + U_{\text{screening}}(r_{ij}), \quad (3)$$

式中 $U_{\text{dipole}}(r_{ij})$ 是 (1) 式中的短程磁偶极子势; $U_{\text{screening}}(r_{ij})$ 是短程库仑屏蔽势, $U_{\text{screening}}(r_{ij}) = e^{-r_{ij}/\lambda} \frac{Q^2}{r_{ij}/\lambda}$, 其中 λ 是屏蔽长度. 图 3 给出了磁偶极子势、屏蔽库仑势以及磁偶极子+屏蔽库仑势随距离的变化. 与模型 1 类似, 模型 2 中粒子之间的相互作用势在钉扎中心的尺度附近接近于屏蔽库仑势.

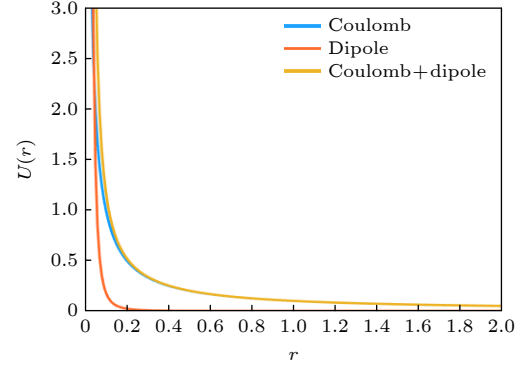


图 2 库仑势、磁偶极子势以及库仑+磁偶极子势随距离的函数关系曲线

Fig. 2. Distance dependences of the Coulomb, magnetic dipole and Coulomb + magnetic dipole potentials.

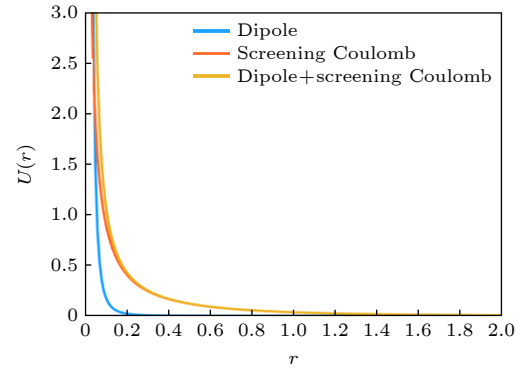


图 3 磁偶极子势、屏蔽库仑势以及磁偶极子+屏蔽库仑势随距离的函数关系曲线

Fig. 3. Distance dependences of the magnetic dipole, screening Coulomb and magnetic dipole + screening Coulomb potentials.

在模型 3 中, 粒子之间的相互作用势取:

$$U(r_{ij}) = U_{\text{nuclear}}(r_{ij}) + U_{\text{screening}}(r_{ij}), \quad (4)$$

式中, $U_{\text{nuclear}}(r_{ij})$ 表示短程排斥核势; $U_{\text{nuclear}}(r_{ij}) = 4\varepsilon(\sigma/r_{ij})^{12}$, 其中, ε 是势强度, σ 是胶体粒子的直径. 图 4 给出了屏蔽库仑势、排斥核势以及屏蔽库仑势+排斥核势随距离的变化. 从图 4 可以清楚地看出, 由于屏蔽库仑势和排斥核势之间的干涉, 模型 3 中粒子之间的相互作用势在钉扎中心尺度附近明显增强.

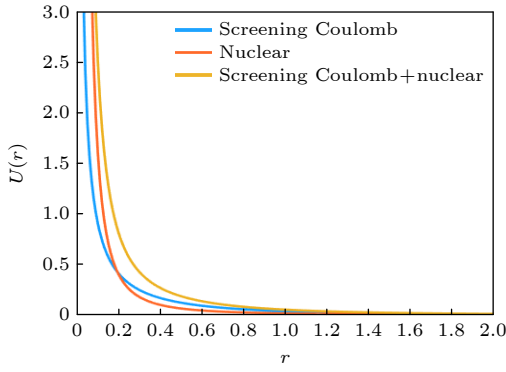


图4 屏蔽库仑势、排斥核势以及屏蔽库仑+排斥核势随距离的函数关系曲线

Fig. 4. Distance dependences of the screening Coulomb, nuclear and screening Coulomb + nuclear potentials.

胶体粒子和衬底钉扎中心之间的相互作用取高斯吸引势^[15,31] $U_{ij}(r_{ij}) = -U_0 e^{-(r_{ij}/r_0)^2}$. 这里 U_0 是钉扎势的强度, r_0 是钉扎中心的范围.

所有物理量都取无量纲化. 长度以理想三角格点的晶格常数 a_0 为基准, $\sigma = r_0 = 0.2a_0$. 屏蔽长度取 $\lambda = a_0$. 温度以二维纯系统^[3,32] 的 Kosterlitz-Thouless 相变温度 T_{m0} 为基准, 并固定 $T = 0.001T_{m0}$. 驱动力 f^d 沿 x 轴方向, 平均速度 $V = \left(\frac{1}{N}\right) \sum_{i=1}^N V_i \cdot \hat{x}$. 这里 N 是胶体粒子的数目. 时间积分步长取 $\Delta t = 0.001$, 并取 1×10^5 的步数以达到平衡, 取 1×10^5 步数求平均.

3 结果分析与讨论

图5给出了三种模型胶体粒子系统的平均速度随外场驱动力的变化. 这里, $\varepsilon = 0.1$, $Q^2 = 0.1$, $\sqrt{\frac{\mu_0}{4\pi}} \chi B = 0.0135$, $U_0 = 1$. 我们发现, 每种系统都存在两个明显的最大静摩擦力 f_{c1}^d 和 f_{c2}^d . 模型1的第一最大静摩擦力 f_{c1}^d 之下, 所有胶体粒子都被钉扎在钉扎中心附近, 如图6(a)所示, 其中一些被钉扎的胶体粒子在热涨落的驱动下从一个钉扎中心跳到另一个钉扎中心, 导致出现小的平均速度, 可以忽略. 模型2的情况与模型1几乎一样, 如图6(b)所示, 只是模型1显示的 f_{c1}^d 比模型2的 f_{c1}^d 稍小一些. 然而, 模型3给出比模型1和模型2小得多的第一最大静摩擦力 f_{c1}^d , 甚至在 f_{c1}^d 之下, 一些胶体粒子即开始脱离钉扎中心, 如图6(c)所示, 导致出现不可忽略的不稳定平均速度. 这是因为模型3中两种相互作用力程相近, 它们之间的干涉会导致在

钉扎中心尺度附近的排斥作用明显增强, 见图1和图4. 因此, 即使施加比模型1和模型2小得多的驱动力, 部分胶体粒子也会脱离钉扎中心的吸引. 值得指出的是, 模型1中的 f_{c1}^d 比模型2中的 f_{c1}^d 稍小一些的原因是由于在钉扎中心尺度附近库仑势略强于屏蔽库仑势, 见图1、图2和图3, 导致较小的外场驱动力就可以驱使部分胶体粒子脱离钉扎中心的吸引.

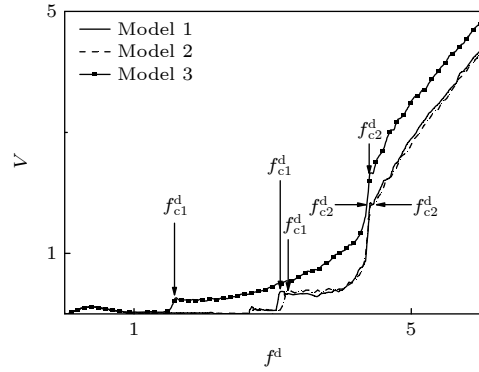


图5 平均速度随外场驱动力的变化

Fig. 5. Driving force dependence of the average velocity.

在第一最大静摩擦力 f_{c1}^d 以上, 系统开始出现稳定速度, 该速度随外场驱动力缓慢增加, 这是塑性流动的特征. 此时, 部分胶体粒子在钉扎中心的间隙内流动, 而其他胶体粒子仍然被钉扎在钉扎中心附近, 如图6(a')—(c')所示. 三种模型胶体粒子系统均表现为塑性流动. 比较图6(a')—(c')可以发现, 与模型1和模型2相比, 模型3中胶体粒子之间的排斥作用较强, 从而导致钉扎中心的间隙内运动胶体粒子较多.

随着外场驱动力的进一步增加, 系统到达第二最大静摩擦力 f_{c2}^d , 此时, 系统中粒子之间的相互作用力与外场驱动力相比足够小, 几乎可以忽略, 因而三种模型系统的第二最大静摩擦力几乎相等. f_{c2}^d 之上, 所有胶体粒子均脱离钉扎中心的吸引并开始运动. 当外场驱动力足够大时, 大部分粒子沿外场驱动力方向运动, 运动有序开始出现, 如图7(a)—(c)所示. 为了更清楚地展示这种有序, 图7(a)—(c)给出了 f_{c2}^d 之上三种模型系统胶体粒子运动位形的结构因子 $S(k_x) = \left\langle \left| \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \exp(ik_x x) \right|^2 \right\rangle$, 其中 k_x 为 x 方向波矢. 可以清楚地看出六重配位布拉格峰对称分布于 $k_x = 0$ 两侧 (注意, $k_x = 0$ 附近的峰是强度峰). 另

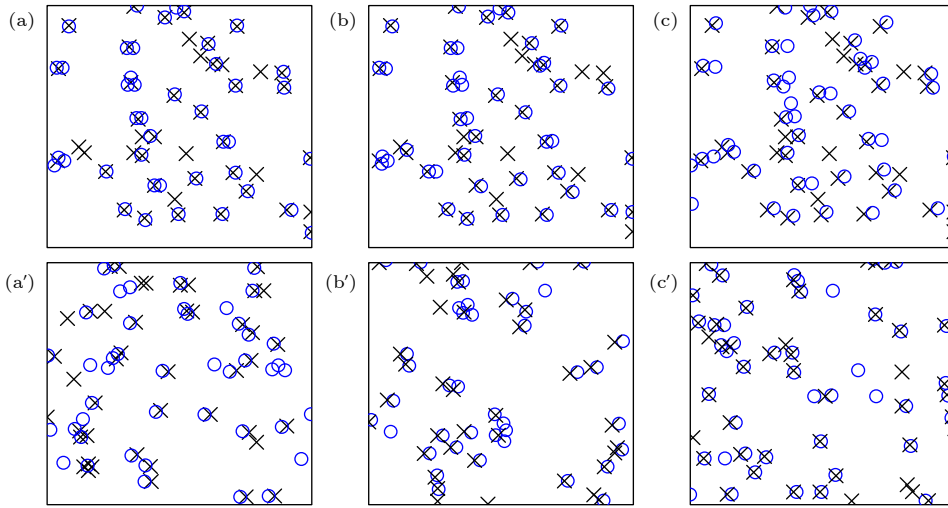


图6 模型1 (a), (a')、模型2 (b), (b') 和模型3 (c), (c') 中, 胶体粒子分别在第一最大静摩擦力 f_{c1}^d 下方 (a)–(c) 和上方 (a')–(c') 的位形快照, 钉扎中心用×号表示

Fig. 6. Snapshots of particle coordinates below (a)–(c) and above (a')–(c') the first maximum static friction f_{c1}^d for models 1 (a), (a'), 2 (b), (b') and 3 (c), (c'). The pinning centers are denoted by crosses.

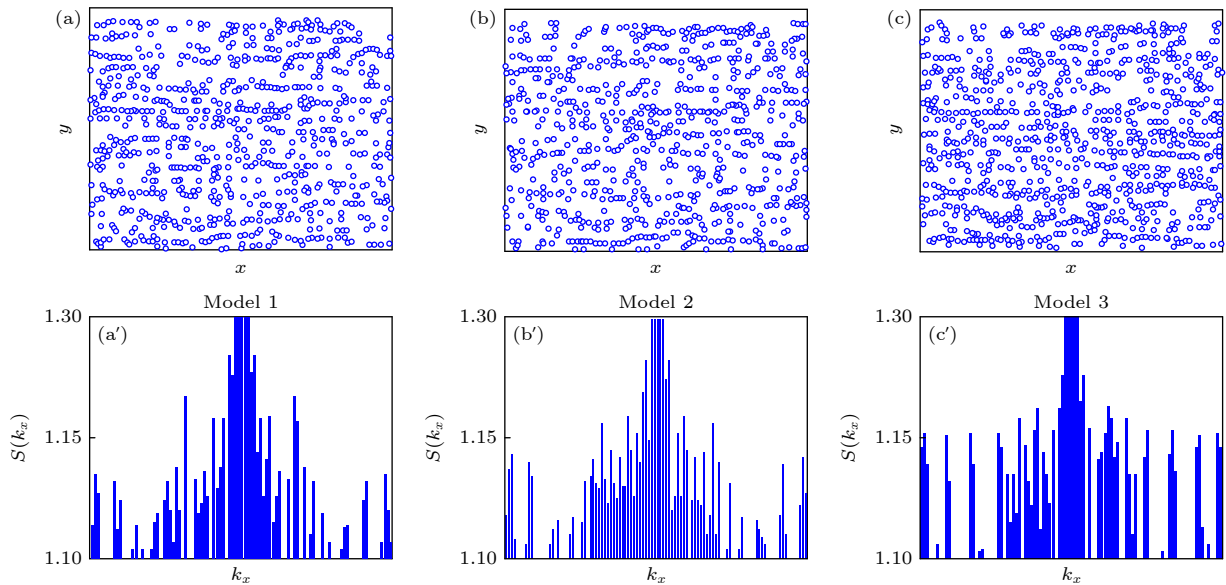


图7 模型1 ((a), (a'))、模型2 ((b), (b')) 和模型3 ((c), (c')) 胶体粒子系统在第二最大静摩擦力 f_{c2}^d 之上的运动位形和结构因子

Fig. 7. Flow trajectories of particles and corresponding structure factors along x direction above the second maximum static friction f_{c2}^d for model 1 ((a) and (a')), model 2 ((b) and (b')) and model 3 ((c) and (c')) systems, respectively.

外, 从图7(c) 和图7(c') 还可以看出, 模型3呈现出比模型1 和模型2 更加有序的运动结构. 这表明不同的相近短力程排斥相互作用之间的干涉会导致粒子之间的排斥相互作用增强, 从而导致外场驱动力方向上的运动有序加强.

4 结 论

本文研究了三种模型胶体粒子系统的摩擦特性. 每种模型系统中粒子之间的相互作用均被模拟

为两种不同力程的排斥相互作用. 研究发现; 每种胶体粒子系统均存在两个最大静摩擦力; 具有相近力程的短程排斥相互作用之间的干涉会导致粒子之间的排斥增强, 从而导致第一最大静摩擦力的显著降低和第二最大静摩擦力以上外场驱动力方向上的运动有序加强. 应该指出的是, 本文没有发现在活性系统中出现的活性团簇和生命岛状等有序结构. 本文的研究结果能够为揭示多尺度多粒子系统的摩擦机制提供指导.

感谢郑州大学 Zahid Muhammad 博士在修改稿中给予的帮助。

参考文献

- [1] Vanossi A, Manini N, Urbakh M, Zapperi S, Tosatti E 2013 *Rev. Mod. Phys.* **85** 529
- [2] Michael U, Ernst M 2010 *Nat. Mater.* **9** 8
- [3] Zhang Z Y, Wu C G, Zhang Q, Cao Y G 2020 *Friction* **8** 666
- [4] Ramaswamy M, Lin N Y C, Leahy B D, Ness C, Fiore A M, Swan J W, Cohen I 2017 *Phys. Rev. X* **7** 041005
- [5] Lerosé A, Žunkovič B, Marino J, Gambassi A, Silva A 2019 *Phys. Rev. B* **99** 045128
- [6] Driver T, Cooper B, Ayers R, Pipkorn R, Patchkovskii S, Averbukh V, Klug D R, Marangos J P, Frasiniski L J, Edelson-Averbukh M 2020 *Phys. Rev. X* **10** 041004
- [7] Marchetti M C, Joanny J F, Ramaswamy S, Liverpool T B, Prost J, Rao M, Simha R A 2013 *Rev. Mod. Phys.* **85** 1143
- [8] Zhang T H, Kuipers B W M, Tian W D, Groenewold J, Kege W K 2015 *Soft Matter* **11** 297
- [9] Gilpin W, Bull M S, Prakash M 2020 *Nat. Rev. Phys.* **2** 74
- [10] Arora P, Sood A K, Ganapathy R 2021 *Sci. Adv.* **7** eabd0331
- [11] Chen J X, Chen G Y, Kapral R 2018 *Sci. Adv.* **5** 1800028
- [12] Cui R F, Chen Q H, Chen J X 2020 *Nanoscale* **12** 12275
- [13] Mognetti B M, Šarić A, Angioletti-Uberti S, Cacciuto A, Valeriani C, Frenkel D 2013 *Phys. Rev. Lett.* **111** 245702
- [14] Solon A P, Stenhammar J, Wittkowski R, Kardar M, Kafri Y, Cates M E, Tailleur J 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 198301
- [15] Cao T T, Li Z, Lü W L, Cao Y G 2017 *J. Phys. Commun.* **1** 045008
- [16] Alshareedah I, Kaur T, Ngo J, Seppala H, Kounatse L D, Wang W, Moosa M M, Banerjee P R 2019 *J. Am. Chem. Soc.* **141** 14593
- [17] Mondal M, Mishra C K, Banerjee R, Narasimhan S, Sood A K, Ganapathy R 2020 *Sci. Adv.* **6** eaay8418
- [18] Theurkauff I, Cottin-Bizonne C, Palacci J, Ybert C, Bocquet L 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 268303
- [19] Velasco A C, Abkenar M, Gompper G, Auth T 2018 *Phys. Rev. E* **98** 022605
- [20] Rudner M S, Lindner N H 2020 *Nat. Rev. Phys.* **2** 229
- [21] Wittmann R, Brader J M, Sharma A, Marconi U M B 2018 *Phys. Rev. E* **97** 012601
- [22] Skou M G, Skov T G, Jorgensen N B, Nielsen K K, Camacho-Guardian A, Pohl T, Bruun G M, Arlt J J 2021 *Nat. Phys.* **17** 731
- [23] Digregorio P, Levis D, Pagonabarraga I 2018 *Phys. Rev. Lett.* **121** 098003
- [24] Park J, Zhao H B, Kang S D, Lim K, Chen C C, Yu Y S, Braatz R D, Shapiro D A, Hong J, Toney M F, Bazant M Z, Chueh W C 2021 *Nat. Mater.* **20** 991
- [25] Chubak I, Likos C N, Kremer K, Smrek J 2020 *Phys. Rev. Res.* **2** 043249
- [26] Shi X Q, Fausti G, Chaté H, Nardini C, Solon A 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 168001
- [27] Chattoraj J, Ciamarra M P 2020 *Phys. Rev. Lett.* **124** 028001
- [28] Malescio G, Pellicane G 2003 *Nat. Mater.* **2** 97
- [29] Delfau J B, Ollivier H, López C, Blasius B, Hernández-García E 2016 *Phys. Rev. E* **94** 042120
- [30] Daza F A G, Cuetos A, Patti A 2020 *Phys. Rev. E* **102** 013302
- [31] Li X D, Wu C G, Cao T T, Cao Y G 2019 *Physica A* **515** 279
- [32] Fisher D S 1980 *Phys. Rev. B* **22** 1190

Friction characteristics of colloidal particle systems with repulsive interactions of different force ranges^{*}

Duan Hao-Yang Yang Ke-Xin Cao Yi-Gang[†]

(School of Physics and Laboratory of Zhongyuan Light, Zhengzhou University, Zhengzhou 450001, China)

(Received 25 October 2023; revised manuscript received 5 June 2024)

Abstract

Friction occurs in various systems from the nanoscale to the geophysical scale and plays a crucial role. The microscopic mechanism of friction and the origin of the dynamic ordering in interacting particle systems are still controversial. Using Langevin simulations, we study the friction of two-dimensional colloids on the substrate with randomly distributed point-like pinning centers. We consider three different model colloidal systems, and in each system the colloidal particles interact with each other through repulsive interactions that have two different force ranges. We find two maximum static friction forces (the first maximum static friction f_{c1}^d and the second maximum static friction f_{c2}^d). The interference between short-range repulsive interactions with similar force ranges in model-3 colloidal system can lead the repulsion between particles near pinning centers to significantly increase, resulting in a decrease in f_{c1}^d and an enhanced orderly movement along the direction of external driving forces above f_{c2}^d . The results provide guidance for revealing the friction mechanism in the colloidal particles with interactions that have different force ranges.

Keywords: friction, colloids, plastic flow, moving order

PACS: 62.20.Qp, 82.70.Dd, 64.60.Ht, 05.45.-a

DOI: [10.7498/aps.73.20231701](https://doi.org/10.7498/aps.73.20231701)

^{*} Project supported by the Key Scientific Research Projects of Colleges and Universities in Henan Province, China (Grant No. 22A140029), the Natural Science Foundation of Henan Province, China (Grant No. 222300420552), and the Postgraduate Education Reform and Quality Improvement Project of Henan Province, China (Grant No. YJS2024KC06).

[†] Corresponding author. E-mail: physycao@zzu.edu.cn



不同力程排斥相互作用胶体粒子系统的摩擦特性

段浩炀 杨柯欣 曹义刚

Friction characteristics of colloidal particle systems with repulsive interactions of different force ranges

Duan Hao-Yang Yang Ke-Xin Cao Yi-Gang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 73, 156201 (2024) DOI: 10.7498/aps.73.20231701

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231701>

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

椭球胶体在圆球胶体体系中扩散行为的实验研究

Experimental study of diffusion behaviors of an ellipsoidal colloid in spherical colloid systems

物理学报. 2020, 69(23): 238201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20201301>

氮掺杂对石墨烯摩擦学特性影响的分子动力学模拟

Effect of N-doping on tribological properties of graphene by molecular dynamics simulation

物理学报. 2022, 71(14): 146801 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212309>

TiO₂ 纳米粉在水中通过摩擦还原CO₂

Reduction of CO₂ by TiO₂ nanoparticles through friction in water

物理学报. 2021, 70(21): 214601 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210210>

软体机器人用多孔聚合物水凝胶的摩擦接触非线性行为

Nonlinear frictional contact behavior of porous polymer hydrogels for soft robot

物理学报. 2021, 70(12): 120201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202134>

悬浮石墨烯摩擦特性

Friction properties of suspended graphene

物理学报. 2021, 70(8): 086801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201796>

基于磁过滤技术TiAlCN/TiAlN/TiAl复合体系腐蚀及摩擦学性能

Corrosion and tribological properties of TiAlCN/TiAlN/TiAl composite system deposited by magnetic filter cathode vacuum arc technique

物理学报. 2020, 69(10): 107202 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200012>