

01;05

Два универсальных режима отрыва адгезионной пленки

© А.Э. Филиппов, В.Л. Попов

Донецкий физико-технический институт, Украина
Берлинский технический университет, Берлин, Германия
E-mail: v.popov@tu-berlin.de

Поступило в Редакцию 17 мая 2005 г.

Рассмотрена численная модель, описывающая микроскопический процесс отрыва тонкой адгезионной пленки от твердой поверхности. Качественное отличие „микроскопической“ картины поведения от стандартной макроскопической теории адгезии, основанной на энергетическом балансе, состоит в том, что отдельные элементы пленки отслаиваются от поверхности по практически одинаковой траектории независимо от направления действия внешней силы. Более подробное рассмотрение показывает, что тонкое различие в сценариях поведения в окрестности точки касания все-таки существует. Можно говорить о двух классах универсальности при $\alpha < \pi/2$ и $\alpha > \pi/2$ соответственно. Результаты исследования микроскопической модели позволяют сформулировать более корректный макроскопический критерий для отрыва адгезирующих поверхностей.

Введение. Феномен адгезии привлекает в последнее время большой интерес в области контактной механики, трибологии, технологии адгезивов и прежде всего быстро развивающихся технологий „самоклеющихся“ поверхностей [1]. Большое число исследований посвящено как теоретическим аспектам взаимодействия поверхностей с адгезией, так и их экспериментальному исследованию [1–3]. Одна из целей этих исследований диктуется потребностями робототехники и состоит в создании искусственных поверхностей типа „лапы геко“, способных многократно (обратимо) приклеиваться к поверхностям разного качества. При теоретическом исследовании адгезивных контактов обычно исходят из основной идеи классической теории Джонсона, Кендалла и Робертса (JKR) [4], состоящей в рассмотрении баланса упругой энергии деформации контактирующих тел и поверхностной энергии контакта. В настоящей работе мы показываем, что такой простой

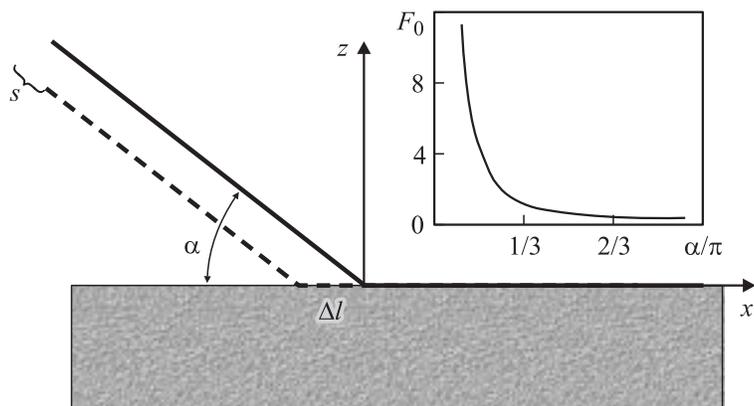


Рис. 1. Отрыв пленки от твердой плоской поверхности. Обозначения описаны в тексте. На вставке показана ожидаемая согласно формуле (1) зависимость критической силы F_0 отрыва пленки от угла α .

макроскопический подход не всегда адекватно отражает закономерности адгезии.

В качестве простейшего примера применения энергетического метода в теории адгезии рассмотрим отрыв тонкой, гибкой и нерастяжимой пленки от твердой плоской поверхности (рис. 1). Силу, приходящуюся на единицу длины пленки вдоль линии отрыва под углом α , обозначим через $\mathbf{F} = \{F_x, F_z\} = \{F \cos \alpha, F \sin \alpha\}$. Предположим, что для отрыва единицы площади пленки от поверхности требуется затратить энергию γ (эффективная поверхностная энергия взаимодействия между пленкой и поверхностью). Вычислим угол α , при котором (при заданной абсолютной величине F) линия отрыва будет находиться в равновесии. При возникновении дополнительного контакта с поверхностью длины Δl энергия пленки понижается на величину $\gamma \Delta l$. Конец пленки при этом перемещается на расстояние s , совершая против действия силы F работу Fs . В равновесии $Fs = \gamma \Delta l$. Легко показать, что $s = \Delta l(1 - \cos \alpha)$, так что $F_0(1 - \cos \alpha) = \gamma$. Через F_0 мы обозначили „силу отрыва“: при меньшей силе пленка будет самопроизвольно приклеиваться, а при большей — отрываться. Для критической силы отрыва как функции

угла отрыва получаем монотонную зависимость

$$F_0 = \gamma / (1 - \cos \alpha), \quad (1)$$

спадающую от $F_0 \gg \gamma$ при малых углах $\alpha \ll 1$ до $F_0 = \gamma/2$ при $\alpha = \pi$.

Микроскопическая модель. Если приведенные выше (стандартные) энергетические соображения являются корректными, то должно быть возможным воспроизвести результат (1) в микроскопической модели, в которой поверхностная энергия моделируется силами взаимодействия между твердыми телами (типа сил Ван дер Ваальса). Однако результаты исследования описанной ниже микроскопической модели показали, что прямое микроскопическое моделирование приводит к результатам, качественно отличающимся от (1).

В настоящей работе мы для простоты и наглядности представления результатов ограничимся рассмотрением одномерной упругой цепочки. Однако, как показывают выполненные нами дополнительные численные эксперименты, практически все излагаемые ниже результаты могут быть воспроизведены для реалистического случая двумерной пленки.

Для конструирования модели нам нужно учесть, как минимум, следующие силы: упругое взаимодействие между элементами цепочки, их притяжение к поверхности подложки и отталкивание от ее внутренних слоев, а также внешнюю отрывающую силу.

Обычно для воспроизведения упругих свойств системы достаточно ограничиться линейной связью последовательно соединенных на расстоянии dx между собой „материальных точек“ — соседних поверхностных элементов с координатами $z(x + dx)$ и $z(x)$ соответственно: $K(z(x + dx) - z(x))$. Здесь K — постоянная упругости для связи между подвижными элементами упругой цепочки. Однако известно, что линейная связь не может фиксировать расстояние между элементами в тех случаях, когда цепочка не закреплена на некоторой „подложке“ и произвольно движется в пространстве. Для адекватного моделирования такой цепочки упругая связь должна быть нелинейной [5–7]. В простейшем, широко используемом варианте (см., например, работу [8] и ссылки в ней), можно ограничиться потенциалом взаимодействия четвертого порядка: $U^{elastic}(r) = r^2(1 - r^2/2)/2$; где $r^2 = dx^2 + (z(x + dx) - z(x))^2$. В результате, искомые компоненты силы между элементами $F_x^{elastic} = -U^{elastic}/x$, $F_z^{elastic} = -U^{elastic}/z$ содержат кубическую нелинейность, не допускающую разрыва цепочки

и (при использованном ниже значении $K = 4$) достаточно жестко фиксирующую расстояние между ними.

На каждый элемент цепочки со стороны поверхности действует сила (Ван дер Ваальса) $F_x^{adhesion} = -U^{adhesion}/x$; $F_z^{adhesion} = -U^{adhesion}/z$. Соответствующий потенциал адгезии $U^{adhesion}$ может быть в большинстве случаев представлен парой гауссиан противоположного знака с регулируемой шириной, моделирующих дальнедействующее притяжение, частично компенсированное отталкиванием на коротких расстояниях: $U^{adhesion}(r) = C \exp(-r^2/c) + D \exp(-r^2/d)$. На рис. 4 этот потенциал, вычисленный при использованных далее параметрах $C = 0.8$, $c = 0.2$, $D = -8$, $d = 1$, изображен толстой серой линией. Поскольку данный потенциал не обеспечивает отталкивания цепочки от лежащего ниже „объемного образца“, его следует дополнить соответствующим δ -образным слагаемым: $U^{bulk} = U_0 \delta(z)$ ($U_0 \gg D$, $U_0 = 300$), порождающим ступенчатую силу, поддерживающую прилипающую цепочку на поверхности $F_z^{bulk} = -U^{bulk}/z$.

Наконец, будем считать для определенности, что отрыв цепочки от поверхности производится силой $\mathbf{F}^{ext} = K^{ext}(\mathbf{V}t - \mathbf{r}_1)$, создаваемой пружиной с упругостью K^{ext} , присоединенной к первому сегменту цепочки $\mathbf{r}_1 = \{x_1, z_1\}$ и подвешенной на кронштейне, удаляющемся под углом α со скоростью $\mathbf{V} = \{V_x, V_z\} = \{V \cos \alpha, V \sin \alpha\}$ (где $V = 0.2$).

В передемпфированном пределе динамические уравнения для сформулированной таким образом модели можно записать следующим образом:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= F_x^{elastic} + F_x^{adhesion} + F_x^{ext}, \\ \dot{z} &= F_z^{elastic} + F_z^{adhesion} + F_z^{ext} + F_z^{bulk}. \end{aligned} \quad (2)$$

Результаты и обсуждение. Основные результаты численного моделирования на базе системы (2) суммированы на рис. 2, на котором показаны зависимости критической силы F_r отрыва пленки (верхний фрагмент) и полного времени отрыва пленки фиксированной длины от угла α . Легко видеть, что полученная зависимость $F_r(\alpha)$ не может быть интерполирована функцией $\gamma/(1 - \cos \alpha)$, предсказываемой макроскопической теорией.

Качественное отличие „микроскопической“ картины поведения от простой геометрии, использованной при выводе соотношения (1) состоит в том, что сегменты упругой цепочки отслаиваются от поверхности

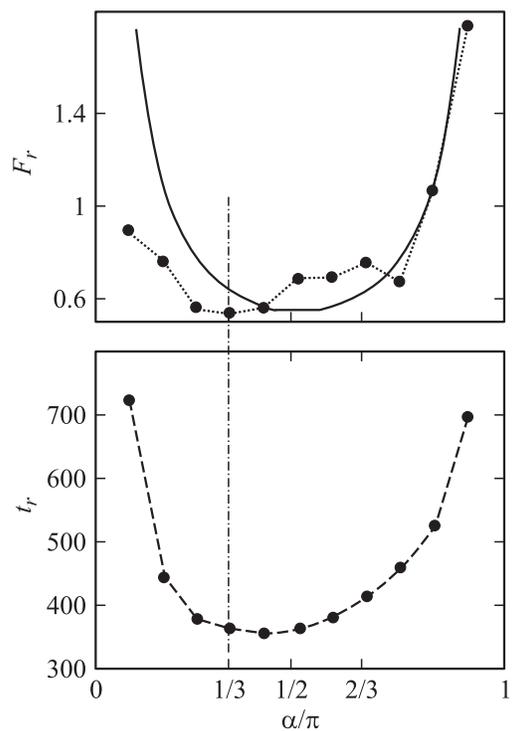


Рис. 2. Зависимости критической силы F_r отрыва пленки (верхний фрагмент) и полного времени отрыва пленки фиксированной длины от угла α , полученные в результате численного эксперимента. Сплошной линией показаны результаты макроскопической теории с учетом только работы вертикальной составляющей силы.

по практически одинаковой траектории, независимо от направления действия внешней силы. В крайней точке соприкосновения этой кривой с подложкой плоская поверхность оказывается фактически касательной к ней.

Более подробное рассмотрение показывает, что тонкое различие в сценариях поведения в окрестности точки касания все-таки существует (см. рис. 3 и подпись к нему). Можно говорить о двух классах

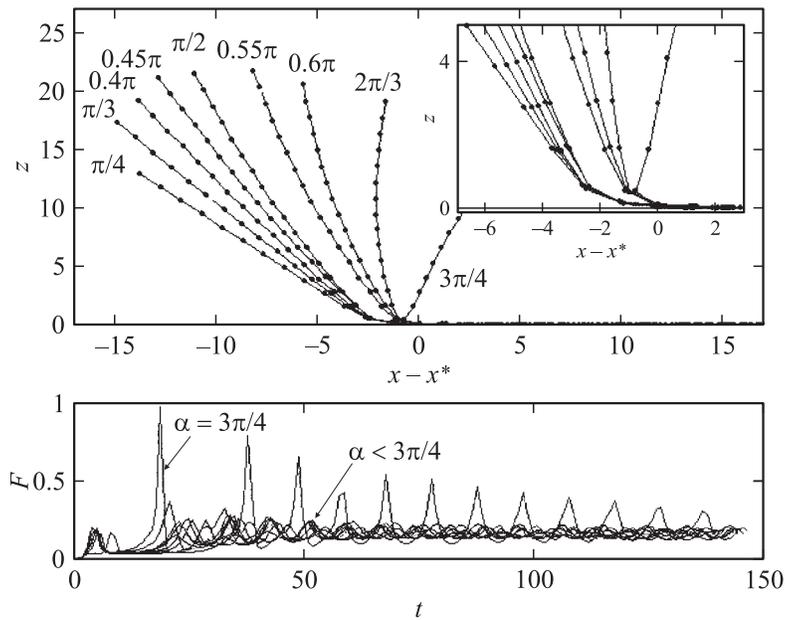


Рис. 3. Два типа универсального поведения в окрестности отрыва пленки от поверхности. Конфигурации пленки в подвижной системе координат, связанной с точкой отрыва пленки от поверхности при различных углах отрыва (верхний рисунок), и зависимость силы, действующей на сегмент пленки в области отрыва от времени (нижний рисунок). На вставке к верхнему рисунку область отрыва увеличена.

универсальности: при $\alpha < \pi/2$ и $\alpha > \pi/2$ соответственно. Однако это различие намного меньше, чем можно было ожидать в столь широком диапазоне углов $0 < \alpha < \pi$.

Как видно из рис. 2, величина критической силы и эффективность выполняемой ею работы, характеризующаяся временем отрыва цепочки заданной длины, оказываются (почти) симметричными по отношению к вертикали $\alpha = \pi/2$ функциями угла. Принимая во внимание обнаруженную симметрию, следует заново рассмотреть процесс отщепления цепочки от поверхности.

Поскольку во всех случаях отслоение очередного сегмента от поверхности идет по касательной к ней, горизонтальная составляющая внешней силы „расходуется“ на работу по удлинению сегментов цепочки (т.е. против силы упругости) вдоль этого направления. Против потенциала адгезии $U^{adhesion}$, таким образом, работает только вертикальная составляющая силы $F_x^{ext} = F \sin \alpha$. На расстоянии порядка ширины этого потенциала d она и должна совершить работу, достаточную для извлечения сегмента: $F_r d \sin \alpha = U^{adhesion}|_{z=0}$. Это приводит к зависимости силы отрыва F_r от угла, $F_r \sim 1/\sin \alpha$, которая показана на рис. 1 сплошной линией и очень хорошо аппроксимирует полученные численно результаты.

При дискретном численном описании системы (или для реальных молекулярных цепочек) такой сценарий отделения сегментов от поверхности должен приводить к пошаговому процессу, близкому к периодическому. Каждый сегмент вытягивается на некоторую длину, близкую к равновесной, и одновременно отслаивается от поверхности. Дальнейшее натяжение вовлекает в движение следующий сегмент и т.д.

Этот процесс приводит к формированию квазипериодической зависимости силы $F(t)$ от времени в области отрыва, показанной на рис. 3. В наибольшей степени колебания $F(t)$ проявляются при скользящих углах, близких к $\alpha = \pi$. В континуальном пределе (когда расстояние между элементами цепочки значительно меньше характерной ширины потенциала адгезии) зависимость $F(t)$ вырождается в монотонную.

Эффективный потенциал $U_{eff}^{(k)}(z)$, который „чувствует“ произвольный элемент k -й (внутренний) сегмент цепочки при удалении на расстояние z от поверхности, может быть получен численным интегрированием вертикальной проекции силы $F^z(z(t))$ по текущей реализации $z(t)$:

$$U_{eff}^{(k)}(z) = \int F(z(t)) dz(t). \quad (3)$$

Результат интегрирования, полученный при различных углах, показан на рис. 4. Он хорошо согласуется (с учетом колебаний, связанных с отрывом дискретных сегментов) с затравочной формой адгезивного потенциала. При относительно небольших отклонениях α от $\pi/2$ ($\pi/4 < \alpha < 3\pi/4$) он практически не зависит от направления внешней силы. Это также свидетельствует в пользу предположения о том, что в

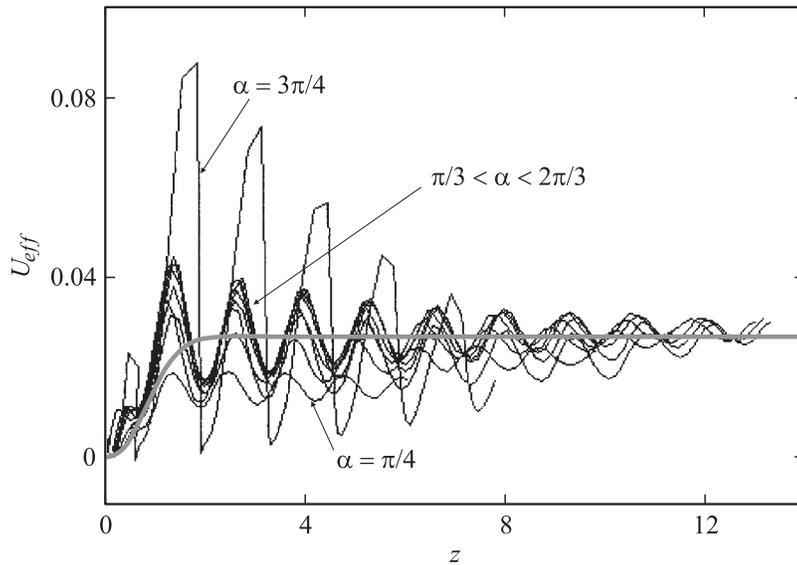


Рис. 4. Эффективный потенциал, действующий на произвольный (внутренний) сегмент пленки при различных углах α , полученный численным интегрированием. Серая монотонная линия показывает затравочный адгезивный потенциал, включенный в уравнения движения.

большинстве случаев отрыв цепочки от адгезивной поверхности происходит универсальным образом, а его скорость в основном определяется вертикальной составляющей силы.

Полученные результаты позволяют сделать следующие выводы:

1. Микроскопический процесс разрыва адгезивных связей не может быть полностью описан в рамках макроскопического „энергетического подхода“.

2. Макроскопическое описание, наиболее точно описывающее реальный микроскопический процесс, состоит в использовании принципа виртуальной работы только для вертикальной составляющей силы. Горизонтальная составляющая используется, очевидно, на совершение работы против сил, обычно не учитываемых в макроскопических теориях адгезии, например силы трения в адгезионном контакте.

Авторы благодарны Deutsche Forschungsgemeinschaft за финансовую поддержку.

Список литературы

- [1] *Persson B.N.J., Albohr O., Tartaglino U., Volokitin A.I., Tosatti E.* // J. Phys.: Condens. Matter. 2005. V. 17. R1–R62.
- [2] *Persson B.N.J., Gorb S.* // J. Chem. Phys. 2004. V. 119. P. 11 437.
- [3] *Geim A.K., Dubonos S.V., Grigorieva I.V., Novoselov K.S., Zhukov A.A., Shapoval S.Yu.* // Nature (London). 2003. V. 2. P. 461.
- [4] *Johnson K.L.* Contact mechanics. Cambridge Univ. Pr. 1985. XI. 452 S.
- [5] *Fermi E., Pasta J., Ulman S., Tsingou M.* Los Alamos Report LA-1940; *Fermi E., Pasta J., Ulman S., Tsingou M.* The Many-body Problem: An Encyclopedia of Exactly Solved Models in One Dimension / Ed. D.C. Mattis. Singapore: World Scientific, 1993.
- [6] *Ford J.* // Phys. Rep. 1992. V. 213. P. 271.
- [7] *Lichtenberg A.J., Leiberman M.A.* Regular and Chaotic Dynamics. New York: Springer, 1992.
- [8] *Fillipov A.E., Hu B., Li B., Zeltser A.* // J. Phys. A: Math. Gen. 1998. V. 31. P. 7719.