

基于界面相互作用的黏附接触数学模型研究进展

万小东¹, 孙其勋², 刘健霖¹, 王珊², 吴仲肖^{2*}

(1. 电网环境保护国家重点实验室, 武汉 430047; 2. 武汉理工大学, 武汉 430070)

摘要: 黏附接触现象在各个领域都有着很重要的作用和影响。若要分析物体间的黏附接触行为, 则建立相应的数学模型是有效的方法之一。现有文献中的数学模型种类繁多, 对于不同受力情况下的黏附现象所适用的理论也不尽相同。针对常见的黏附现象, 按照其不同的受力形式分为弹性体接触、粗糙表面黏附及基材表面剥离等几大类, 分别对以上几类接触行为采用的理论模型及其应用进行了归纳分析整理。综合叙述了基于计算机模拟技术的现代仿真模型的基本原理、应用和发展, 重点介绍了适用于一般物体之间黏附行为分析的通用模型, 以期黏附接触领域的研究和建模提供指导和参考。对于弹性体接触的情况, 重点介绍了经典力学接触理论的基本公式和适用类型, 包括 Hertz 接触理论、JKR 模型和 DMT 模型等, 并依据 Tabor 数讨论了 JKR 模型与 DMT 模型的差异。对于粗糙表面的黏附接触, 重点介绍了 Greenwood 和 Williamson (GW 模型) 所提出的多凸起模型的基本理论和局限性。对于材料的表面剥离情况, 重点介绍了剥离力学中应用最广泛的 Kendall 剥离模型的基本理论。对于现代仿真技术手段, 重点介绍了分子动力学模型 (MD 模型) 和有限元模型 (FEM) 的基本思想和优缺点。之后分别对以上各类模型的拓展完善、应用领域及研究进展进行了归纳总结, 最后对黏附接触领域数学模型的发展方向进行了展望。

关键词: 黏附; 弹性体接触; 剥离; 粗糙表面; 数学模型

中图分类号: O341 **文献标志码:** A **文章编号:** 1001-3660(2024)01-0033-15

DOI: 10.16490/j.cnki.issn.1001-3660.2024.01.003

Research Progress on Mathematical Model of Adhesive Contact Based on Interface Interaction

WAN Xiaodong¹, SUN Qixun², LIU Jianben¹, WANG Shan², WU Zhongkui^{2*}

(1. State Key Laboratory of Power Grid Environmental Protection, Wuhan 430047, China;

2. Wuhan University of Technology, Wuhan 430070, China)

ABSTRACT: Adhesion is a phenomenon that a substance is attached to the surface of another substance, and adhesion force refers to the external force required to separate the two substances that have adhesion. Adhesion contact phenomenon plays a very important role and influence in various fields. At present, we are exploring the repair work of the aging surface of silicone rubber insulating materials. It is necessary to select appropriate repair materials coated on the surface of aging materials, so that degradation of performance caused by surface aging can be recovered. In order to study the adhesion behavior and force on the interface of interaction between materials, it is necessary to establish an appropriate theoretical model for the adhesion interface

收稿日期: 2022-10-27; 修订日期: 2023-05-06

Received: 2022-10-27; Revised: 2023-05-06

基金项目: 电网环境保护国家重点实验室开放基金 (GYW51202201426)

Fund: Open Fund of State Key Laboratory of Power Grid Environmental Protection (GYW51202201426)

引文格式: 万小东, 孙其勋, 刘健霖, 等. 基于界面相互作用的黏附接触数学模型研究进展[J]. 表面技术, 2024, 53(1): 33-47.

WAN Xiaodong, SUN Qixun, LIU Jianben, et al. Research Progress on Mathematical Model of Adhesive Contact Based on Interface Interaction [J]. Surface Technology, 2024, 53(1): 33-47.

*通信作者 (Corresponding author)

between materials. Based on the corresponding contact theory, the stability and durability of the interface between heterogeneous materials can be predicted and calculated by mathematical analysis. The method of applying mathematical models to analysis can not only theoretically calculate the value of material adhesion force and provide reference for experimental design, but also guide the selection of materials in the actual experiment according to the value range of material parameters in the mathematical model.

At present, there are many kinds of mathematical models in the literature, and applicable theories of adhesion phenomena under different forces are not the same. In this paper, the common adhesion phenomena were divided into elastomer contact, rough surface adhesion, substrate surface stripping and other categories according to their different forms of force, and the theoretical models and applications used to analyze the above contact behaviors were summarized respectively. Then the basic principle and application development of modern simulation model based on computer simulation technology were described comprehensively. A general model for adhesion analysis between general objects was introduced. The purpose was to provide guidance and reference for research and modeling in the field of bonding contact. Firstly, the classical contact theories commonly used in elastomer contact were introduced, including Hertz contact, JKR model and DMT model. The differences between JKR model and DMT model were discussed according to Tabor number. This theory was the basis of modern contact mechanics and still had an important influence on contact science. Secondly, the numerical methods and theoretical models commonly used in the adhesion analysis of rough surfaces were briefly summarized, with emphasis on the improvement and extension of the GW model proposed by Greenwood and Williamson. Then the Kendall stripping model used in the process of substrate surface stripping was described comprehensively. As a basic theory in material stripping, this theoretical model played a guiding role in the subsequent research on the stripping process of various materials. Finally, molecular dynamics model (MD model) and finite element model (FEM) based on computer simulation technology were discussed. The popularization and application of these two computer simulation technologies played a great role in promoting the development of mathematical modeling.

There are many kinds of existing adhesive contact mathematical modeling methods, such as micromechanical analysis, micro-statistics analysis, macro-energy conservation, finite element analysis and bond energy analysis at atomic scale, etc., but so far, there are differences between any of the modeling methods and the actual situation, one of the reasons is that the assumptions used by all kinds of modeling methods do not exist in the actual situation. In order to reduce this difference, a modeling method combining macroscopic and microscopic scales is a very important development direction of adhesive contact model, such as the combination of intermolecular forces and finite element method, and the combination of microscopic mechanical analysis and macroscopic energy transition. And another important development direction is the construction of general model. Among the many kinds of adhesion models in the current literature, a considerable number of them are highly targeted, that is, they are only applicable to special problems with specific geometric characteristics, which causes great difficulties for their promotion and application. With the progress of computer simulation technology, it is believed that the mathematical analysis method based on theoretical model will greatly promote the research progress in the field of adhesive contact.

KEY WORDS: adhesion; elastomer contact; stripping; rough surface; mathematical model

黏附是一种物质附着于另一种物质表面的现象,黏附力指将发生黏附现象的 2 种物质分离开所需的外力。黏附在许多应用中起着重要作用。例如薄膜^[1-2]的脱黏、胶条剥离^[3]、橡胶黏附^[4]、粗糙表面黏附^[5]、多尺度上的接触黏附^[6-7]、MEMS/NEMS (微/纳机电系统)^[8-9]、生物黏附^[10-11]、攀爬机器人^[12]、血小板黏附^[13]等。目前,笔者所在课题组正在对硅橡胶绝缘材料老化表面的修复工作进行探索,需要选取合适的修复材料涂覆于老化材料表面,使其因表面老化引起的性能下降得以恢复,其关键是使新旧材料之间形成良好的黏结界面。为了研究材料间相互作用界面上的

黏附行为和受力情况,需要对材料间的黏附界面建立合适的理论模型,以相应的接触理论为基础,通过数学分析方法对异质材料间界面的稳定性和持久性进行预测和计算。采用数学模型分析方法不仅可在理论上计算材料的黏附力,为实验设计提供参考,而且还可根据数学模型中的材料参数取值范围指导实际实验中材料的选取。

现有文献中用于材料间黏附分析的数学模型种类繁多,对于材料在不同受力情况下所适用的黏附模型及接触理论不尽相同。为此,文中分别对弹性体间黏附、粗糙表面黏附及基材表面剥离等几种常见情况

下所用到的数学模型, 以及普适性更强的现代仿真模型进行归纳总结, 并综合叙述各类模型的完善发展及应用, 为研究材料黏附接触的建模方法及接触理论提供参考。从模型建立的角度来看, 计算材料黏附与计算材料内聚^[14]类似。目前, 已有很多与计算内聚相关的文献和研究^[15-18], 文中主要介绍黏附接触模型, 对内聚力的计算不做重点讨论。

1 黏附接触数学模型的种类

1.1 可变形球体黏附接触模型

对于可变形球体之间的黏附接触过程, 最经典的理论模型是 Johnson、Kendall 和 Roberts 提出的 JKR 黏附模型, 以及 Derjaguin、Muller 和 Toporov 提出的 DMT 黏附模型。这类模型均以赫兹接触为基础, 赫兹接触则基于半空间理论的点载荷解 (the point load solution)^[19]和黏着功的概念, 因此理论上它们只能在形变量小的情况下应用。这里主要介绍了经典力学接触模型及其相关应用情况。

1.1.1 Hertz 接触模型

1898 年, Hertz 研究了 2 个光滑弹性球体之间的接触^[20]。如图 1a 所示^[21], 2 个半径分别为 R_1 、 R_2 的球体在法向载荷 p 的作用下相互挤压, 产生一个半径为 a 的圆形接触区域。

首先, Hertz 进行了如下假设: 基于半空间理论^[19], 每个弹性球体的尺寸远大于接触区域的尺寸, 即 2 个球体可被视为体积无限大的球形半空间; 两球体的接触界面光滑, 且球体轮廓可被近似看作抛物线; 不考虑两球体间的摩擦作用。由于未考虑表面力^[22]的作用, 因此 Hertz 认为当所施加的外载荷为 0 时, 两球体的接触面积和形变量均为 0。经过理论计算, 最终得到了接触区域的半径 a 、法向压入量 δ 的计算公式, 见式 (1) ~ (2)。

$$a = \left(\frac{R^* p}{K} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (1)$$

$$\delta = \frac{a^2}{R^*} \quad (2)$$

式中: R^* 为两球体的等效接触半径, 计算见式 (3); K 为常数, 计算见式 (4)。

$$R^* = \frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2} \quad (3)$$

$$\frac{1}{K} = \frac{3}{4} \left(\frac{1-\nu_1^2}{E_1} + \frac{1-\nu_2^2}{E_2} \right) \quad (4)$$

式中: E_1 、 E_2 分别为两球体的弹性模量; ν_1 、 ν_2 分别为两球体的泊松比。

随着测试技术的进步, 许多实验结果表明, 2 个球体之间的实际接触面积大于 Hertz 模型所计算的数值。特别是当外加载荷为 0 时, 物体之间的接触面积及形变量并不为 0, 究其原因是 Hertz 并未考虑物体表面黏附力的作用。

1.1.2 JKR 模型

1971 年, Johnson、Kendall、Roberts 在 Hertz 接触理论的基础上, 引入了表面黏附功的作用^[4]。他们认为相互接触的物体之间存在表面力, 会使物体发生弹性变形, 增大其实际接触面积, 致使实际的接触半径 a 大于根据 Hertz 理论计算的值, 如图 1b 所示。通过对 Hertz 方程进行修正, 得到了接触区半径 a 与黏附功 γ 的关系方程, 见式 (5)。

$$a^3 = \frac{R^*}{K} \left[p + 3\gamma\pi R + \sqrt{6\gamma\pi R^* p + (3\gamma\pi R^*)^2} \right] \quad (5)$$

当黏附功 γ 为 0 时, 式 (5) 就变为 Hertz 方程: $a^3 = R^* p / K$ 。当外加载荷 p 为 0 时, 两弹性体接触区域半径可按式 (6) 计算。

$$a^3 = R^* (6\gamma\pi R^*) / K \quad (6)$$

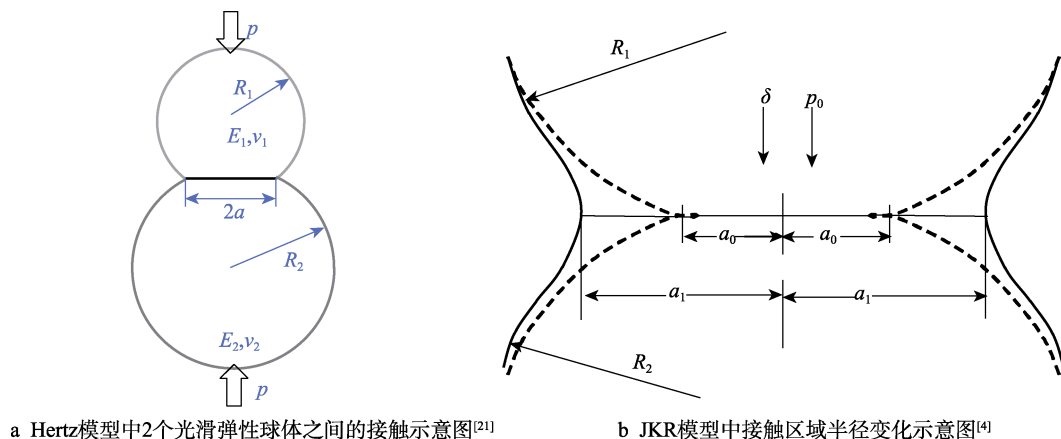


图 1 外加载荷与接触区半径的关系示意图

Fig.1 Diagram of relationship between applied load and contact zone radius: a) contact diagram between two smooth elastic spheres in Hertz model^[21]; b) schematic diagram for change of contact area radius in JKR model^[4]

只有施加一定的反向拉力 F_{ad} 时, 才能将 2 个弹性体之间相互接触的表面彻底分开。这个反向作用力被称作两弹性体间的黏附力, 计算见式 (7)。值得注意的是, 由 JKR 模型所提出的黏附力计算公式与物体的弹性模量和泊松比均无关。此模型更适用于接触面积及黏附功都较大的情况^[23]。

$$F_{ad} = -\frac{3}{2}\pi\gamma R^* \quad (7)$$

1.1.3 DMT 模型

Derjaguin、Muller 和 Toporov 在研究半径为 R 的球体与光滑平面之间的相互接触^[24]时, 认为相互接触的物体间存在表面力作用^[21], 并首次指出, 在表面力的作用下 2 个弹性物体的接触区域一定会发生形变, 其形变过程遵循 Hertz 弹性方程, 而形变程度会反向决定表面力, 但此观点引起了很大的争议。结合 Hertz 方程, 在外加载荷 p 的作用下, 两弹性体接触面半径的计算见式 (8)。

$$a^3 = \frac{R^*}{K}[p + 2\gamma\pi R^*] \quad (8)$$

与 JKR 理论不同的是, Derjaguin 认为在接触区外的环形区域内存在一个长程衰减的范德华吸引力^[4], 这也是导致接触区域外变形的的主要原因, 如图 2a 所示^[25]。如果不存在黏附力, 则接触区域的半径与外加载荷的关系如图 2b 中 I 所示。在黏附力作用下, 接触区域半径会更大。若要将 2 个表面彻底分开, 则需要一定的反向作用力, 如图 2b 中 II 所示。分离瞬间的拉力 F_{ad} 的计算见式 (9)。

$$F_{ad} = -2\gamma\pi R^* \quad (9)$$

虽然 DMT 理论试图将表面力与 Hertz 方程相结合, 但 Hertz 方程的接触区域半径公式只考虑了接触区域内的界面相互作用, 忽视了接触区外长程衰减的表面范德华吸引力作用。由此可见, DMT 模型更适

用于材料表面硬度大、附着力小的情况。

1.1.4 Tabor 数

由于 DMT 模型和 JKR 模型计算的黏附力完全不同, 因此针对这 2 种理论的分歧持续了很长时间。后来, Tabor^[25]解释了这 2 种理论产生差异的原因, 他认为只有将表面力与接触力学原理相结合, 才能在理论上解决分歧。Tabor 注意到在 JKR 理论所描述的接触区域内存在一个“颈部”^[25], 其高度可按照式 (10) 计算。他认为如果固体表面发生了原子尺度的接触, 则可能会产生其他形式的短程力作用。这类短程力的数值较大, 甚至可能会湮没范德华力对接触区形变的影响。例如, 绝缘体和半导体的接触区域可能会发生电荷分离, 由此产生的库仑力相当大, 使得范德华力的作用可以忽略不计。如果颈高 H^* 与达到力平衡的原子间距 ε 相当时, 则无法忽视接触范围外环形区域长程衰减的范德华吸引力的作用。由此, Tabor 定义了一种无量纲系数, 并命名为 Tabor 数 μ , 见式 (11)。

$$H^* = \left(\frac{16R^*\gamma^2}{9K^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (10)$$

$$\mu = \left(\frac{16R^*\gamma^2}{9K^2\varepsilon^3} \right) \quad (11)$$

由此可见, Tabor 数就是颈高 H^* 与平衡原子间距 ε 的比值, 它取决于表面力的作用范围^[26], 也表示 2 个相互接触的弹性体变形幅度。随后, Muller 等^[27]根据表面力进行了求解, 并证实 Tabor 数控制着 DMT 模型与 JKR 模型之间的互变。DMT 模型和 JKR 模型分别对应 Tabor 数的 2 种极端情况: 对于 μ 很小的情况 (μ 小于 0.1), 物体的形变可忽略不计, 适用于 DMT 模型的近似理论; 对于 μ 较大的情况 (通常 $\mu > 5$), 更加适用于 JKR 模型。也有研究人员指出,

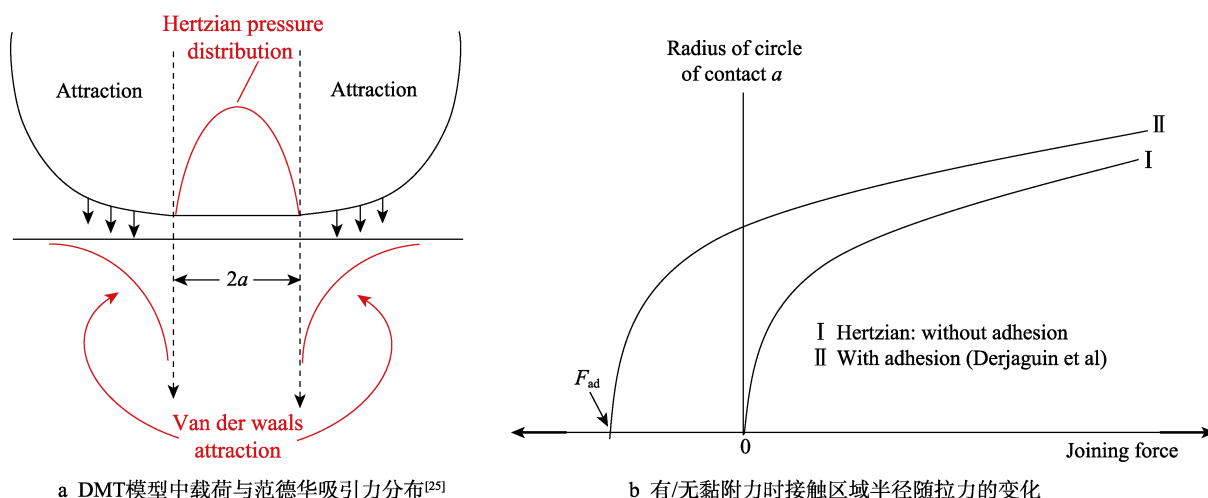


图 2 力与接触区半径的关系示意图

Fig.2 Diagram of relationship between force and contact zone radius: a) distribution diagram of load and van der Waals attraction in DMT model^[25]; b) variation trend of contact area radius with tension in the presence/absence of adhesion force

当 $\mu > 3$ 时, 运用 JKR 模型就可以很好地描述其黏附接触行为^[27]。截至目前, JKR 模型是适用于“ $\mu > 3$ ”还是“ $\mu > 5$ ”, 还未形成共识^[9]。

1.2 粗糙表面黏附接触模型

在微观层面上, 物体表面往往是粗糙的, 表面粗糙度对摩擦学现象的影响很大。Fuller 和 Tabor (FT)^[28]首次表明, 当表面粗糙度增加时, 分离 2 个接触体所需的拉伸载荷会显著降低。Jacobs 等^[29]也通过实验证明, 粗糙度的增加使得原子间可以紧密黏附的部分减小, 黏着会因表面粗糙度的增加而显著降低。模拟粗糙表面弹性介质之间的黏附是一项非常有意义的工作, 在整个计算过程中, 最主要的难点就是对表面粗糙度及微凸起数量、分布的模拟, 为此, 研究人员建立了许多理论和模型来研究粗糙度对附着力的影响。

在所有模拟表面粗糙度的方法中, 应用最广泛的是 Greenwood 和 Williamson^[30]所提出的多凸起模型 (GW 模型)。在 GW 模型中, Greenwood 和 Williamson 将 2 个粗糙表面之间的接触等效为一个刚性平面和一个表面分布高度不同微凸起的粗糙表面之间的接触, 并且假设每个微凸起顶部的曲率半径均为 R , 如图 3 所示。其中, z 为粗糙表面微凸起高度; R 为粗糙表面微凸起顶部曲率半径; d 为微凸起平均高度与光滑刚性平面之间分开的距离。

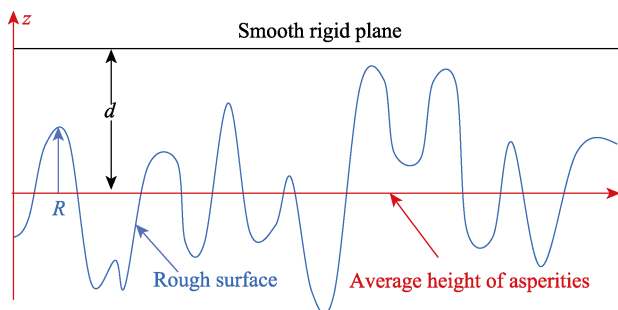


图 3 粗糙表面与光滑刚性平面接触示意图
Fig.3 Contact diagram between rough surface and smooth rigid plane

一般粗糙表面的大量微凸起高度并不一致, 这给黏附过程的分析计算带来了极大的困难。为了准确描述粗糙表面的微凸起高度及分布, Greenwood 和 Williamson 引入了微凸起高度分布函数 $\varphi(z)dz$, 并且假设其高度符合高斯分布。根据 Hertz 理论, 当宏观接触面积为 A 时, 接触面上微凸起总数的计算见式 (12)。

$$N_0 = \sigma A \quad (12)$$

式中: σ 为峰面积密度。单个微凸起发生接触时, 其形变量 $\omega = z - d > 0$, 即只有当微凸起高度 z 大于其平均高度与刚性平面间的距离 d 时, 才会发生接触, 因此在微观层面上实际发生接触的微凸起数量的计算见式 (13)。结合 Hertz 理论, 可以得到粗糙表面总

实际接触面积 S 和接触载荷 F , 见式 (14) ~ (15)。

$$N_c = N_0 \int_d^\infty \varphi(z) dz \quad (13)$$

$$S = \pi N_0 R \int_d^\infty (z - d) \varphi(z) dz \quad (14)$$

$$F = \frac{4}{3} N_0 E R^{\frac{1}{2}} \int_d^\infty (z - d)^{\frac{3}{2}} \varphi(z) dz \quad (15)$$

最原始的多凸起模型 (GW 模型) 的主要局限性体现在以下几方面^[31]: 忽略了接触点之间的横向相互作用及其合并作用, 当弹性半空间上有更多的微凸起受到挤压时, 整体位移受到发生接触的凸起的影响; 所有微凸起的曲率半径均为 R 的假设在实际过程中不可能存在; GW 模型只考虑了微凸起接触时的弹性变形, 忽略了其塑性变形的过程。Bush、Gibson、Thomas (BGT)^[32]提出了一种更为形象的粗糙度表示方法: 将粗糙表面看作带有丘陵和山谷的平原, 丘陵的顶峰可以近似拟合为抛物线, 丘陵和山谷的分布可以通过随机过程模型计算得到。该方法与 Longuet-Higgins^[33]和 Nayak^[34]提出的各向同性随机粗糙表面的统计理论一致。

除此之外, 许多其他的方法 (如格林函数^[35-36]、分子动力学^[37-38]、有限元^[39]等) 也可用来研究粗糙表面的黏附接触。

1.3 剥离过程计算模型

剥离过程计算模型是一种广泛应用于薄膜剥离的黏附接触数学模型^[3], 剥离试验通常用于确定黏接接头的强度。在形式最简单的剥离试验中, 已黏结到刚性表面的薄柔性带材从基材上表面拉开。剥离实验可以在恒力作用下监测胶带剥离的速度, 或者用恒定的速度去除胶带, 然后测量所需施加到剥离带表面的力。尽管这类测试已经进行了几十年, 并已形成了一些国家和国际测试标准, 但测试过程中参数的变化可能导致两表面的剥离情况发生很大的变化。其中, 非常重要的实验因素包括胶黏带的分离角度、分离速率、基材表面的性质 (微观和宏观), 以及胶黏带本身的力学性能和物理性能等。若要更加精确地了解并预测剥离过程中材料的行为, 就需要建立相应的理论模型, 通过数学分析方法对剥离过程中参数的变化进行模拟计算。Kendall^[3]的剥离模型是剥离力学中应用较广泛的模型之一。

Kendall 认为, 当某种材料 (厚度 d 、宽度 b 、弹性模量 E) 在恒定的作用力 F 下, 以剥离角度 θ 从另一种材料表面剥离时 (图 4), 其中能量的变化主要由 3 个部分构成: 因形成新的表面而产生的表面能项, 可用 $-bR\Delta c$ 表示, 其中 R 为剥离界面能, 即单位面积材料发生剥离时所需的能量; 在不考虑材料被拉伸的情况下因恒定作用力的位移而产生的势能项, 可用 $F(1 - \cos \theta)\Delta c$ 表示; 因剥离材料 $M-N$ 段被拉伸所产生的弹性能项, 它由 2 个分量构成, 一个分量是拉

伸 $M-N$ 段时恒定力所做的功, 可用 $\frac{F^2 \Delta c}{bdE}$ 表示, 另一个分量是被拉伸的 $M-N$ 段可恢复的弹性能, 可用 $\frac{-F^2 \Delta c}{2bdE}$ 表示。

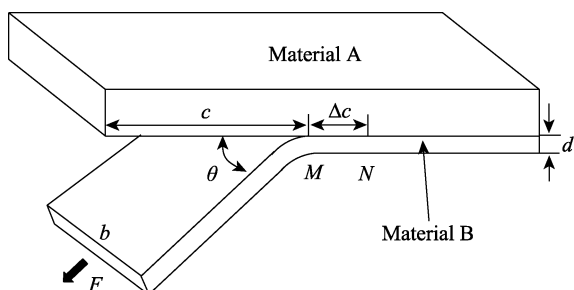


图 4 材料剥离实验示意图^[3]
Fig.4 Schematic diagram of material stripping experiment^[3]

通过能量守恒定律, 可得到等式, 见式 (16)。经过简化, 可变为 F/b 的二次方程, 见式 (17)。

$$-bR\Delta c + F(1 - \cos \theta)\Delta c + \frac{F^2 \Delta c}{2bdE} = 0 \quad (16)$$

$$\left(\frac{F}{b}\right)^2 \frac{1}{2dE} + \left(\frac{F}{b}\right)(1 - \cos \theta) - R = 0 \quad (17)$$

式 (17) 表明了最大剥离力与剥离角度、薄膜刚度及黏附功等模型参数之间的确切关系。通常 $F/bd \ll E$, 故式 (17) 中一般可以忽略弹性项 $\left(\frac{F}{b}\right)^2 \frac{1}{2dE}$, 从而简化为式 (18) 的形式。只有在 2 种情况下必须考虑弹性项: 对于应力达到 $10E$ 时才会断裂的弹性材料; 因剥离角度很小, 致使势能项趋近于 0 的情况。

$$\left(\frac{F}{b}\right)(1 - \cos \theta) - R = 0 \quad (18)$$

在式 (18) 中, 剥离界面能 R 与黏附能 γ 不同, R 同时与黏附能 γ 和剥离速度 c 有关, 可写作二者的函数 $R(\gamma, c)$ 。在剥离速度一定的条件下, 剥离界面能 R 与黏附能 γ 呈正相关, 可通过经验常数 η 来换算, 该常数通常由恒定剥离速度下的剥离实验来确定^[3]。另外, 由于 Kendall 模型只考虑了薄膜轴向刚度, 忽略了弯曲和剪切刚度, 因此 Sauer^[40]以基于 Lennard-Jones 势和计算接触力学的 Li 黏附方程^[41-42]为基础, 提出一种几何精确梁公式^[43], 来分析具有有限弯曲刚度薄膜的剥离行为。该公式基于变分原理, 适用于范德华附着力, 并允许人们将在不同长度下使用的常见接触情况组合成一个整体^[41,44]。该公式也与断裂力学中使用的内聚区模型 (CZM 模型)^[45]相似。当然, 剥离过程也可用基于连续介质理论的标准有限元方法进行分析^[46-48], 但是在剥离情况下, 此类模型可能计算不准确, 且会极大地降低效率。

1.4 现代仿真模拟技术

1.4.1 分子动力学模型

若在原子、分子等微观尺度上研究界面的黏附接触行为, 则连续介质模型无法对其中的现象及原理进行解释和分析。随着仿真技术手段的发展, 分子动力学模型 (Molecular dynamics, MD 模型) 越来越多地应用于微观尺度上的黏附行为分析^[49]。MD 模型最初是为了研究坚硬球体的相互作用^[50]而发展起来的, 在随后的数十年里, 它已经被拓展为研究许多物理、化学和机械现象的常用方法, 既可以用于现象分析^[43,51], 也可用来预测实验结果^[52]。分子动力学模型的主要思想是将研究对象还原为由大量相互作用的分子或原子组成的粒子系统, 通过求解基于微观粒子间相互作用势的 Newtonian (或 Langevin) 运动方程, 得到原子或分子的运动轨迹及规律, 再通过统计学方法获得整个粒子系统宏观表现出的物理化学性质^[53]。

经典的 MD 框架可以使用第一性原理描述原子层面上的动力学状态, 但未确切地在介质表面反应性、成键和电子结构变化等相互作用方面进行建模, 因此任何 MD 模拟的关键因素都是相互作用势 (也称力场, the Force Field)。力场较为简单的函数表达形式由成对相互作用表示, 通常包括 1 个吸引作用项 (London 色散力) 和 1 个排斥作用项 (源自核-核排斥)。应用最广泛的力场种类有 Lennard-Jones 势 (LJ)^[54]和 Morse 势^[55], 以上 2 种力场经验参数的数量最少 (对于每个原子种类, LJ 势和 Morse 势的参数数量分别为 2 和 3), 计算难度相对较低, 使得基于这些力场的模拟计算成本相对较低。有些研究指出, LJ 势和 Morse 势不能真实地模拟许多材料的动力学行为 (例如 LJ 势只能精确地模拟惰性气体的动力学行为)。尽管如此, 多年来 LJ 势在 MD 模拟中的使用已经取得了非常不错的结果。例如, 在利用 LJ 势模拟预测 2 个接触表面之间的机械咬合^[56]、磨损状态^[57]、塑性变形^[58-59]时, 都获得了与实验值较好的一致性。

1.4.2 有限元模型

许多工程技术和数学物理领域的问题都可通过求解给定边界条件下的控制方程 (常微分方程和偏微分方程) 进行分析研究, 如固体力学中的位移^[60]、物理模型中的应力^[61]、材料界面的黏附行为^[62]等。可以根据问题的基本特征来得到相应的基本方程和边界条件, 但是只有极少数的简单问题可用解析法求解。在实际的工程物理问题中, 研究对象的形状结构及受力载荷都极复杂, 据此得到的微分方程很难采用解析法求解。解决此类问题的途径主要有 2 种, 其一是忽略非必要因素, 引入相关的近似假设, 将复杂问题简单化处理, 进而采用解析法求得近似解。此类近似解确实可以在一定程度上对所研究的问题提供参

考和帮助, 但与真实值的误差较大, 有时会得出不正确甚至相反的结论。其二是保留问题的复杂性, 利用现代仿真数值模拟技术对所列微分方程进行求解。目前工程技术及数学物理领域的数值模拟方法种类很多, 其中有限元分析^[63-64]是实用性最强、应用最广泛的方法, 也是现代仿真技术领域发展的重要推动力之一^[65]。

FEM 可以在无穷小或有限应变中给出应力应变的显式关系, 因此可用于建立任何具有线弹性甚至晶体塑性的材料本构模型。材料模型的任意性、接触固体几何形状的复杂性及可处理异质材料接触界面等几种特性是 FEM 方法得以广泛应用的主要因素。FEM 的基本思想是“化整为零、集零为整”。首先将连续系统(如黏附接触领域中的连续介质)划分为有限数量的小单元, 各个单元之间通过有限数量的节点连接, 之后基于分块近似的思想, 通过物理方程等力学关系及位移函数建立未知量与节点之间的相互作用关系, 最后基于变分原理将所有分块近似单元整合起来。同时, 引入边界条件, 获得以节点位移为中间变量的线性方程组, 通过进一步求解就可获得原始的未知量^[66]。FEM 的本质是把具有无限个自由度的连续系统等效为自由度有限的网格单元集合体, 将复杂的方程求解问题转化为可进行数值求解的结构性问题^[67]。

FEM 在黏附问题中的应用涉及接触体体积的离散化和接触相互作用的处理^[53]。在研究材料表面的应力分布时, 对于表面劣化的分析及粗糙度尺度上的微观接触分析至关重要, 积分结果或离散化程度的微小偏差就可能导致研究结果出现巨大误差, 这就给 FEM 的求解计算提出了更高的要求, 所需的计算量也更庞大。另外, 使用 FEM 方法进行建模分析时, 需要具备一定的计算机专业知识, 并且数据分析的结果会带有研究人员的主观意愿^[68], 这也是 FEM 的局限性之一。

2 各类计算模型的拓展及应用

2.1 可变形球体黏附接触模型

黏附问题最基本的 2 种理论是由 Johnson 等提出的 JKR 模型和由 Derjaguin 等提出的 DMT 模型。JKR、DMT 等用于可变形球体黏附行为分析的经典力学模型为现代接触力学的发展奠定了基础, 之后研究人员在以上经典理论模型的框架上加以修正改进, 拓展了许多适用于具有某些特征的问题模型, 并且不断完善了接触力学理论体系, 为后续此类模型在黏附接触问题上的应用拓宽了道路。目前, 经典力学接触模型已经被广泛应用于微/纳机电系统(MEMS、NEMS)^[69-70]、橡胶黏附^[71]、摩擦磨损^[72]、航天器密封件^[73]、弹塑性黏接^[74]、粗糙表面黏附^[75]等领域。

JKR 模型适用于具有大半径的柔顺弹性体, 特别

是橡胶的黏附。2006 年, Vaenkatesan 等^[71]基于 JKR 理论开发了一种测量二甲基硅橡胶黏附和摩擦的装置, 并且测量的压痕及弹性模量与 JKR 模型的分析结果一致。此前也有针对 JKR 类装置的相关研究, 而上述装置的新颖之处在于, 可用动态方式进行快速且高精度的实验测试, 这是初代 JKR 类装置不具备的特性。通常在应用 JKR 模型中会忽略表面粗糙度的影响, 将表面视作完全光滑。这种假设在实际中不可能存在, 因此不可避免地造成了拟合结果的偏差, 这也是此类模型的局限性之一。2021 年, Liao、Lu 等^[73]分析了航天器主接口橡胶密封件对接与黏接机理, 将表征表面粗糙度的多凸起模型(GW 模型)与 JKR 接触模型结合, 并考虑表面粗糙度对黏附的影响, 进一步建立了弹性密封结构的黏附接触计算模型。与之结合的 GW 模型弥补了 JKR 理论预先假设的不足, 减小了计算结果的偏差。虽然 JKR 理论的应用主要集中在弹性接触方面, 但也有研究人员将其延伸到非弹性体之间的分析, 如 2012 年, Gustafsson 等^[76]采用 Johnson-Kendall-Roberts (JKR) 接触力学测量了全木材生物聚合物体系的干黏着性, 这也是 JKR 理论首次应用于分析木材构件之间的黏附相互作用。Gustafsson 等^[76]采用层层沉淀法将 2 种生物木材聚合物分别沉积在二甲基硅橡胶(PDMS)平板和二甲基硅橡胶半球形帽上(如图 5a 所示), 以此来代替 JKR 模型中的等效刚性平面和球形压头, 使得非弹性体也具备了 JKR 模型的基本条件。这是对 JKR 理论应用条件的一次创新, 极大地拓展了 JKR 理论的应用范围。PDMS 半球帽基底无法准确地反映木材聚合物的弹性形变能力, 会对施加载荷时产生的接触半径产生一定的影响。

在 MEMS 领域, 黏附力会对 MEMS 设备的功率、效率及系统稳态产生很大影响, 因此对 MEMS 进行黏附分析显得尤为重要。JKR 模型和 DMT 模型都被用来分析微/纳机电系统的黏附问题。2015 年, Rusua、Pustan 等^[70]采用原子力显微镜(AFM)研究了 AFM 尖端和具有不同粗糙度的 MEMS 材料之间的黏附力, 然后分别使用 JKR 模型和 DMT 模型对所获得的实验值进行验证, 结果如图 5b 所示。2019 年, Joulaei 等^[69]利用 JKR 和 DMT 模型分别预测具有不同涂层的 MEMS 表面黏附力, 将 DMT 和 JKR 模型预测的探头与试件之间的黏着力与实验结果进行了比较, 结果如图 5c 所示。以上 Rusua 和 Mahdi Joulaei 的研究结果一致表明, JKR 模型计算的 MEMS 器件表面黏附力理论值与实验值更吻合, 其中的重要原因之一就是 MEMS 系统表面具有较大的表面能, 且表面微凸起具有较大的尖端曲率半径, 这与 JKR 模型的预先假设更接近。

DMT 理论假设表面黏附力不会引起物体发生弹性形变, 因此更加适合于分析形变量小、模量大的物

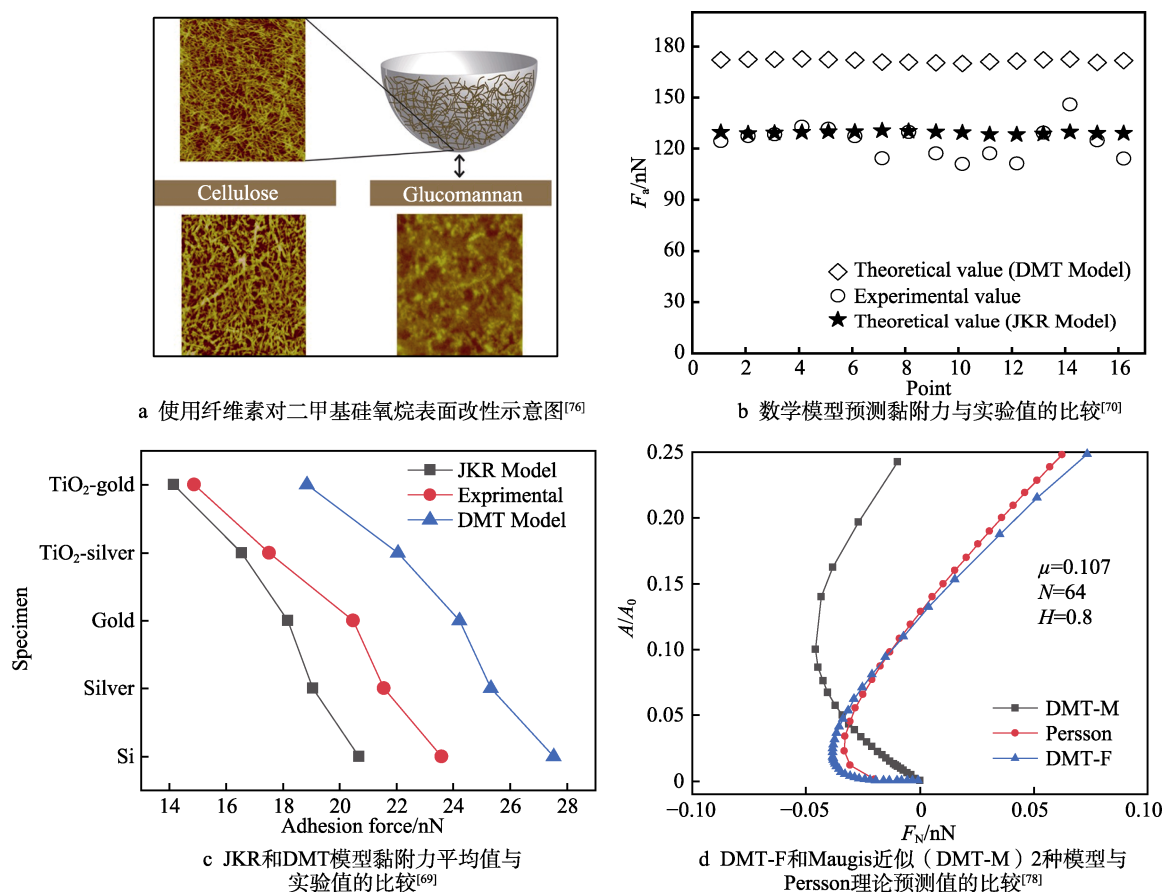


图5 建模过程及模型拟合结果示意图

Fig.5 Schematic diagram of modeling process and model fitting results: a) surface modification of dimethylsiloxane using cellulose^[76]; b) comparison of adhesion force predicted by mathematical model and experimental value^[70]; c) comparison between mean value of JKR and DMT adhesion and experimental value^[69]; d) comparison of predicted values of two models (DMT-F) and Maugis approximation (DMT-M) with Persson's theory^[78]

体黏附问题。2003年, Kogut 和 Etsion^[74]利用 DMT 模型对可变形金属球在刚性平面下的挤压过程进行了弹塑性黏附分析。Chang 等^[77]采用修正的 DMT 模型研究了刚性平面下的单球体在弹塑性变形状态下的黏附。上述研究都以形变量小为前提, 并且通过对 DMT 模型进行修正, 将其拓展到弹性-塑性黏附接触的情形, 这为考虑物体塑性形变的情况下进行黏附分析提供了新的思路和方法。另外, DMT 模型也可用于粗糙表面上的黏附状态分析。2019年, Violano 等^[78]在 DMT 理论的框架下, 用最新的多凸起接触模型研究了粗糙表面之间的黏附, 分别采用 DMT 力学分析 (DMT-F) 和 Maugis 近似 (DMT-M) 等 2 种不同的建模方法, 并与相关文献中的数据和 Persson 理论的预测值进行比较。结果表明, DMT-F 方法与 Persson、Scaraggi^[79]提供的数据具有良好的一致性, 如图 5d 所示。

2.2 粗糙表面黏附接触模型

尽管 Greenwood 和 Williamson 提出的多凸起模型 (GW 模型)^[30]存在明显的局限性, 但多年来它一直是粗糙表面接触研究中最常用的方法。在 GW 模型

中, 假设粗糙表面所有微凸起的曲率半径相同, 且微凸起高度符合高斯分布定律 (或指数分布定律)。这种观点为粗糙表面黏附分析时微凸起分布的表示方法提供了一个新的思路, 得到很多研究者的认可。后来人们研究粗糙表面黏附时大多借鉴了 Greenwood 和 Williamson 的方法, 如 Johnson 等^[80]和 Carbone^[81]在对粗糙表面进行黏附分析时都引入了假定粗糙体高度呈指数分布的塑性变形黏附指数。与之不同的是, Giuseppe^[81]假设微凸起顶部的曲率半径不恒定, 它取决于微凸起的高度, 在此假设下提出了 Greenwood 和 Williamson (GW) 的简单修正模型。除沿用 Greenwood 和 Williamson 提出的微凸起分布思想外, 许多文献还将 GW 模型与其他黏附分析模型结合建模, 以解决描述粗糙表面微凸起分布的难题。如, Haiat 和 Barthel^[82]提出了一个黏弹性粗糙表面接触的近似模型, 然后将该模型与 Greenwood 和 Williamson (GW) 统计模型结合, 进一步提出了对粗糙黏弹性表面黏附性的定量评估方法。Liao、Lu 等^[73]在分析航天器主密封件 (MID) 的密封性能时, 将 JKR 理论与 Greenwood 和 Williamson (GW) 理论结合, 推导出分离 2 个密封件所需拉力的计算方程。通过实验验证了黏附模型

的正确性, 并将实验数据与计算数据进行了对比研究, 得到了较好的一致性, 如图 6a 所示。

此外, 还有许多研究者在具体特征问题上, 提出了一些实用性想法, 以 GW 模型为框架建立了新的微观接触模型, 将其用于分析粗糙表面的黏附状态。Chowdhury、Ghosh^[83]和 Chang 等^[77]以 Greenwood 和 Williamson 的粗糙表面模型为基础, 从微凸起弹塑性和平均高度的角度入手, 分别提出了适用于不同尺度粗糙度表面黏附状态分析的 RG 模型和 CEB 模型。2007 年, 江南大学赵永武等^[84]假设相互接触的微凸起由弹性形变向塑性形变的转化连续、光滑, 然后以经典接触力学理论及 Greenwood、Williamson (GW) 的微凸起模型为基础, 提出了一种新型粗糙表面弹塑性微观接触模型, 并在不同的载荷和塑性指数条件下与 GW 模型和 CEB 模型的预测结果进行比较, 验证了该模型的科学性和合理性。

以上研究都是 GW 模型在分析粗糙表面黏附情况时的不同用法, 这些研究极大地拓展了 GW 模型的应用领域, 对 GW 模型的推广和完善起到了重要作用。

2.3 Kendall 剥离模型

剥离实验具有简便易操作的特点, 已经成为评估界面力学性能的有效方法之一。Kendall 方程被用于描述材料在剥离过程中的受力情况, 并被广泛应用于涂层技术、微机电系统、胶带和仿生黏附等领域。

材料的剥离力在很大程度上取决于剥离角度、弹性模量、带材宽度及材料弹性等。对于线弹性材料, 当带材黏合到基材表面时, 在体积收缩或膨胀作用下可能会发生预张紧, 始终处于初始预应变状态。然而, 预张力的存在会对剥离力产生一定影响, 这是 Kendall 剥离模型所忽略的。为了使剥离模型的计算结果更加精确, Williamsa 等^[87]和 Molinari 等^[88]在建立非线性弹性材料剥离模型时, 都在 Kendall 方程的基础上考虑了预紧力 F_1 的影响, 对方程用于不同材料剥离力计算时的误差进行了修正, 见式 (19)。这对该数学模型的推广应用具有积极的作用。之后, Chen 等^[85]受到生物可逆黏附机制的启发, 在 Kendall 方程的基础上进一步研究了预张力对弹性带在基底上的黏附强度产生的影响。结果表明, 预张力可以在

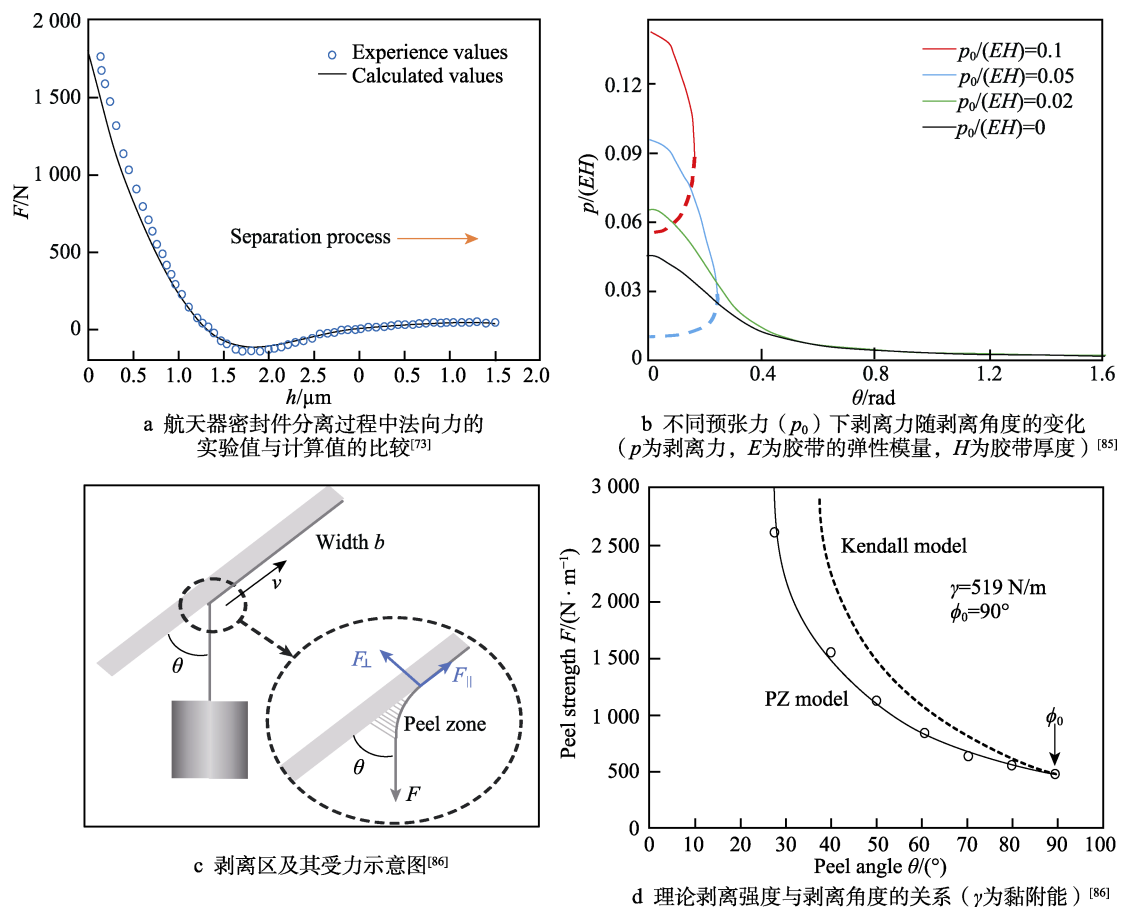


图 6 建模过程及模型拟合结果示意图

Fig.6 Schematic diagram of modeling process and model fitting results: a) comparison of experimental and calculated normal force values in the separation process of spacecraft seals^[73]; b) change of stripping force with stripping angle under different pretension (p_0)^[85] (where p is the stripping force; E is Young's modulus of the tape; H is the thickness of tape); c) stripping zone and its force diagram^[86]; d) schematic diagram of relationship between theoretical stripping strength and stripping angle (where γ is adhesion energy)^[86]

小的剥离角下显著增大剥离力,而在剥离角较大时显著减小剥离力,如图 6b 所示,这也是壁虎脚可以实现可逆黏附的原因之一。

$$\left(\frac{F-F_1}{b}\right)^2 \frac{1}{2dE} + \left(\frac{F}{b}\right)(1-\cos\theta) - R = 0 \quad (19)$$

Kendall 的建模过程分别计算了剥离过程中表面能、线弹性能及拉力做功等几种能量的变化,以能量守恒定理为原则,对几种能量的变化量建立了等量关系,但忽略了材料受力弯曲时的弯曲能。当材料的弹性模量较小、材质较软、容易弯折时,忽略弯曲能对剥离力计算结果的影响不大。当材料的弹性模量较大,需要较大的力才能弯折时,产生的弯曲能占总能量变化的比重会很大,此时忽略弯曲能会对计算结果产生很大的影响。由此, Li、Xiong 等^[89]在使用 Kendall 模型研究不同纳米线或单壁/多壁碳纳米管(CNT)从衬底上剥离的行为时,考虑了纳米线及基底弯曲变形对剥离力的影响,分别将弯曲能和内聚能的计算加入模型中,其分析结果对理解纳米结构与基底之间的相互作用及设计纳米机电系统具有很大的帮助。Sauer^[40]采用几何精确梁公式来分析具有有限弯曲刚度薄膜的剥离行为,充分考虑了弯曲刚度从零到极限值对材料剥离的影响。目前, Kendall 剥离模型常被用于分析壁虎脚的可逆黏附机制。Sauer 认为,虽然壁虎脚的刮刀结构与理想化的薄膜有很大不同,但只要充分考虑壁虎刮刀弯曲刚度的影响,采用 Kendall 模型是可行的。如 Molinari 等^[88]应用 Kendall 模型对壁虎黏附系统进行了计算分析,并对施加在单个抹刀上的最大黏附力进行了评估,发现它与文献中报道的壁虎刚毛最大承载能力的实验测量值密切相关。由 Chen 等^[85]的研究成果可知,壁虎的可逆黏附主要通过改变其脚上刮刀与平面基底之间的角度来实现。Kendall 理论未考虑剥离角减小时剥离区长度的增加^[3]。Pesika 等^[86]受到壁虎脚可逆黏附机制的启发,在 Kendall 方程的基础上引入了一个与剥离角度相关的乘数,并推导建立了基于剥离区(图 6c)几何形状的胶带剥离模型(PZ 模型),以此来预测胶带在剥离角 $\leq 90^\circ$ 时的剥离行为。该乘数的引入,导致 PZ 模型预测的剥离力总是小于 Kendall 方程计算出的值。特别是在剥离角度较小时,这种差异更明显,如图 6d 所示。

随着研究人员对 Kendall 剥离理论的进一步完善和发展,该模型的应用也得到了极大的推广,甚至已经被扩展到剪切和弯曲刚度^[47,90]、基于 Lennard-Jones 的黏附^[91]、非线性材料行为^[87-88]、剥落区变形^[86]和界面滑动^[92]等领域。

2.4 MD 模型

随着计算机仿真模拟技术水平的提升,分子动力学模拟技术也被拓展到物理、化学、材料学等领域。

特别是在研究异质材料间相互作用方面应用得更广泛。在分子动力学模拟过程中,最关键的因素是确定原子间的相互作用势(即力场),这也是影响结果精度的最主要的因素。基于分子动力学模拟建立的 MD 模型,可以从原子或分子角度了解材料间的界面结构,这有助于通过自下而上的结构设计来优化材料的制造流程,并更有效地控制材料的性能。近年来,越来越多的研究人员都采用 MD 模型来研究材料界面的相互作用。如, Ren 等^[93]通过分子动力学模拟研究了木材细胞壁成分(纤维素、木质素和半纤维素)与聚乳酸(PLA)之间界面的组成、结构和相互作用机制。这项研究为从分子水平理解木材细胞壁组分和聚合物的界面性能提供了很好的见解。同时,系统地讨论了结晶和非晶表面如何影响纳米复合材料的界面结构,研究成果可为生物质复合材料结构设计和材料改性提供指导。Morsc 等^[94]采用分子动力学模拟与红外光谱(FTIR)差示扫描量热法(DSC)技术相结合的方法,分析了环氧树脂/氧化铁的界面相互作用,并进一步探究了交联剂拓扑结构对聚合物/金属氧化物复合材料性能和寿命的影响,此模拟分析结果为环氧树脂基复合材料的结构设计提供了有力参考。Gao、Ji 等^[95]针对水性环氧树脂乳化沥青(WEREA)与骨料之间的界面黏附问题,建立了基于分子动力学模拟的界面模型,全面细致地研究了沥青-骨料界面的黏附破坏行为和机理,为该领域的材料界面设计提供了一种方法,对于提高沥青路面的使用寿命具有重要意义。Mahmud 等^[96]在研究石墨烯纳米片和环氧树脂基质之间的界面相互作用时,采用 MD 模型来预测 2 种成分之间的界面剪切强度,进而探究表面功能化对石墨烯/环氧树脂界面结合的影响,其模拟研究结果对生产下一代轻质聚合物基纳米复合结构材料至关重要。Wu、Rui 等^[97]通过分子动力学模拟建立了铝(liquid)/铝(solid)和铝(liquid)/硅(solid)系统组成的计算模型,定性研究了由液固界面相互作用所致的黏附力与温度的相关性,并根据液体原子的扩散行为探讨了黏附机理。

以上诸多研究表明, MD 模型适用于研究有机/有机材料、有机/无机材料、无机/无机材料之间的相互作用,进一步说明 MD 模型具有很强的普适性、实用性,以及广阔的应用前景,因此进一步拓宽 MD 模型的应用面也是当前热门的发展方向。

2.5 FEM

自从有限元概念被提出以来,有限元数值分析模型的应用得到迅速发展。此前,很多基于解析法建立的数学模型不能解决或难以解决的理论计算问题,通过有限元法得到了精度更高的结果。特别是在材料学领域, FEM 已被广泛应用于同质或异质材料间的黏

附及应力分析,并取得了相当不错的效果。如 Attarian 等^[99]使用 FEM 在内的多种数值模拟方法分析了钛/硼化钛(Ti/TiB)复合材料的界面黏附力和力学强度。Jiang^[100]和 Nagoshi 等^[101]都探究了碳纤维复合材料中环氧树脂界面的破坏形式,通过建立有限元模型进行黏结界面处的应力分析,解释了黏结界面的破坏机理。同时, Jiang 利用 FEM 揭示了因试样不对称结构和偏心拉伸载荷所致的弯矩对黏结强度的影响。

以上对复合材料界面强度计算的研究均采用经典有限元模型。随着有限元法研究的深入,目前也有许多其他有关 FEM 的建模方法被提出。如 Zhang 等^[98]提出了一种改进的有限元模型,用来分析切向和法向载荷共同作用下弹-塑性球体的黏附行为,并与已发表的实验观察结果获得了较好的一致性。该模型由 1 个能够预测潜在断裂位置的整体模型(Global model)和 1 个仅覆盖于可能断裂区域的精细网格子模型

(Submodel)构成,如图 7 所示。由于有限元子模型去掉了潜在断裂区外的无效元素,因此可以更加精准地描述裂纹的起始和拓展。该模型对无效区域元素的判断最关键,错误的判断可能导致实验结果不全面、结论说服力差等问题。总体来说,该模型消除了先前开发的 FEM 的一些弊端,通过模型的局部放大能力使得预测结果与实验值的拟合度更高,计算时间大大缩短,计算效率显著提高,开创了有限元分层级建模的先例,为以后模型的建立提供了重要参考。Jungstedt 等^[102]将拉伸试验中的应力场测量与数字图像(DIC)、有限元模型相结合,建立了材料本构模型,依据所建立的计算模型来预测分析热压无黏合剂木质纤维素(Binder-free wood fiber, WF)和面内微纤化木质纤维素复合材料(Microfibrillated lignocellulose, MFLC)之间的性能差异和受力变形机制。结果表明,模型预测值与实验所测值具有较好的一致性,如图 8 所示。在建模过程中,为了使有限元结果

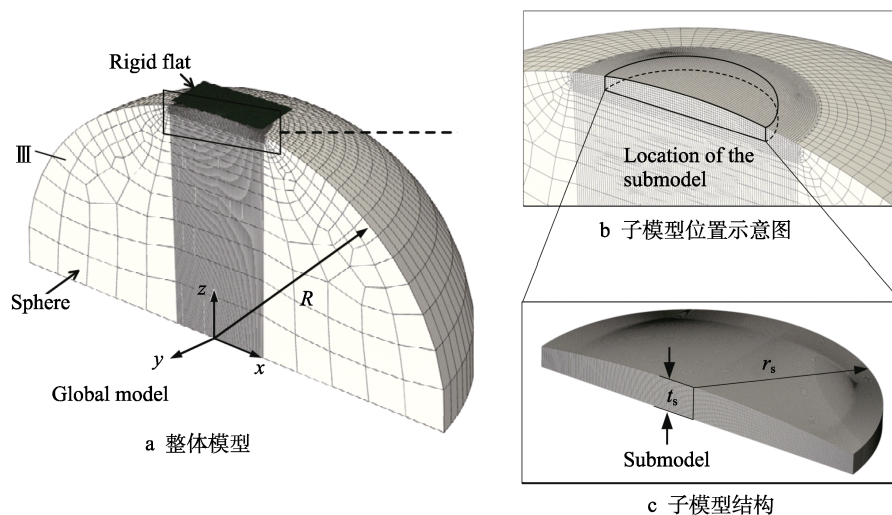


图 7 FEM 整体模型和子模型示意图^[98]

Fig.7 Schematic diagram of FEM global model and FEM submodel^[98]: a) global model; b) diagram of submodel location; c) structure of submodel

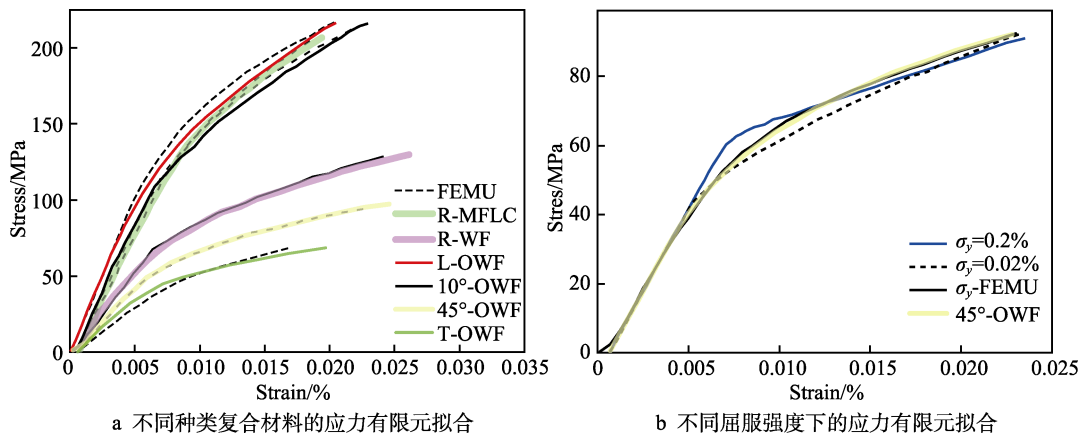


图 8 材料应力分析与有限元模型理论值拟合示意图^[102]

Fig.8 Schematic diagram of materials stress analysis and theoretical value fitting of finite element model^[102]: a) stress finite element fitting of different kinds of composite materials; b) stress finite element fitting under different yield strengths

与初始观测结果一致,需要通过优化程序来标定本构材料模型的参数。该过程明显受到主观因素的影响,致使结果存在争议。该研究中, DIC 与 FEM 相结合的建模方式为材料性能理论预测研究提供了较新颖的建模思路,对于承重、环保复合材料的开发和研究具有重要的推动作用。

目前,有限元模型在材料、建筑、医学制造业等领域中都得到了广泛应用。由于算法对优化设计问题的依赖性较强,并受到国内机械加工精度较低的限制,因此国内有限元应用相较于国外还有一定差距。随着我国高性能计算机科技的发展,基于计算机仿真模拟计算能力会进一步提高, FEM 法的应用前景会越来越宽广。

3 结语

黏附现象在许多领域都起着重要的作用。对于常见的黏附现象,按照其不同的受力形式分为弹性体接触、粗糙表面的黏附及基材表面剥离等几大类。文中分别对以上几类黏附接触情况下的理论模型及其应用进行了归纳整理,之后对近年来逐渐被广泛应用的仿真模拟技术进行了综合叙述。首先重点介绍了弹性体接触中常用的经典接触理论,其中包括 Hertz 接触模型、JKR 模型及 DMT 模型等,这些理论作为现代接触力学的基石,如今依旧对接触学具有很重要的影响。其次,对分析粗糙表面黏附所用的数值方法和理论模型进行了简要概括,着重介绍了 Greenwood 和 Williamson 提出的粗糙表面多凸起模型(GW 模型)的完善和拓展。之后,介绍了薄膜从基材上剥离所用的 Kendall 剥离模型,该理论模型作为材料剥离领域的奠基性研究,对后来各种材料的剥离过程研究都起到了指导性作用。最后,讨论了基于计算机仿真模拟技术的分子动力学模型(MD 模型)和有限元模型(FEM)的基本思想和应用,这 2 种仿真模型的推广应用对数学建模的发展起到了极大的推动作用。

目前,文献中可以用来分析界面黏附接触行为的数学模型种类很多,其建模方法的依据也不尽相同。如,依据微观力学分析、微观统计学分析、分子动力学模拟、宏观能量守恒、有限元分析及原子尺度上的键能分析等。迄今为止,任何一种建模方法与实际情况都存在差异,一方面原因是各类建模方法用到的假设条件在实际情况中并不存在,为了减小这种差异,宏观尺度和微观尺度相结合的建模方法是黏附接触模型的一个非常重要的发展方向,如分子间作用力与有限元方法结合,微观力学分析与宏观能量转变结合等。另一个重要的发展方向是通用模型的建设,在当前文献的诸多种类黏附模型中有相当一部分具有极强的针对性,即只适用于具有特殊几何特征的问题,给其推广与应用带来了极大的困难。随着计算机模拟

仿真技术的进步,分子动力学模型及有限元模型得到进一步推广应用,相信今后基于理论模型的数学分析方法一定会极大地推动黏附接触领域的研究进展。

参考文献:

- [1] HENDRICKX J M, GEUBELLE P H, SOTTOS N R. A Spectral Scheme for the Simulation of Dynamic Mode 3 Delamination of Thin Films[J]. *Engineering Fracture Mechanics*, 2005, 72(12): 1866-1891.
- [2] ROY S, DARQUE-CERETTI E, FELDER E, et al. Cross-Sectional Nanoindentation for Copper Adhesion Characterization in Blanket and Patterned Interconnect Structures: Experiments and Three-Dimensional FEM Modeling[J]. *International Journal of Fracture*, 2007, 144(1): 21-33.
- [3] KENDALL K. Thin-Film Peeling-the Elastic Term[J]. *Journal of Physics D Applied Physics*, 1975, 8(13): 1449-1452.
- [4] JOHNSON K L, KENDALL K, ROBERTS A. Surface Energy and the Contact of Elastic Solids[J]. *Proceedings of the Royal Society of London A Mathematical and Physical Sciences*, 1971, 324(1558): 301-313.
- [5] PERSSON B N J, ALBOHR O, TARTAGLINO U, et al. On the Nature of Surface Roughness with Application to Contact Mechanics, Sealing, Rubber Friction and Adhesion[J]. *Journal of Physics Condensed Matter*, 17(1): R1.
- [6] SAUER R A. Multiscale Modelling and Simulation of the Deformation and Adhesion of a Single Gecko Seta[J]. *Computer Methods in Biomechanics and Biomedical Engineering*, 2009, 12(6): 627-640.
- [7] EID H, ADAMS G G, MCGRUER N E, et al. A Combined Molecular Dynamics and Finite Element Analysis of Contact and Adhesion of a Rough Sphere and a Flat Surface[J]. *Tribology Transactions*, 2011, 54(6): 920-928.
- [8] KOMVOPOULOS K. Adhesion and Friction Forces in Microelectromechanical Systems: Mechanisms, Measurement, Surface Modification Techniques, and Adhesion Theory[J]. *Journal of Adhesion Science and Technology*, 2003, 17(4): 477-517.
- [9] ZHAO Y P, WANG L S, YU T X. Mechanics of Adhesion in MEMS—A Review[J]. *Journal of Adhesion Science and Technology*, 2003, 17(4): 519-546.
- [10] AUTUMN K, PEATTIE A M. Mechanisms of Adhesion in Geckos[J]. *Integrative and Comparative Biology*, 2002, 42(6): 1081-1090.
- [11] ARZT E, GORB S, SPOLENAK R. From Micro to Nano Contacts in Biological Attachment Devices[J]. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 2003, 100(19): 10603-10606.
- [12] SPENKO M J, HAYNES G C, SAUNDERS J A, et al.

- Biologically Inspired Climbing with a Hexapedal Robot [J]. *Journal of Field Robotics*, 2008, 25(4/5): 223-242.
- [13] WANG W W, KING M R. Multiscale Modeling of Platelet Adhesion and Thrombus Growth[J]. *Annals of Biomedical Engineering*, 2012, 40(11): 2345-2354.
- [14] SAUER R A. A Survey of Computational Models for Adhesion[J]. *The Journal of Adhesion*, 2016, 92(2): 81-120.
- [15] COLLINS-CRAFT N A, BOURRIER F, ACARY V. On the Formulation and Implementation of Extrinsic Cohesive Zone Models with Contact[J]. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 2022, 400: 115545.
- [16] PISAVADIA H, TOUSSAINT G, DOLEZ P, et al. Cohesive Zone Failure Modeling of Polymeric Adhesives Used in Ceramic/Metal Armor[J]. *International Journal of Impact Engineering*, 2022, 170: 104364.
- [17] TANDOGAN I T, YALCINKAYA T. Development and Implementation of a Micromechanically Motivated Cohesive Zone Model for Ductile Fracture[J]. *International Journal of Plasticity*, 2022, 158: 103427.
- [18] XU X, WANG D, ZANG M Y, et al. Development of an Intrinsic Solid-Shell Cohesive Zone Model for Impact Fracture of Windshield Laminated Glass[J]. *International Journal of Impact Engineering*, 2022, 163: 104187.
- [19] JOHNSON K L. *Contact Mechanics*[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1985: 41-83.
- [20] HERTZ H. On the Contact of Elastic Solids[J]. *Reine und Angewandte Mathematik*, 1882, 92: 156-171.
- [21] 张威. 基于 Double-Hertz 模型-弹性圆柱体和随机粗糙表面粘附接触力学研究[D]. 大连: 大连理工大学, 2014: 5-12.
- ZHANG W. Adhesive Contact of Elastic Cylinders and Randomly Rough Surfaces Based on the Double-Hertz Model[D]. Dalian: Dalian University of Technology, 2014: 5-12.
- [22] BUTT H J, CAPPELLA B, KAPPL M. Force Measurements with the Atomic Force Microscope: Technique, Interpretation and Applications[J]. *Surface Science Reports*, 2005, 59(1/2/3/4/5/6): 1-152.
- [23] 赖添茂. 基于接触几何的微纳米尺度下的粘着研究[D]. 广州: 华南理工大学, 2014: 2-20.
- LAI T M. Micro and Nano Scales Adhesion Study Based on the Contact Geometry[D]. Guangzhou: South China University of Technology, 2014: 2-20.
- [24] DERJAGUIN B V, MULLER V M, TOPOROV Y P. Effect of Contact Deformations on the Adhesion of Particles[J]. *Progress in Surface Science*, 1994, 45(1/2/3/4): 131-143.
- [25] TABOR D. Surface Forces and Surface Interactions[J]. *Plenary and Invited Lectures*, 1977, 58(1): 3-14.
- [26] JOHNSON K L. Adhesion and Friction between a Smooth Elastic Spherical Asperity and a Plane Surface[J]. *Proceedings of the Royal Society of London Series A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 1997, 453(1956): 163-179.
- [27] 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.
- [28] FULLER K N G, TABOR D. The Effect of Surface Roughness on the Adhesion of Elastic Solids[J]. *Proceedings of the Royal Society of London A Mathematical and Physical Sciences*, 1975, 345(1642): 327-342.
- [29] JACOBS T D B, RYAN K E, KEATING P L, et al. The Effect of Atomic-Scale Roughness on the Adhesion of Nanoscale Asperities: A Combined Simulation and Experimental Investigation[J]. *Tribology Letters*, 2013, 50(1): 81-93.
- [30] GREENWOOD J A, WILLIAMSON J. Contact of Nominally Flat Surfaces[J]. *Proceedings of the Royal Society of London Series A Mathematical and Physical Sciences*, 1966, 295(1442): 300-319.
- [31] 刘勇, 夏天, 陈志英, 等. 粗糙表面统计接触模型的提出与发展[J]. *摩擦学学报*, 2020, 40(3): 395-406.
- LIU Y, XIA T, CHEN Z Y, et al. The Development of Statistical Contact Model for Rough Surface[J]. *Tribology*, 2020, 40(3): 395-406.
- [32] BUSH A W, GIBSON R D, THOMAS T R. The Elastic Contact of a Rough Surface[J]. *Wear*, 1975, 35(1): 87-111.
- [33] LONGUET-HIGGINS M S. The Statistical Analysis of a Random, Moving Surface[J]. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 1957, 249(966): 321-387.
- [34] NAYAK P R. Random Process Model of Rough Surfaces[J]. *Journal of Lubrication Technology*, 1971, 93(3): 398-407.
- [35] MENGA N, AFFERRANTE L, CARBONE G. Adhesive and Adhesiveless Contact Mechanics of Elastic Layers on Slightly Wavy Rigid Substrates[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2016, 88/89: 101-109.
- [36] CARBONE G, MANGIALARDI L. Analysis of the Adhesive Contact of Confined Layers by Using a Green's Function Approach[J]. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 2008, 56(2): 684-706.
- [37] MÜSER M H. A Dimensionless Measure for Adhesion and Effects of the Range of Adhesion in Contacts of Nominally Flat Surfaces[J]. *Tribology International*, 2016, 100: 41-47.
- [38] 陈晶晶, 胡洪钧, 李保震. 纳观单晶铜表面粘着接触失效的分子动力学模拟[J]. *表面技术*, 2017, 46(8): 195-200.
- CHEN J J, HU H J, LI B Z. Molecular Dynamics Simulation of Failure in Adhesive Contact with Single Crystal Copper[J]. *Surface Technology*, 2017, 46(8): 195-200.
- [39] 刘洲岸, 于金鑫, 李强. 热障涂层陶瓷层/TGO 界面开

- 裂行为的有限元模拟[J]. 表面技术, 2017, 46(7): 70-76.
- LIU Z X, YU J X, LI Q. Finite Element Simulation of Ceramic Layer/TGO Interfacial Crack on Thermal Barrier Coating[J]. Surface Technology, 2017, 46(7): 70-76.
- [40] SAUER R A. The Peeling Behavior of Thin Films with Finite Bending Stiffness and the Implications on Gecko Adhesion[J]. The Journal of Adhesion, 2011, 87(7/8): 624-643.
- [41] SAUER R A, LI S F. A Contact Mechanics Model for Quasi-Continua[J]. International Journal for Numerical Methods in Engineering, 2007, 71(8): 931-962.
- [42] SAUER R A, LI S F. An Atomic Interaction-Based Continuum Model for Adhesive Contact Mechanics[J]. Finite Elements in Analysis and Design, 2007, 43(5): 384-396.
- [43] SAUER R A, MERGEL J C. A Geometrically Exact Finite Beam Element Formulation for Thin Film Adhesion and Debonding[J]. Finite Elements in Analysis and Design, 2014, 86: 120-135.
- [44] SAUER R A, LI S F. An Atomistically Enriched Continuum Model for Nanoscale Contact Mechanics and Its Application to Contact Scaling[J]. Journal of Nanoscience and Nanotechnology, 2008, 8(7): 3757-3773.
- [45] HILLERBORG A, MODÉER M, PETERSSON P E. Analysis of Crack Formation and Crack Growth in Concrete by Means of Fracture Mechanics and Finite Elements[J]. Cement and Concrete Research, 1976, 6(6): 773-781.
- [46] CROCOMBE A D, ADAMS R D. Peel Analysis Using the Finite Element Method[J]. The Journal of Adhesion, 1981, 12(2): 127-139.
- [47] THOULESS M D, YANG Q D. A Parametric Study of the Peel Test[J]. International Journal of Adhesion and Adhesives, 2008, 28(4/5): 176-184.
- [48] WEI Y G. Modeling Nonlinear Peeling of Ductile Thin Films—Critical Assessment of Analytical Bending Models Using FE Simulations[J]. International Journal of Solids and Structures, 2004, 41(18/19): 5087-5104.
- [49] 栾智存. 基于分子动力学模拟的粗糙表面接触与摩擦特性研究[D]. 北京: 北京理工大学, 2015: 8-33.
- LUAN Z C. Research on the Contact and Friction Characteristics of Rough Surfaces Based on Molecular Dynamics Simulations[D]. Beijing: Beijing Institute of Technology, 2015: 8-33.
- [50] ALDER B J, WAINWRIGHT T E. Studies in Molecular Dynamics. I. General Method[J]. The Journal of Chemical Physics, 1959, 31(2): 459-466.
- [51] KOMANDURI R, CHANDRASEKARAN N, RAFF L M. MD Simulation of Indentation and Scratching of Single Crystal Aluminum[J]. Wear, 2000, 240(1/2): 113-143.
- [52] NAKAOKA S, YAMAGUCHI Y, OMORI T, et al. Molecular Dynamics Analysis of the Friction between a Water-Methanol Liquid Mixture and a Non-Polar Solid Crystal Surface[J]. The Journal of Chemical Physics, 2017, 146(17): 174702.
- [53] VAKIS A I, YASTREBOV V A, SCHEIBERT J, et al. Modeling and Simulation in Tribology across Scales: An Overview[J]. Tribology International, 2018, 125: 169-199.
- [54] JONES J E. On the Determination of Molecular Fields—II. from the Equation of State of a Gas[J]. Proceedings of the Royal Society of London Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character, 1924, 106(738): 463-477.
- [55] MORSE P M. Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics II Vibrational Levels[J]. Physical Review, 1929, 34(1): 57-64.
- [56] RIGNEY D A, KARTHIKEYAN S. The Evolution of Tribomaterial during Sliding: A Brief Introduction[J]. Tribology Letters, 2010, 39(1): 3-7.
- [57] AGHABABAEI R, WARNER D H, MOLINARI J F. Critical Length Scale Controls Adhesive Wear Mechanisms[J]. Nature Communications, 2016, 7: 11816.
- [58] JUNGE T, MOLINARI J F. Plastic Activity in Nano-scratch Molecular Dynamics Simulations of Pure Aluminium[J]. International Journal of Plasticity, 2014, 53: 90-106.
- [59] ROMERO P A, JÄRVI T T, BECKMANN N, et al. Coarse Graining and Localized Plasticity between Sliding Nanocrystalline Metals[J]. Physical Review Letters, 2014, 113(3): 036101.
- [60] NGUYEN-THOI T, P PHUNG- V A N, RABCZUK T, et al. An Application of the es-Fem in Solid Domain for Dynamic Analysis of 2D Fluid-Solid Interaction Problems[J]. International Journal of Computational Methods, 2013, 10(1): 1340003.
- [61] USHIJIMA K, NISITANI H. A Modified Technique for FEM Stress Analysis in Practical Problem[J]. Key Engineering Materials, 2007, 348/349: 797-800.
- [62] MOZAFARI H, ABDI B, AYOB A, et al. Mechanical Behavior between Carbon Fiber and Epoxy Matrix for Thin Adhesive Layers[J]. Applied Mechanics and Materials, 2011, 121: 4426-4430.
- [63] LAURSEN T A. Computational Contact and Impact Mechanics: Fundamentals of Modeling Interfacial Phenomena in Nonlinear Finite Element Analysis[M]. Springer Science & Business Media, 2003: 7-68.
- [64] WRIGGERS P. Computational Contact Mechanics[M]. 2nd ed. Berlin: Springer, 2006: 423-471.
- [65] WRIGGERS P. Complexities of Compression Failure[J]. Proceedings of the Royal Society of London A Mathematical and Physical Sciences, 1978, 361(1705): 245-263.
- [66] 王娟, 李惠霞, 邓宇. 基于细观力学的仿真研究及其应用[M]. 基于细观力学的仿真研究及其应用, 2015: 6-15.
- WANG J, LI H X, DENG Y. Simulation Research and Application Based on Mesomechanics [M]. Simulation Research and Application Based on Mesomechanics,

- 2015: 6-15.
- [67] XIAO J, JORDAAN I J. Application of Damage Mechanics to Ice Failure in Compression[J]. Cold Regions Science and Technology, 1996, 24(3): 305-322.
- [68] REDDY M S, SUNDRAM R, EID ABDEMAGYD H A. Application of Finite Element Model in Implant Dentistry: A Systematic Review[J]. Journal of Pharmacy & Bioallied Sciences, 2019, 11(S2): 85-91.
- [69] JOULAEI M, KOLAHDOOZAN M, SALEHI M, et al. Comparison of the Adhesion Forces in Single and Double-Layer Coatings on the MEMS Surfaces by JKR and DMT Models[J]. Surface and Interface Analysis, 2020, 52(1/2): 34-41.
- [70] RUSU F, PUSTAN M, BÎRLEANU C, et al. Analysis of the Surface Effects on Adhesion in MEMS Structures[J]. Applied Surface Science, 2015, 358: 634-640.
- [71] VAENKATESAN V, LI Z L, VELLINGA W P, et al. Adhesion and Friction Behaviours of Polydimethylsiloxane – a Fresh Perspective on JKR Measurements[J]. Polymer, 2006, 47(25): 8317-8325.
- [72] 陈爽, 王勇杰, 李仕华, 等. MoS₂ 薄膜摩擦因数和磨损量的数学模型[J]. 表面技术, 2022, 51(3): 51-56.
- CHEN S, WANG Y J, LI S H, et al. Mathematical Model of Friction Coefficient and Wear of MoS₂ Film[J]. Surface Technology, 2022, 51(3): 51-56.
- [73] LIAO C J, LU H R, SUN H L, et al. A Mathematical Model for Evaluating Adhesion Contact of an Elastomeric Seal-on-Seal Structure[J]. Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part C: Journal of Mechanical Engineering Science, 2021, 235(24): 7808-7820.
- [74] KOGUT L, ETSION I. Adhesion in Elastic-Plastic Spherical Microcontact[J]. Journal of Colloid and Interface Science, 2003, 261(2): 372-378.
- [75] 李玲, 李港华, 吕刚, 等. 双粗糙表面的微动磨损行为研究[J]. 表面技术, 2022, 51(2): 193-201.
- LI L, LI G H, LYU G, et al. Research on Fretting Wear Behaviour of Double Rough Surface[J]. Surface Technology, 2022, 51(2): 193-201.
- [76] GUSTAFSSON E, JOHANSSON E, WÅGBERG L, et al. Direct Adhesive Measurements between Wood Biopolymer Model Surfaces[J]. Biomacromolecules, 2012, 13(10): 3046-3053.
- [77] CHANG W R, ETSION I, BOGY D B. Adhesion Model for Metallic Rough Surfaces[J]. Journal of Tribology, 1988, 110(1): 50-56.
- [78] VIOLANO G, AFFERRANTE L. On DMT Methods to Calculate Adhesion in Rough Contacts[J]. Tribology International, 2019, 130: 36-42.
- [79] PERSSON B N J, SCARAGGI M. Theory of Adhesion: Role of Surface Roughness[J]. The Journal of Chemical Physics, 2014, 141(12): 124701.
- [80] JOHNSON K L, KENDALL K, ROBERTS A. Surface Energy and the Contact of Elastic Solids[J]. Proceedings of the Royal Society of London A Mathematical and Physical Sciences, 1971, 324(1558): 301-313.
- [81] CARBONE G A. Slightly Corrected Greenwood and Williamson Model Predicts Asymptotic Linearity between Contact Area and Load[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2009, 57(7): 1093-1102.
- [82] HAIAT G, BARTHEL E. An Approximate Model for the Adhesive Contact of Rough Viscoelastic Surfaces[J]. Langmuir: the ACS Journal of Surfaces and Colloids, 2007, 23(23): 11643-11650.
- [83] ROY CHOWDHURY S K, GHOSH P. Adhesion and Adhesion Friction at the Contact between Solids[J]. Wear, 1994, 174(1/2): 9-19.
- [84] 赵永武, 吕彦明, 蒋建忠. 新的粗糙表面弹塑性接触模型[J]. 机械工程学报, 2007, 43(3): 95-101.
- ZHAO Y W, LYU Y M, JIANG J Z. New elastic-Plastic Model for the Contact of Rough Surfaces[J]. Chinese Journal of Mechanical Engineering, 2007, 43(3): 95-101.
- [85] CHEN B, WU P D, GAO H J. Pre-Tension Generates Strongly Reversible Adhesion of a Spatula Pad on Substrate[J]. Journal of the Royal Society, Interface, 2009, 6(35): 529-537.
- [86] PESIKA N S, TIAN Y, ZHAO B X, et al. Peel-Zone Model of Tape Peeling Based on the Gecko Adhesive System[J]. The Journal of Adhesion, 2007, 83(4): 383-401.
- [87] WILLIAMS J A, KAUZLARICH J J. The Influence of Peel Angle on the Mechanics of Peeling Flexible Adherends with Arbitrary Load-Extension Characteristics[J]. Tribology International, 2005, 38(11/12): 951-958.
- [88] MOLINARI A, RAVICHANDRAN G. Peeling of Elastic Tapes: Effects of Large Deformations, Pre-Straining, and of a Peel-Zone Model[J]. The Journal of Adhesion, 2008, 84(12): 961-995.
- [89] LI Y, XIONG Y, ZHOU Z K, et al. The Peeling Behavior of Nanowires and Carbon Nanotubes from a Substrate Using Continuum Modeling[J]. Journal of Applied Physics, 2017, 121(5): 054303.
- [90] LI S, WANG J, THOULESS M D. The Effects of Shear on Delamination in Layered Materials[J]. Journal of the Mechanics and Physics of Solids, 2004, 52(1): 193-214.
- [91] OYHARCABAL X, FRISCH T. Peeling off an Elastica from a Smooth Attractive Substrate[J]. Physical Review E, Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics, 2005, 71(3): 036611.
- [92] 龚中良, 周成博, 彭远征. 基于 Lennard-Jones 势的界面摩擦黏滑行为动力学研究[J]. 表面技术, 2015, 44(9): 36-42.
- GONG Z L, ZHOU C B, PENG Y Z. Dynamics of Stick-Slip on Interfacial Friction Based on the Lennard-Jones Potential Theory[J]. Surface Technology, 2015, 44(9): 36-42.

(下转第 77 页)