

文章编号:1004-7220(2011)05-0436-05

基于 Surface Evolver 模拟液桥断裂距离

于洋, 王学卫, 吴群

(北京理工大学 宇航学院力学系, 生物力学与生物材料实验室, 北京 100081)

摘要: **目的** 研究面间液桥断裂距离随着液桥体积、球面半径和固-液接触角的变化规律。**方法** 利用 Surface Evolver 程序模拟介于球形表面和平面间一定体积液桥的拉伸、断裂的演变过程, 从模拟结果中得到给定液桥体积、球面半径以及固体表面润湿性质这些参数下的液桥的断裂距离。**结果** 以 Lian 等和 Willett 等所给出公式为基础得到液桥断裂距离关于参数液体体积、球面半径和接触角的理论公式, 模拟结果与理论预测结果比较, 发现当固体表面为亲水性质时, 模拟结果与理论结果整体上吻合很好(偏差 < 4.3%); 当固体表面为疏水性质时, 模拟结果随着疏水性质的增加与理论估计的偏差会增大。**结论** Surface Evolver 可以很好地模拟液桥准静态拉伸和断裂过程, 从而得到液桥断裂距离。Lian 等和 Willett 等所给出的理论公式是由亲水表面数据拟合出来的, 这也是在疏水性质表面上本文所给液桥断裂距离的理论公式预测结果与模拟结果偏差增大的原因。

关键词: Surface Evolver 模拟; 液桥; 断裂距离; 拉伸; 亲水性; 疏水性; 生物力学

中图分类号: R 318.01 文献标志码: A

Rupture distance of liquid bridge based on Surface Evolver simulation

YU Yang, WANG Xue-wei, WU Qun (*Biomechanics and Biomaterials Laboratory, Department of Mechanics, School of Aerospace Engineering, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China*)

Abstract: **Objective** To study the variation of rupture distance of liquid bridge with different liquid volume, spherical radius and solid-liquid contact angle. **Methods** The process of stretching and rupture of liquid bridge between a sphere and a plane was simulated by Surface Evolver program. The rupture distance of liquid bridge which depended on the liquid volume, radius of sphere and wetting property of surface was calculated from the simulation. **Results** The theoretical formula of rupture distance which was related to the liquid volume, spherical radius and contact angle was derived based on the formula given by Lian and Willett, *et al.* The simulation result was in agreement with the theoretical result when the solid surface was hydrophilic (error < 4.3%); when the solid surface was hydrophobic, the error between the simulation and theoretical results showed to be greater with the hydrophobicity enhanced. **Conclusions** The quasi-static process of stretching and rupture of liquid bridge can be well simulated by Surface Evolver program and the rupture distance can be given accurately from the simulation result. The error between the simulation and theoretical results in rupture distance on the hydrophobic surface appeared significantly increasing, because the formula given by Lian and Willett, *et al* was derived from data based on the hydrophilic surface.

Key words: Surface Evolver simulation; Liquid bridge; Rupture distance; Stretching; Hydrophilicity; Hydrophobicity; Biomechanics

收稿日期:2011-09-01; 修回日期:2011-09-25

基金项目:国家自然科学基金资助项目(10902015), 高等学校博士学科专项科研基金(20091101120001)。

通讯作者:于洋, Tel:(010)68912731; E-mail:yuyang08@bit.edu.cn。

诸如苍蝇一类的小昆虫可以在竖直壁上爬上爬下,其拉力机制是由足部与壁面间的液桥产生的毛细力,也常被称为湿黏附力。暴露于空气中的固体接触面间由于冷凝作用会有液桥存在,可见液桥在日常生活中无处不在。由于液桥在生物黏附、胶体自组装和医用生物材料等领域中扮演着重要的角色,长久以来,液桥的形成、演变以及断裂的过程倍受人们关注。Haines^[1]和 Fisher^[2]在 20 世纪 20 年代就对由液桥产生的毛细力进行研究。近年来,随着显微技术、微纳米加工技术以及微纳米精密仪器的飞速发展,对液桥特性的研究更成为了一个热门领域。如苏业旺等^[3]和 De Souza 等^[4]研究了不同的接触形状和亲、疏水性对液桥力大小的影响。而随着接触问题研究的发展,有关两球面间、球面与平面间液桥问题的研究也越来越多,如 Adams 等^[5]和 Rabinovich 等^[6]研究了两球面间液桥力的变化情况,Gogelein 等^[7]研究了液桥在微球面的形成条件以及对这些条件的控制问题,Sirghi 等^[8-9]研究了球面曲率对液桥性质的影响和纳米的液桥断裂距离问题,Sprake 等^[10]研究了在不同饱和度条件下平板和球面液桥的性质等。

研究液桥的断裂距离对研究生物黏附和脱粘、微纳米器件的设计、微纳仪器测量精度的标定等有着重要的意义。液桥的距离(H)是液桥两端相接的两固体面之间的距离,液桥随着两固体界面分离距离的变化而不断演化;然而当分离距离超过某个临界值时,液桥将失稳、断裂。液桥在稳定时,其外部轮廓满足 Laplace-Young 微分方程;当分离距离超过某个临界值后, Laplace-Young 微分方程将无解。Mazzone 等^[11]实验结果也说明这个临界值就是正确的断裂距离。一般情况下, Laplace-Young 微分方程没有解析解,故大多情况下都用数值方法来求解 Laplace-Young 微分方程以得到稳定液桥的外部轮廓形状。

Lian 等^[12]用数值解 Laplace-Young 微分方程的方法研究了在两等半径球面间液桥所产生的毛细力、润湿角等参数随液桥距离的变化规律,并指出在小接触角(θ)的情况下液桥断裂距离与以下关系式符合得很好:

$$D^* = (1 + 0.5\theta) \sqrt[3]{V^*} \quad (1)$$

式中: $D^* = D/R$ 是无量纲化的断裂距离, D 为实际

断裂距离, R 为固体球半径, θ 为固体表面与液体的接触角, $V^* = V/R^3$ 是无量纲化的液桥体积, V 为真实液桥体积。Willett 等^[13]在 Lian 等^[12]研究的基础上,研究了 2 个不同半径球面间液桥各参数随液桥距离的变化规律,以及液桥断裂情况,并引入调和平均球半径概念:

$$\frac{1}{R_{1,2}} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (2)$$

式中: R_1, R_2 分别对应两球面的半径。那么,此时液桥断裂距离所对应的最佳拟合结果为^[13]

$$D_{1,2}^* = \left[1 + \frac{\theta}{4} \left(\frac{R_2}{R_1} + 1 \right) \right] \cdot \left[(V_{1,2}^*)^{1/3} + \left(\frac{R_2}{2R_1} - \frac{2}{5} \right) (V_{1,2}^*)^{2/3} \right] \quad (3)$$

式中: $D_{1,2}^* = D/R_{1,2}$ 是关于调和平均半径无量纲化的断裂距离, $V_{1,2}^* = V/R_{1,2}^3$ 是关于调和平均半径无量纲化的液桥体积。将其中一个球面的半径无限的增大,那么就相当于在描述一个球面和一个平面之间的液桥断裂距离,即当 $R_1 \rightarrow \infty$ 时,式(1)可演化为

$$D_{s-f}^* = \left[1 + \frac{\theta}{4} \right] \left[(V_{s-f}^*)^{1/3} - \frac{1}{5R} (V_{s-f}^*)^{2/3} \right] \quad (4)$$

式中: R 为固体球半径, $D_{s-f}^* = D/R$ 是无量纲化的断裂距离, $V_{s-f}^* = V/R^3$ 是无量纲化的液桥体积。研究具有一定曲率的曲面和一个平面之间液桥的断裂特性对于微结构表面的湿黏附,尤其对研究微纳系统的接触问题有着重要的意义。

本文主要利用 Surface Evolver 有限元模拟平面和不同曲率的球状表面之间液桥的拉伸和断裂的动态过程,研究固体表面的曲率半径和润湿性质对液桥断裂临界长度的影响。

1 数值模拟和实验方法

Surface Evolver 是由 Brakke^[14]整理为公开的有限元程序包,是在满足边界条件下总能量取最小时的几何构型为其自然实际构型的理论为基础,可以模拟多种由固、液、汽组成的系统的稳定形态。利用 Surface Evolver 模拟程序,Chou 等^[15]模拟了液滴在重力影响下在纤维上的各种存在形式,Chatain 等^[16]研究了液滴在不同微图案上的形状和能量变化,Dorrer 等^[17]研究了具有微柱的超疏水表面三相线的形状,Ling 等^[18]研究了液滴中一个气泡的稳定

性。这些研究中 Surface Evolver 模拟所得结果与理论或者实验的结果都符合得很好。

在本文所研究的球面和平面间的液体桥问题中,由于液桥体积较小,重力势能相对表面能较小,故在本文模拟过程中没有考虑重力的影响;此系统总的自由能由固-液、固-气和液-气界面能组成,应用 Young 公式便可化简得到系统自由能表达式:

$$E = \sum_i (\gamma_{LV} A_{LV}^i) + \sum_j (-\gamma_{LV} A_{SL}^j \cos \theta) \quad (5)$$

式中: γ_{LV} 为液-气界面能, A_{LV}^i 、 A_{SL}^j 分别表示液-气和固-液界面的各个单元面积, θ 是固体材料的 Young 接触角。通过给定的约束条件和表面自由能最小的原则,液桥可以由初始形状演化成限定条件下系统能量取极小值的形状,即液桥的真实形状。

初始时给定球面的最高点与平面之间距离(H),给定固体材料的 Young 接触角(θ),并将给定体积 V 的液桥以方柱的形式连接到两固体表面(见图 1(a)、(d))。利用 Surface Evolver 对此初始系统液桥进行演化,演化结果有两类情况,一是最终在间距为 H 的两固体表面间形成稳定的液桥(见图 1(b)、(e)),另一类是在间距为 H 的两固体表面间不能形成稳定的液桥而是液桥自动断开分别稳定在两表面上(或者只稳定在一个表面上)形成两个液滴(见图 1(c)、(f))。通过统计给定参数(θ, V, R)情况下两表面不同距离的最终模拟结果是完整液桥还是断开的液桥,来找到能形成稳定完整液桥的最大距离(H_c),这便是所模拟得到此参数情况下的断裂距离。

2 结果和讨论

利用寻找液桥断裂距离方法,应用 Surface Evolver 数值模拟得到给定参数(θ, V, R)情况下的液桥断裂距离(H_c)。首先用此方法用接触角为 80° ,球面半径为 5 mm ,不同液体体积这组参数,得到的一系列液桥断裂距离。如图 2(a)所示, Surface Evolver 模拟所得到的结果与理论公式预测曲线吻合得很好。在该组参数情况下所得到的模拟结果比理论结果稍大,但误差都在 2.4% 以内。

接下来考虑另外两个参数变化对液桥断裂距离的影响情况。液桥体积为 $4 \mu\text{L}$,平板和球面的接触角均为 60° ,模拟得到一系列不同球面半径所对应的液桥断裂距离值,如图 2(b)所示。模拟结果与理

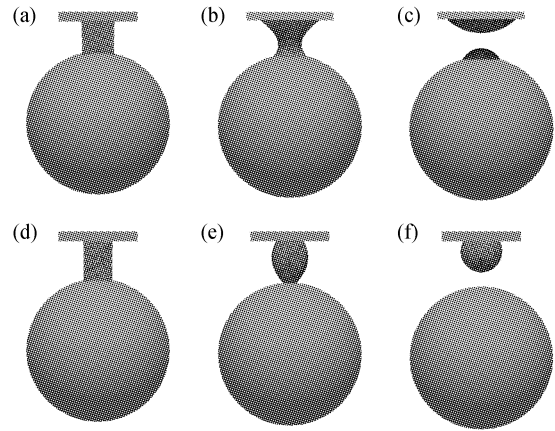


图1 Surface Evolver 模拟平面和球面间的液桥 (a) 在 Surface Evolver 程序中设置球半径为 5 mm , 接触角为 60° , 体积为 $4 \mu\text{L}$ 的液桥的初始状态; (b) 两亲水固体平面间距离小于 H_c 时, 模拟得到的液桥稳定状态; (c) 两亲水固体平面间距离大于 H_c 时, 模拟得到液桥断裂后液体的稳定状态; (d) 在 Surface Evolver 程序中设置球半径为 5 mm , 接触角为 120° , 体积为 $4 \mu\text{L}$ 的液桥的初始状态; (e) 两疏水固体平面间距离小于 H_c 时, 模拟得到的液桥稳定状态; (f) 两疏水固体平面间距离大于 H_c 时, 模拟得到的液桥稳定状态

Fig. 1 Simulation of liquid bridge between a plane and a sphere by Surface Evolver (a) The initial configuration in Surface Evolver program with spherical radius 5 mm , contact angle 60° and liquid volume $4 \mu\text{L}$; (b) Stable liquid bridge was simulated when the distance between two hydrophilic surfaces was less than the rupture distance H_c ; (c) Stable liquid bridge was simulated when the distance between two hydrophilic surfaces was more than the rupture distance H_c ; (d) The initial configuration in Surface Evolver program with spherical radius 5 mm , contact angle 120° and liquid volume $4 \mu\text{L}$; (e) Stable liquid bridge was simulated when the distance between two hydrophobic surfaces was less than the rupture distance H_c ; (f) Stable liquid bridge was simulated when the distance between two hydrophobic surfaces was more than the rupture distance H_c .

论预测符合的也很好,误差均在 4.3% 以内。接下来给定液桥体积 $4 \mu\text{L}$,球面半径 5 mm ,改变固体表面的润湿性质,同样得到一组液桥断裂距离值,如图 2(c)所示。当固体表面为亲水表面($\theta < 90^\circ$)时,模拟结果与理论结果吻合更好;当固体表面为疏水表面($\theta > 90^\circ$)时,模拟结果和理论结果的误差随着表面疏水程度的增加而增大,并且模拟数值开始比理论预测值小,即模拟的液桥更加容易断裂。

为了更加直观地对比同样液体体积($4 \mu\text{L}$)所形成的液桥在表面曲率变化和润湿性质变化下整体

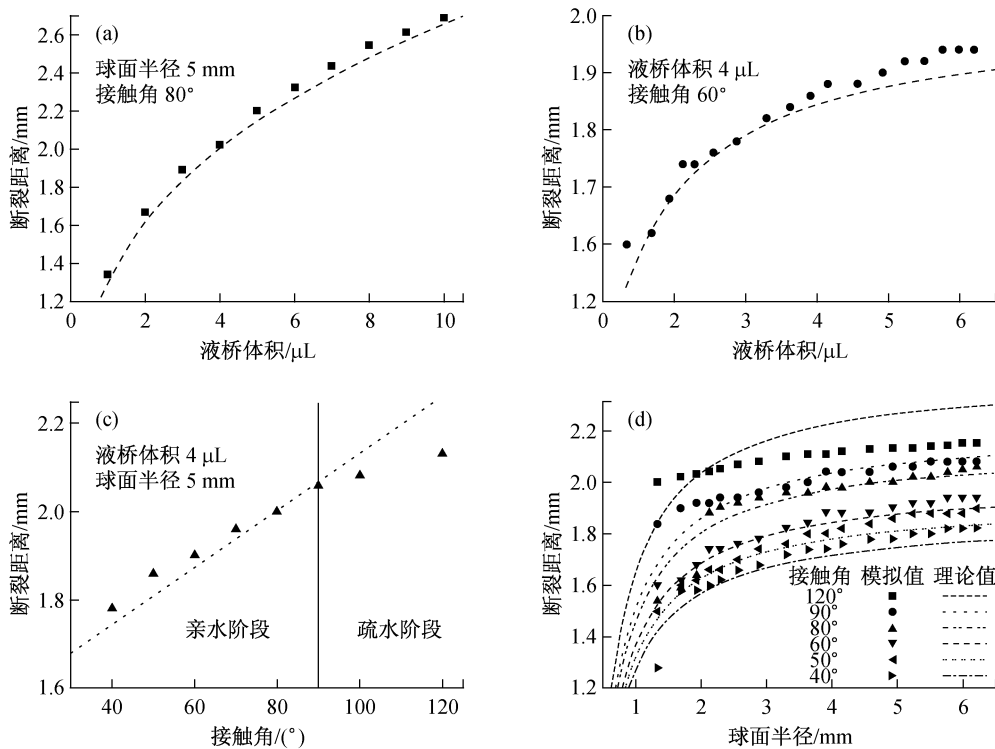


图2 理论和模拟的液桥断裂距离随着各个参数变化情况 (a)、(b)、(c)分别为随液桥体积、球面半径、接触角变化的液桥断裂距离变化的理论曲线及模拟结果曲线,(d)不同接触角(40°~120°)情况下断裂距离随球面半径变化的对比图

Fig.2 Theoretical and simulation results for variation of rupture distance with different parameters (a)、(b)、(c) Curves of theoretical and simulation results for variation of rupture distance with liquid volume, radius of sphere and contact angles, respectively, (d) Contrast curves of variation of rupture distance with radius of sphere under different contact angles (40°~120°)

变化趋势,将不同接触角情况下液桥断裂距离随球面半径变化的数据整理在一起,如图2(d)所示。从图2(d)所给出的结果可以看出,当固体表面为亲水表面时,模拟所得到的结果与理论结果符合的很好;当固体表面转变为疏水表面时,模拟结果与理论预测结果的误差开始增大。

所用的液桥断裂距离理论公式(4)是从 Lian 等^[12]和 Willett 等^[13]所得结果发展而来的,而 Lian 等^[12]的结果是由接触角较小($\theta < 40^\circ$)的情况下拟合所得到的;因此,式(4)预测在亲水表面上液桥断裂距离的数值更加接近于真实情况。其预测值与模拟所得到的结果吻合得很好,不仅在接触角较小阶段($\theta < 40^\circ$),在亲水阶段($\theta < 90^\circ$)的模拟值与理论值符合得都很好(误差 < 4.3%);而当固体表面的呈现出疏水性质时,模拟结果与理论预测结果的误差逐渐增大。

3 结论

本文利用 Surface Evolver 有限元程序模拟介于平面和球面之间的液桥拉伸断裂过程,由此得到给定参数(固-液间接触角 θ 、液桥液体体积 V 、球面半径 R)情况下的液桥断裂距离 H_0 。通过 Willett 等^[13]总结出的两不同半径球面间液桥断裂公式演变出平面和球面间液桥断裂距离公式。用 Surface Evolver 模拟所得到的液桥断裂距离结果与所给的理论公式预测结果进行比较。整体上看模拟值与理论值相吻合,说明 Surface Evolver 可以很好地模拟液桥拉伸和断裂过程,并可得到较为精确的液桥断裂距离。理论公式来源于亲水数据拟合,从本文的对比结果也反映了这一点。在亲水表面上进行液桥断裂过程模拟,得到的断裂距离与理论结果偏差很小(误差 < 4.3%)。而在疏水表面上模拟得到的液桥断裂距离就与理论预测结果的偏差便开始增大。

表明本文给出的液桥断裂距离理论公式在亲水阶段可以很好地预测液桥发生断裂的条件。

参考文献:

- [1] Haines WB. Studies of the physical properties of soils. II. A note on the cohesion developed by capillarity forces in an ideal soil [J]. J Agric Sci, 1925, 15: 529-535.
- [2] Fisher RA. On the capillarity forces in an ideal soil; Correction of formulae given by W. B. Haines [J]. J Agric Sci, 1926, 16: 492-505.
- [3] Su YW, Ji BH, Huang YG, *et al.* Effects of contact shape on biological wet adhesion [J]. J Mater Sci, 2007, 42 (21): 8885-8893.
- [4] De Souza EJ, Brinkmann M, Mohrdieck C, *et al.* Enhancement of capillary forces by multiple liquid bridges [J]. Langmuir, 2008, 24(16): 8813-8820.
- [5] Adams MJ, Johnson SA, Seville JPK, *et al.* Mapping the influence of gravity on pendular liquid bridges between rigid spheres [J]. Langmuir, 2002, 18(16): 6180-6184.
- [6] Rabinovich YI, Esayanur MS, Moudgil BM. Capillary forces between two spheres with a fixed volume liquid bridge: Theory and experiment [J]. Langmuir, 2005, 21 (24): 10992-10997.
- [7] Gogelein C, Brinkmann M, Schroter M, *et al.* Controlling the formation of capillary bridges in binary liquid mixtures [J]. Langmuir, 2010, 26(22): 17184-17189.
- [8] Sirghi L, Nakagiri N, Sugisaki K, *et al.* Effect of sample topography on adhesive force in atomic force spectroscopy measurements in air [J]. Langmuir, 2000, 16(20): 7796-7800.
- [9] Sirghi L, Szoszkiewicz R, Riedo E. Volume of a nanoscale water bridge [J]. Langmuir, 2006, 22(3): 1093-1098.
- [10] Sprakel J, Besseling NAM, Stuart MAC, *et al.* Capillary adhesion in the limit of saturation: Thermodynamics, self-consistent field modeling and experiment [J]. Langmuir, 2008, 24(4): 1308-1317.
- [11] Mazzone DN, Tardos GI, Pfeffer R. The effect of gravity on the shape and strength of a liquid bridge between 2 spheres [J]. J Colloid Interface Sci, 1986, 113(2): 544-556.
- [12] Lian GP, Thornton C, Adams MJ. A Theoretical-study of the liquid bridge forces between 2 rigid spherical bodies [J]. J Colloid Interface Sci, 1993, 161(1): 138-147.
- [13] Willett CD, Adams MJ, Johnson SA, *et al.* Capillary bridges between two spherical bodies [J]. Langmuir, 2000, 16 (24): 9396-9405.
- [14] Brakke KA. The surface evolver [J]. Exp Math, 1992, 1 (2): 141-165.
- [15] Chou TH, Hong SJ, Liang YE, *et al.* Equilibrium phase diagram of drop-on-fiber: Coexistent states and gravity effect [J]. Langmuir, 2011, 27(7): 3685-3692.
- [16] Chatain D, Lewis D, Baland JP, *et al.* Numerical analysis of the shapes and energies of droplets on micropatterned substrates [J]. Langmuir, 2006, 22(9): 4237-4243.
- [17] Dorrer C, Ruhe J. Contact line shape on ultrahydrophobic post surfaces [J]. Langmuir, 2007, 23(6): 3179-3183.
- [18] Ling WYL, Lu G, Ng TW. Increased stability and size of a bubble on a superhydrophobic surface [J]. Langmuir, 2011, 27(7): 3233-3237.