

月壤颗粒间的范德华力作用研究进展*

赵学亮¹ 王浩¹ 陈正翰¹ 杨建中² 徐赵东¹

1(东南大学土木工程学院 南京 211189)

2(北京空间飞行器总体设计部 北京 100094)

摘要 当前中国嫦娥工程“绕、落、回”三期任务已经圆满完成，为保持中国月球探测技术的领先地位，对月壤的力学特性进行研究具有重要意义。月表所处环境高真空、低重力和强辐射等特点使月壤表现出不同于地面砂土的性质，导致这一现象最主要的原因之一是月壤颗粒间的范德华力作用。本文对当前有关范德华力的研究进行总结，分别从分子/原子间的范德华力计算、范德华力的迟滞性、理想条件下宏观物体间的范德华力计算和真实条件下范德华力的计算四个方面对目前已有的研究进行分析，给出当前宏观颗粒间范德华力研究的不足，为今后月壤颗粒间范德华力的进一步研究提供参考。

关键词 范德华力，卡西米尔力，表面能，月壤

中图分类号 P184.8

Review on van der Waals Interaction between Lunar Soil Particles

ZHAO Xueliang¹ WANG Hao¹ CHEN Zhenghan¹

YANG Jianzhong² XU Zhaodong¹

1(School of Civil Engineering, Southeast University, Nanjing 211189)

2(Institute of Spacecraft System Engineering, Beijing 100094)

Abstract With the successful completion of the three-phase tasks of “orbiting”, “landing” and “returning” of China’s Chang’e project, it is of great significance to study the mechanical properties of lunar soil, which is the most fundamental requirement for the lunar basement construction and other lunar engineering projects. The characteristics of high vacuum, low gravity, and strong radiation in the environment of the lunar surface make the lunar regolith different from the terrestrial sands. One of the main differences between lunar regolith and terrestrial sands is that lunar regolith is slightly cohesive, while terrestrial sands are usually non-cohesive. This difference can be attributed to the van der Waals

* 国家自然科学基金项目资助 (U2037602)

2022-04-02 收到原稿, 2022-10-18 收到修定稿

E-mail: zhaoxl@seu.edu.cn

©The Author(s) 2023. This is an open access article under the CC-BY 4.0 License
(<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>)

interaction between lunar soil particles. This paper summarizes the current research on van der Waals force, and analyzes the existing research from four aspects: the calculation of van der Waals force between molecules / atoms, the retardation of van der Waals force in long-range, the calculation of van der Waals force between macro bodies under ideal hypothesis conditions and the calculation of van der Waals force under realistic conditions. At last, shortcomings of the current research on van der Waals force between macro bodies are given. The purpose of this paper is to provide a relatively thorough and theoretical reference for the further study of van der Waals force between lunar soil particles.

Key words van der Waals force, Casimir force, Surface energy, Lunar soil

0 引言

作为离地球最近的天体,月球是人类走出地球探索深空的首选目标。20世纪60至70年代,美国和苏联带头掀起了人类第一波探月高潮,美国 Apollo 系列载人飞船任务和苏联 Luna 探月任务使人类获取了海量与月球相关的资料,并成功带回真实月壤的样本。2020年中国嫦娥5号月球探测器的成功发射与月表取样返回标志着中国嫦娥工程“绕、落、回”三期任务圆满完成^[1]。当前俄罗斯、日本、韩国和印度等国家也相继启动了月球探测计划,新的探月高潮已经到来。

不同于地表环境,月表环境具有高真空、低重力等特点^[2-5],这使得月壤表现出一些地球上干粉砂所没有的力学性质,Surveyor 7号探测器在月球表面对月壤进行的沟槽试验结果显示,沟槽侧壁并未坍塌,而是保持垂直,这表明月壤具有一定的黏聚力,研究认为这是由月壤颗粒的表面能作用引起的,其中最主要的两种作用力为范德华力和库仑力^[6]。

现有研究表明,月壤为一层覆盖在月球表面厚度达数米的松软风化物,颗粒细小且结构松散,与地球上的干粉砂类似;绝大部分月壤颗粒的粒径为30~1000 μm,平均粒径为70 μm^[7,8]。不同粒径的颗粒形态各异,形状差别大,从球形到尖锐棱角状都有分布,主要形状有棱角状、次棱角状和长条状等^[7];并且月壤颗粒形状不规则,为多棱角和多气孔结构,颗粒表面凹凸不平且较为粗糙^[9,10]。文献[11]中取颗粒间距约等于颗粒直径,对颗粒间的库仑力、范德华力以及重力大小进行了对比,结果表明在30~1000 μm粒径范围内,范德华力的大小是不可忽略的。

对于范德华力的研究,目前主要集中在胶体的稳

定性研究^[12-15]、微型机器除尘研究^[16,17]以及纳米碳纤维管的研究^[18,19]等领域,对月面环境下的范德华力研究主要是基于前述研究领域所取得的成果而进行的。本文对当前范德华力的研究现状进行梳理和分析,为今后月壤颗粒间范德华力的进一步研究提供参考。

1 分子/原子间的范德华力计算理论

分子间作用力最早是荷兰物理学家 Johannes Diderik van der Waals 在研究实际气体对理想气体状态方程的影响时提出的,因此分子间作用力又称为范德华力,其作用能比分子间的化学键键能弱1~2个数量级。范德华力的来源主要有三个方面^[20,21]:一是由于极性分子间固有偶极的静电吸引作用形成的取向力;二是由于极性分子极化邻近的非极性分子,使其产生诱导偶极后,诱导偶极与极性分子的固有偶极间的静电吸引作用形成的诱导力;三是由于分子本身电子概率运动产生的瞬时偶极间相互吸引作用而形成的色散力。一般情况下,这三种范德华力来源中,以色散力为主导,并且范德华力为近程力,表现为分子间近距离(10^{-4} μm)的吸引力^[21]。

对于分子间作用力的描述,目前使用较广的是解析式兰纳-琼斯势能(L-J势)^[22],最早由数学家 John Lennard Jones 于1924年提出,将其用来描述惰性气体分子间相互作用尤为精确。兰纳-琼斯势能以分子间的距离为唯一变量,其基本解析形式如下:

$$W_{LJ}(R) = \frac{A}{R^{12}} - \frac{B}{R^6}. \quad (1)$$

式中, A 和 B 两个常数通过试验拟合得到, R 表示两分子(原子)之间的距离;式中第一项用于描述两分子距离较近时以相互排斥为主的作用,第二项用于描述

两分子相距较远时以相互吸引为主的作用, 定义排斥作用与吸引作用相互抵消时两分子间的距离 R_0 为平衡距离。

分子间的范德华力以相互吸引为主, 1930 年德国物理学家 London^[23,24] 根据量子力学原理对色散力进行证明, 并给出如下色散作用能计算公式:

$$W_L(R) = -\frac{C}{R^6}. \quad (2)$$

式中, C 为伦敦色散系数, 约为 $10^{-76} \text{ J} \cdot \text{m}^6$; R 为分子(原子)间的距离。

当前范德华力的计算理论大部分都是基于式(1)和式(2)进行推导的, 然而 L-J 势中描述排斥作用的 12 次方项尚未有理论依据支撑。Wilson 等^[25] 对量子原子间的相互作用 (Interacting Quantum Atoms, IQA) 研究表明, 指数关系能够更好地描述原子间的短距离斥力, 例如 Buckingham 势能公式^[26], 即

$$W_B(R) = C_1 e^{-C_2 R} - \frac{C_3}{R^6}. \quad (3)$$

式中, C_1, C_2, C_3 为试验获取参数, R 为分子(原子)间的距离, 式中描述引力的 6 次方项与 L-J 势保持一致。

最近有研究^[27] 提出了一种描述分子(原子)间范德华作用能的双指数势能公式, 即

$$W_{\text{Wu}}(R) = \varepsilon_0 \left(\frac{\beta e^\alpha}{\alpha - \beta} e^{-\alpha \frac{R}{R_m}} - \frac{\alpha e^\beta}{\alpha - \beta} e^{-\beta \frac{R}{R_m}} \right). \quad (4)$$

式中, α 和 β 为描述斥力和引力项的系数, R 为分子(原子)间的距离, 当 $R=R_m$ 时势能为最小值 $-\varepsilon_0$ 。式(4)收敛速度快于 L-J 势, 并且通过适当调整式(4)中的系数, 可退化为 L-J 势。

2 范德华力的迟滞效应

在 London 的理论中, 分子 A 由于自身电子的概率运动产生了瞬时偶极, 瞬时偶极产生的电场 E_A 极化与分子 A 邻近的分子 B, 使分子 B 产生诱导偶极, 瞬时偶极与诱导偶极之间的相互作用产生了色散力^[24,28]。该过程中默认电场 E_A 是瞬间传播到分子 B 的, 而实际上电场是以光速 c 进行传播的。假设两分子间的距离为 r , 则电场 E_A 传播到分子 B 所需时间 $\Delta t = r/c$, 在这个过程中如果分子 A 的瞬时偶极发生改变, 两分子间的相互作用会减弱。因此 London 的理论应满足 $\Delta t = r/c < 1/\nu$ 的前提条件, 这里

ν 为分子中电子运动的特征频率, 从而得到分子间距应满足 $r < c/\nu \approx 10 \text{ nm}$ ^[28]。

Casimir 等^[29] 基于量子力学理论, 考虑范德华力的迟滞效应重新对 London 的理论进行研究, 指出当两中性原子间的距离 R 小于其自身振动波长时, 二者间的相互作用符合 London 的理论, 即范德华作用能与距离 R 呈 6 次方衰减, 如式(1)所示; 当二者间距离 R 大于其自身振动波长时, 范德华作用能与距离 R 呈 7 次方衰减, 即

$$W_C(R) = -\frac{23}{4\pi} \hbar c \frac{\alpha_1 \alpha_2}{R^7}. \quad (5)$$

式中, $\hbar$ 为普朗克常数; c 为光速; α_1, α_2 分别为两原子的静态极化率; R 为两原子间的距离。利用式(5)对 R 求导得到了两原子间考虑迟滞效应后的范德华力, 称为卡西米尔力 (Casimir Force)。

随后 Casimir^[30] 通过计算真空零点能推导了真空中两个宏观金属板之间单位面积的卡西米尔力, 即

$$F_C(R) = \frac{\pi^2 \hbar c}{240 R^4}. \quad (6)$$

式中, $\hbar$ 为普朗克常数, c 为光速, R 为两平板间的距离。式(6)中没有与金属板本身性质相关的参数, 因此卡西米尔力具有普适性, 在两颗颗粒间距尺度较大时, 有必要考虑颗粒间的卡西米尔力而忽略颗粒间的范德华力^[31]。

有研究^[32,33] 表明, 仅当距离尺度很小时才存在完全非迟滞性的范德华力, 随着距离的增大, 范德华力表现出迟滞性, 并逐渐转变为卡西米尔力。Dowlati 等^[34] 基于艾林根非局部弹性理论对纳米结构表面的范德华力与卡西米尔力之间的转换进行了研究, 指出范德华力占主导的距离范围为 $0.5 \sim 4 \text{ nm}$, 当距离逐渐增大到 18 nm 时, 范德华力的主导地位随距离的增大而下降, 卡西米尔力逐渐占据主导地位, 当距离大于 18 nm 时, 完全由卡西米尔力主导。

3 理想条件下的宏观范德华力计算理论

理想条件是指颗粒和平面的表面光滑, 并且颗粒为规则几何体。这里介绍理想条件下的宏观范德华力计算理论。不同于分子之间的范德华力, 对月壤进行研究时, 通常希望获得的是月壤颗粒间的范德华力, 研究对象为宏观的月壤颗粒而非微观分子。此前

已有研究基于参数变分原理对两原子之间的范德华力作用本构关系进行推导, 并采用二次规划方法对纳米碳纤维管之间的范德华作用进行了有限元分析^[18]。对于宏观物体间的范德华力计算目前主要有两大理论: 一是 Hamaker^[35] 提出的叠加理论, 将颗粒所有分子间的范德华力累加得到总的范德华力; 二是 Lifshitz^[36] 提出的连续体理论, 将颗粒的宏观电动力性质与范德华作用能相关联来计算范德华力。二者的主要区别在于 Hamaker 系数的计算方式不同。Hamaker^[37] 假设分子间的范德华力具有叠加性, 即两物体间的范德华力等于两者内部所有分子间的范德华力之和, 并基于式(2)积分得到两个光滑的具有无限厚度的平面间范德华作用能和范德华力的大小, 即

$$W(D) = -\frac{\pi C \rho_1 \rho_2}{12D^2} = -\frac{A}{12\pi D^2}, \quad (7)$$

$$F(D) = \frac{\partial W}{\partial D} = \frac{A}{6\pi D^3}. \quad (8)$$

式中, ρ_1 和 ρ_2 为两平面的分子密度; D 为两平面间的距离; $A = \pi^2 C \rho_1 \rho_2$, 为 Hamaker 系数。其计算原理如图 1 所示。

为估算两颗粒之间相互作用的范德华力大小, Hamaker^[35] 将形状不规则的颗粒简化为球体, 并基于式(2)对两个相隔一定距离的球体颗粒间的范德华力进行了推导。需要说明的是, 现实中两颗粒相互接触时, 二者接触部分会产生变形进而形成一个接触面, 而 Hamaker 的推导并未考虑这一实际因素。在以上理论的基础上, 有学者对月壤颗粒间的范德华力从实际相互接触的角度进行了深入研究。Perko 等^[6] 将月壤颗粒简化为球体, 推导了相同半径的两月壤颗粒相互接触时颗粒间的范德华力计算公式, 如图 2 所示,

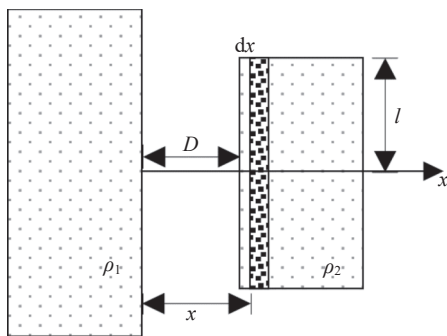


图 1 平面间范德华力计算示意

Fig. 1 Schematic diagram of the calculation of van der Waals force between two planes

用半径为 $R_A = R_B = R$ 的圆球表示月壤颗粒, 圆球的接触面为一个半径为 a 的圆面, 两颗粒的间距为 D 。颗粒间的范德华力 F_v 可看作由两部分构成: F_{v1} 来自两颗粒内部以接触平面为底形成的圆柱体之间的吸引力; F_{v2} 来自颗粒剩余部分的相互吸引作用。范德华力的方向为两颗粒球心的连线方向, F_{v1} 可通过式(8)乘以接触面的面积得到。此外, 将颗粒剩余部分视为由无数个薄壁圆柱面组成, 再利用式(8)将薄壁柱面间的范德华力积分得到 F_{v2} 。最终两颗粒间的范德华力大小如下:

$$F_v(D) = F_{v1}(D) + F_{v2}(D) = \frac{Aa^2}{6D^3} + \frac{AR}{12D^2}. \quad (9)$$

式中, A 为 Hamaker 系数, a 为颗粒接触面的半径, D 为颗粒的间隔距离, R 为颗粒半径。

Hamaker 理论的缺陷在于假设范德华力具有累加性而忽略了群体效应对两分子间范德华力的影响, 这使得最后累加得到的范德华力比实际大^[38]。有研究^[39] 指出, 是否采用叠加假设取决于物质的密度, 对于密度较小的物质, 其分子分布相对分散, 群体效应的影响较小, 这时采用叠加法计算范德华力是可行的。此外, Hamaker 的理论也未考虑范德华力的迟滞效应, 针对 Hamaker 叠加理论的这些缺陷, Lifshitz 等^[36,40,41] 基于物质本身的电动力性质重新推导了 Hamaker 系数的计算公式, 其研究表明, 在介质中物质 1 与物质 2 产生范德华作用时, Hamaker 系数的计算如下:

$$A_L = \frac{3}{4} k_B T \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_3}{\varepsilon_1 + \varepsilon_3} \frac{\varepsilon_2 - \varepsilon_3}{\varepsilon_2 + \varepsilon_3} + \frac{3\hbar\nu_e}{8\sqrt{2}} \frac{(n_1^2 - n_3^2)(n_2^2 - n_3^2)}{\sqrt{n_1^2 + n_3^2} \sqrt{n_2^2 + n_3^2} (\sqrt{n_1^2 + n_3^2} + \sqrt{n_2^2 + n_3^2})}. \quad (10)$$

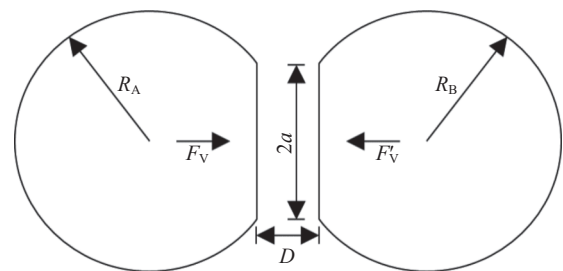


图 2 月壤颗粒接触示意

Fig. 2 Schematic diagram of two lunar soil particles in contact

式中, k_B 为玻尔兹曼常数; T 为环境温度; $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ 分别为物质 1、物质 2 和介质的相对介电常数; $\hbar$ 为普朗克常数; ν_e 为紫外线中的主要电子吸收频率; n_1, n_2, n_3 分别为物质 1、物质 2 和介质的折射率。式中第一项是对取向力和诱导力的描述, 第二项是对色散力的描述。

由于月壤颗粒半径相同的假设具有较大局限性, Jiang 等^[42] 考虑两半径不同的月壤颗粒对 Perko 的理论进行了完善, 同时建立考虑范德华力的月壤颗粒接触本构模型。一方面, 该模型通过引入形状系数控制颗粒接触面的大小, 达到颗粒形状特征量化的目的; 另一方面, 该模型考虑了颗粒间的抗转动作用, 实现对真实月壤颗粒间的咬合作用和自锁作用模拟。该本构模型的特点在于仅引入一个形状系数便实现了对颗粒形状的特征, 利用离散元软件实现起来较为简便。但其可能的局限性在于颗粒形状对月壤力学特性的影响机制是复杂的, 仅通过一个形状系数很难对不同形状的月壤颗粒进行准确区分^[43]。

由式(9)可以看出, 基于 Lennard-Jones 势能理论推导的两月壤颗粒间的范德华力除与颗粒半径 R 有关外, 还受到 Hamaker 系数 A 、颗粒间距 D 以及颗粒接触面半径 a 的影响。其中 Hamaker 系数主要受环境条件影响, 可由 Hamaker 或 Lifshitz 的理论计算得到, 对于月面环境, 一般可取为 $4.3 \times 10^{-20} \text{ J}$ ^[6]。

对于颗粒间的接触变形, 或者说颗粒间的接触面半径, 当前已有较为广泛的研究。Chang 等^[44] 基于 Hertz 理论推导的弹性颗粒间接触半径与受力的关系, 计算月壤颗粒相互接触时的接触面半径, 有

$$a = \sqrt{\delta R}. \quad (11)$$

式中, a 为接触面半径, δ 为颗粒的法向变形, R 为颗粒平均半径。由于 Hertz 理论假设两颗粒间的相互作用是线弹性的, 并未考虑颗粒的表面能对颗粒接触面半径的影响, 这使得实际计算的接触面半径偏小。

Cooper 等^[13,14] 对表面粗糙、可变形的球体颗粒与光滑硬质表面之间的范德华力进行研究, 并利用扫描电子显微镜 (SEM) 获取了聚苯乙烯乳胶材质的球体颗粒与硅质表面相互接触时的接触图像, 然后通过直接测量图像上的接触面半径, 拟合得到接触面半径与球体颗粒半径之间的关系, 即

$$a = 0.24 \cdot R^{0.5}. \quad (12)$$

式中, a 为接触面半径, R 为球体颗粒半径。

Johnson 等^[45] 考虑颗粒的表面能作用对 Hertz 理论进行修正, 基于线性叠加原理和最小能原理, 结合 Boussinesq 问题的解推导出 JKR 模型。该模型认为表面能作用于颗粒接触面的范围内, 适用于颗粒刚性较小、接触面积较大的情况^[46], 其接触面半径计算公式如下:

$$a^2 = \delta R + \left(\frac{4\pi\gamma a}{E'} \right)^{\frac{1}{2}} R. \quad (13)$$

式中, a 为接触面半径, δ 为颗粒的法向变形, E' 为颗粒的有效模量, R 为颗粒平均半径, γ 为颗粒单位面积上的表面能。Parteli 等^[47] 将式(13)两边同时取平方, 得到关于接触面半径 a 的一元四次方程, 并给出满足修正 Hertz 理论的唯一解。

Derjaguin 等^[12] 同样基于 Hertz 理论, 考虑颗粒表面能的作用对颗粒与平面之间的相互作用进行研究, 推导接触面上的范德华力计算公式, 提出 DMT 模型。与 JKR 模型不同的是, DMT 模型考虑的是颗粒接触面以外部分的表面能作用, 并且假设表面能的作用不会引起形变, 适用于颗粒刚性较大、接触面积较小的情况^[46], 该模型中接触面半径的计算公式为

$$a = \left(\frac{3\pi R^2 \gamma}{2E'} \right)^{\frac{1}{3}}. \quad (14)$$

可以看到 JKR 模型和 DMT 模型对于表面能的考虑是存在冲突的。Tabor^[48] 对这两个模型理论进行了梳理分析, 指出这两个理论实际上分别对应于两种极端情况, 并引入无量纲参数

$$\alpha = \left(\frac{R\gamma^2}{E^2 D_0^3} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (15)$$

进行描述。当 $\alpha > 3 \sim 5$ 时, 对应颗粒尺寸以及表面能较大、弹模较小的情况, 适用于 JKR 模型; 当 $\alpha < 0.1$ 时则相反, 适用于 DMT 模型, 式中 D_0 为颗粒间的间距。

4 真实条件下的宏观范德华力计算理论

真实条件是指颗粒和平面的表面粗糙, 并且颗粒形状不规则。在进行理想条件下的范德华力计算理论推导时, 为简化计算, 将颗粒假定为球体, 忽略颗粒

的形状特征以及颗粒表面粗糙度对于范德华力的影响。事实上,粗糙的表面会极大地降低颗粒间的范德华力^[48],采用上述理论计算的范德华力通常是偏大的。因此,有研究考虑利用颗粒与平面的表面特征以及颗粒的形状特征等对上述理论进行完善,目前主要有三种思路:一是引入特征参数,即沿用颗粒为球体、平面表面光滑的假设,通过引入一些参数描述颗粒的形状和表面粗糙度等特征;二是采用数值模拟,基于分形理论和快速傅里叶变换算法(FFT)等数学方法,考虑颗粒形状和粗糙度等因素对颗粒表面和平面进行建模研究;三是采用试验研究,通过原子力显微镜(AFM)和扫描电子显微镜(SEM)等设备直接对真实的微小颗粒与平面的相互作用进行研究,也有研究采用离心机试验获得颗粒间的范德华力。

表面的粗糙程度一般采用均方根粗糙度(Root Mean Square Roughness)进行描述,均方根粗糙度定义为测量范围内表面轮廓上各点高度的均方根值,以符号 ξ 表示。Rumpf 等^[49,50]将粗糙的平面简化为具有一个半球形突起的光滑平面(见图3),给出该平面模型的均方根粗糙度近似计算公式,即

$$\xi = 0.673r. \quad (16)$$

式中, r 为半球形突起的半径。

Rumpf 等^[49,50]考虑单个球体颗粒与该平面相互作用的情况,根据该平面的均方根粗糙度对 Hamaker 推导的范德华力计算公式进行修正,修正后的范德华力计算公式为

$$F_{\text{vdw}} = \frac{AR}{6H_0^2} \left[\frac{1}{1 + R/(1.48\xi)} + \frac{1}{(1 + 1.48\xi/H_0)^2} \right]. \quad (17)$$

式中, A 为 Hamaker 系数; R 为颗粒半径; H_0 为颗粒表面与平面间的最近距离,近似取为0.3 nm。

式(17)中第一项表示颗粒与平面上突起接触部分的范德华力,第二项表示颗粒与平面未接触部分的范德华力,随后 Brambilla 等^[51]将该理论拓展到杆状颗粒与粗糙平面相互作用时的范德华力计算。

LaMarche 等^[52,53]将 Rumpf 的理论进一步拓展到两个粗糙平面间的范德华力计算,将粗糙平面表面的轮廓视为由一系列不同波长和振幅的波合成,并将表面粗糙度分为大小两种尺度,分别通过对 AFM 获取的实际表面轮廓进行高通和低通的 FFT 过滤,获取该表面的大小尺度粗糙轮廓,然后计算每个轮廓的

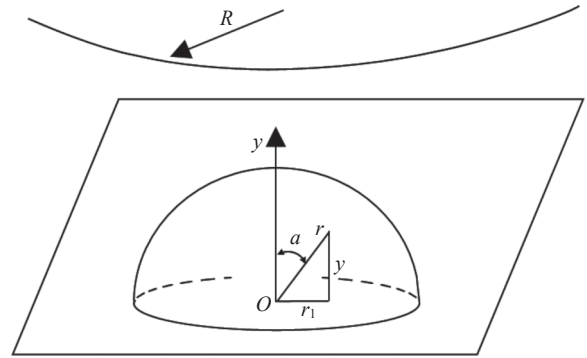


图3 颗粒表面与粗糙平面简化接触状态

Fig. 3 Simplification of contact between particle surface and rough plane surface

RMS 和平均波长,最后采用与 Rumpf 类似的思路将这两个参数引入范德华力计算公式中^[53]。

Jiang 等^[42]通过引入颗粒形状系数,定量描述月壤颗粒的形状特征和月壤颗粒粗糙度等,并通过乘以形状系数对两月壤颗粒接触时的接触面半径进行修正,达到量化月壤颗粒表面特征的目的。You 等^[54]基于分形理论对 JKR 及 DMT 模型中的接触面半径进行修正,考虑颗粒形状和粗糙度的影响。通常 AFM 测得的表面 ξ 只是表面局部特征,因此将表面的 ξ 与表面尺度相联系,可通过 AFM 测得的表面局部 ξ 得到整体的 ξ ,有

$$\xi_{\text{surface}} = \xi_{\text{scan}} (\lambda/\lambda_{\text{scan}})^{3-D}. \quad (18)$$

式中, ξ_{scan} 为 AFM 扫描得到的均方根粗糙度, λ_{scan} 为扫描的表面尺度, λ 为实际的表面尺度, D 为表面的分形维度,大小在 2~3 内。修正的半径计算公式如下:

$$a = \sqrt{C_0 \cdot a_0}, \quad (19)$$

$$C_0 = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erf} \left(\frac{\bar{\delta}_1 + \bar{\delta}_2 - h_{\min}}{\sqrt{2(\xi_1^2 + \xi_2^2)}} \right) + 1 \right]. \quad (20)$$

式中, a_0 为由 JKR 或 DMT 模型计算的接触面半径; $\bar{\delta}_1$ 和 $\bar{\delta}_2$ 分别为两表面的平均变形,可通过 JKR 或者 DMT 理论计算得到; ξ_1 和 ξ_2 分别为两表面的均方根粗糙度,可由式(18)得到; $h_{\min}$ 为表面轮廓上的最大波谷深度。采用这种方法虽然能够极大地降低计算成本,但是仅用一个参数不能准确描述不同颗粒的表面特征。

与 Rumpf 的思路类似,Cooper 等^[55]也采用生成半球体模拟粗糙的表面,借助扫描电子显微镜(SEM)

获取形状非对称的颗粒与平面相互作用时的图像,并采用 CAD 体积重构方法确定颗粒接触区域的几何形状。通过 AFM 对颗粒和平面的表面形态进行扫描,获取表面轮廓上各点的高度、各波峰的间距并计算表面的均方根粗糙度和粗糙区域的覆盖率。利用数学建模方法对粗糙的颗粒表面和平面表面进行建模,具体为:生成形状大小和接触区域一致的光滑表面,然后在表面上的随机位置生成半球体模拟粗糙表面,半球体的高度满足正态分布,并且该正态分布通过 AFM 试验中表面轮廓上各点高度的平均值和方差确定。当表面上半球体的覆盖率等于 AFM 试验中粗糙区域的覆盖率时即完成表面建模。最后将建模后的颗粒表面离散为多个小的圆柱单元(见图 4),基于式(8)计算各圆柱体与表面间的范德华力,有

$$F_{cy}(D) = \frac{A}{6\pi D^3} \cdot s_{cy}. \quad (21)$$

式中, D 为圆柱单元与平面间的距离, A 为 Hamaker 系数, s_{cy} 为圆柱单元的底面积。通过累加得到总的范德华力。

Eichenlaub 等^[56] 基于 Cooper 的研究思路,首先借助 AFM 获取几种光滑和粗糙表面的形态特征。然后采用三种考虑表面粗糙度的方式对这些表面进行建模:一是与 Cooper 类似的通过在光滑表面上的随机位置生成半球体模拟粗糙表面;二是通过 AFM 获取各表面的分形维度,进而基于分形理论对粗糙表面进行建模;三是基于 AFM 获取的各表面上点的高度信息,借助混合基数 FFT 算法生成对应的粗糙表面。研究表明,采用第一种方式进行表面建模时,仅当表面形态较为简单、粗糙度较小时计算的范德华力与直接用 AFM 测量的结果相符,当表面形态较为复杂、粗糙度较大时计算值与实测值差异较大;

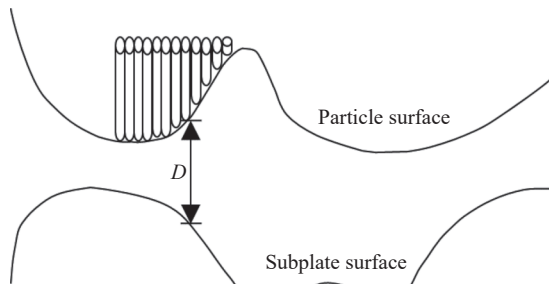


图 4 离散圆柱单元

Fig. 4 Discrete cylindrical elements

采用第二种方式只能对分形维度差距较大的表面进行建模,因为分形维度接近时建模生成的表面难以相互区分,并且对于同一个表面,随着 AFM 扫描尺寸的减小,所获取的该表面的分形维度也随之减小,这与同一试样分形维度不变相悖,因此这种方式不能用于这些表面的建模;采用第三种方式进行表面建模时,不管表面光滑还是粗糙,模拟计算的范德华力与 AFM 测量结果均保持着较高的符合度。

Delrio 等^[16] 采用多晶硅(Polysilicon)制作了粗糙度不同的表面,并结合试验与数值模拟方法对表面间的范德华力进行分析研究。其设定 AFM 的扫描尺寸为 $5 \mu\text{m} \times 5 \mu\text{m}$,每个方向设置 512 个像素单位,然后将两个表面的 AFM 扫描数据导入数字模型中,并基于平面间的范德华力公式计算每两个同轴像素点间的范德华力,再累加得到表面间的范德华力,即

$$F_{vdw}(D) = \frac{L_c^2}{N} \left[\sum \frac{A \cdot g_f(D)}{6\pi(d_{loc} + d_{co})^3} \right]. \quad (22)$$

式中, L_c^2 为 AFM 的扫描面积, N 为像素点个数, A 为 Hamaker 系数, d_{loc} 为两表面间同轴像素点间隔的距离, d_{co} 为表面间的截止距离(cut-off separation)^[37], $g_f(D)$ 为关于表面间距 D 的函数。可以发现,在计算颗粒-平面数值模型的范德华力时,一般先将二者表面离散化为多个小单元(例如圆柱单元),然后分别计算两同轴单元间的范德华力,再累加得到总的范德华力,这样做的缺陷是忽略了非同轴单元之间的范德华力。Jaiswal 等^[57] 基于 Mathematica 数学软件,采用纯数值模拟的方法对两离轴圆柱单元间的范德华力进行研究,并基于 Hamaker 的叠加原理推导了两离轴圆柱单元间范德华力竖向分量和水平分量的计算公式,即

$$F_{cy}^v(r) = -\frac{AR^2}{16r}(T_1' - T_2'), \quad (23)$$

$$T_1' = \left[\frac{1}{4(r_2 - R)D} + \frac{\arctan\left(\frac{r_2 - R}{D}\right)}{4D^2} - \frac{\arctan\left(\frac{r_2 - R}{D}\right)}{4(r_2 - R)^2} \right]_{r_2=r-R}^{r_2=r+R}, \quad (24)$$

$$T_2' = \left[\frac{1}{4(r_2 - R)D} + \frac{\arctan\left(\frac{r_2 + R}{D}\right)}{4D^2} - \frac{\arctan\left(\frac{r_2 + R}{D}\right)}{4(r_2 + R)^2} \right]_{r_2=r-R}^{r_2=r+R}, \quad (25)$$

$$F_{cy}^h(r) = -\frac{AR^2}{16}(T_1'' - T_2''), \quad (26)$$

$$T_1'' = \left\{ \frac{1}{2r(r_2 - R)^2} \left[1 - \frac{\arctan\left(\frac{r_2 - R}{D}\right)}{\frac{r_2 - R}{D}} \right] + \frac{1}{4r^2(r_2 - R)} \times \left[1 - \frac{\arctan\left(\frac{r_2 - R}{D}\right)}{\frac{r_2 - R}{D}} \right] - \frac{\arctan\left(\frac{r_2 - R}{D}\right)}{4D \cdot r^2} \right\}_{r_2=r-R}^{r_2=r+R}, \quad (27)$$

$$T_2'' = \left\{ \frac{1}{2r(r_2 + R)^2} \left[1 - \frac{\arctan\left(\frac{r_2 + R}{D}\right)}{\frac{r_2 + R}{D}} \right] + \frac{1}{4r^2(r_2 + R)} \times \left[1 - \frac{\arctan\left(\frac{r_2 + R}{D}\right)}{\frac{r_2 + R}{D}} \right] - \frac{\arctan\left(\frac{r_2 + R}{D}\right)}{4D \cdot r^2} \right\}_{r_2=r-R}^{r_2=r+R}. \quad (28)$$

式中, A 为 Hamaker 系数, R 为圆柱单元的半径, r 为两圆柱单元轴心的水平间距, D 为两圆柱单元间的竖直间距。

除了基于 Hamaker 理论计算考虑颗粒和平面的粗糙度及形状影响下的范德华力之外, 有研究基于 Lifshitz 理论计算考虑形状和粗糙度影响下的范德华力。Shen 等^[58] 基于 Lifshitz 理论提出了一种黏土片与球状颗粒间范德华作用的简便计算方法, 将黏土片简化为规则排列的基本立方体, 并采用蒙特卡罗积分法计算立方体与球体颗粒间的范德华力。Priye 等^[59] 针对 Hamaker 理论未考虑群体效应和范德华力的迟

滞效应等缺陷, 基于 Lifshitz 理论和第一性原理 (First-Principle), 提出一种计算不规则几何形状颗粒间范德华力的数值方法。该研究将不规则的表面离散化, 将其视为由半径很小的球体填充而成 (见图 5), 采用 Langbein 提出的多极展开级数, 计算考虑群体效应和迟滞效应的范德华作用能, 有

$$W_{\text{sphere}}(z, r_s) = -\frac{A_L}{6} \left(\frac{2r_s^2}{z^2 - 4r_s^2} + \frac{2r_s^2}{z^2} + \ln \frac{z^2 - 4r_s^2}{z^2} \right). \quad (29)$$

式中, r_s 为小球的半径, z 为两球质心间的距离, A_L 为采用 Lifshitz 理论计算的 Hamaker 系数, 最后累加得到总的范德华作用能。

因此, 考虑表面粗糙度和颗粒形状研究范德华作用包括 4 个步骤。(1) 获取实际表面和颗粒的特征, 例如表面的均方根粗糙度、接触面的形状以及颗粒不同角度的照片等, 这些可以通过 AFM、SEM 等试验获取^[14,16,56,60]。(2) 根据第一步获取的数据进行实际表面和颗粒的数值建模, 这里通常借助一些图片处理软件 (例如 PhotoModeler) 对颗粒的照片进行处理, 并使用 3D 体积重构技术对颗粒进行数值建模^[55,60], 对于表面可以采用 FFT 算法、分形理论等方法, 基于第一步获取的表面数据在 MatLab 中建模, 也有研究假设表面轮廓上各点的高度满足高斯概率分布, 并以此在模拟软件中生成随机的粗糙表面模型^[61-63]。(3) 使建模后的颗粒与表面相互靠近, 然后将二者接触部分离散化为小的基本单元, 通过计算这些基本单元之间的范德华力累加得到总的范德华力。(4) 将数值模拟计算与 AFM 试验测得的范德华力进行对比, 验证模拟方法的正确性。离散化时基本单元尺寸越小, 计

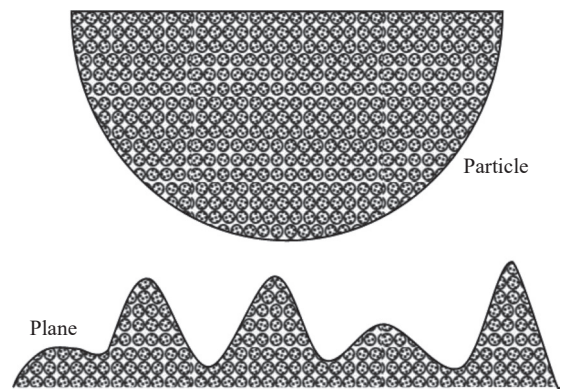


图 5 表面离散化

Fig. 5 Schematic diagram of surface discretization

算结果越精确,但是相应的计算效率会降低。为提高计算效率,Peng 等^[64]提出一种新的表面离散方法,定义粗糙表面上下5 nm的区域为有效区域,然后将该区域离散为球体单元,并采用蒙特卡罗积分法计算有效区域内的范德华力。由于范德华力随距离的增大迅速衰减,因此仅计算有效区域内基本单元的范德华力并未带来显著误差。

以上研究基本是关于单个颗粒或者单个颗粒与表面间范德华力作用的,没有涉及更符合实际的多颗粒间的范德华力作用。对此,Petean 等^[65]基于离心机试验研究了多颗粒(约 10^2 个)与粗糙平面间的范德华力作用,其基本原理为:先将颗粒附着在一个表面粗糙的圆盘上,然后将圆盘放入离心机,并使颗粒附着面的正法线方向背向离心机的角速度方向,这样当颗粒所受离心力等于其与圆盘间相互作用的范德华力时,便会从圆盘上剥离。其试验结果与采用 JKR 模型和 DMT 模型计算的理论结果相比偏小,这是由于这两个模型均是基于光滑的球体颗粒进行推导的,最后该研究根据试验结果修正了 JKR/DMT 模型的范德华力计算公式,即

$$F_{\text{vdW}} = k_t k_c \omega d_p. \quad (30)$$

式中, k_t 取决于所使用的理论模型,JKR 模型取 $3\pi/4$,DMT 模型取 π ; k_c 为修正系数,与颗粒和表面的性质有关; ω 为范德华力做的功,通过表面能计算; d_p 为颗粒直径。

5 结论

随着新的探月热潮的到来,研究月壤的力学特性对于建立月球基地及月球科考站具有重要意义。范德华力是月壤颗粒间的重要相互作用力,虽然目前已有一些关于月壤颗粒间范德华力的研究^[6,42,66],但是其范德华力计算理论已落后于当前最新的范德华力研究理论。因此,将最新的范德华力计算理论纳入月壤颗粒间的相互作用研究具有重要现实意义。

本文对微观分子间的范德华力计算模型和范德华力迟滞性进行介绍,梳理分析了光滑表面和规则形状的颗粒间范德华力计算理论,并对目前颗粒和表面的形状以及粗糙度的量化方法进行了分析。目前对于宏观物体间的范德华力计算主要有 Hamaker 的叠加理论和 Lifshitz 的连续体理论,前者仅考虑了色散

力作用,计算较为简便,后者包括了取向力、诱导力和色散力,理论上更为完善,但是计算更加复杂。对于表面粗糙度和颗粒形状的研究主要有三种方法:一是引入修正参数对经典公式进行修正;二是采用数值建模的方式对实际表面进行模拟,然后将表面离散化,再累加/积分得到总的范德华力;三是通过 AFM、离心机等试验直接测得实际颗粒与表面相互作用的范德华力,再根据试验结果对经典理论进行修正或直接拟合得到新的公式。通常会综合使用这三类方法。

总体而言,要将范德华力纳入月壤颗粒间的相互作用研究中,目前宏观颗粒间的范德华力计算理论可能主要存在以下几方面不足,需要开展更多研究工作进一步完善。(1)当前的研究多是基于小粒径颗粒($0.001 \sim 10 \mu\text{m}$)进行的,而实际月壤平均粒径在 $70 \mu\text{m}$,小粒径颗粒间通常形成的是点点接触,而大粒径的月壤颗粒间由于咬合及自锁等作用显著,颗粒间还会形成面面接触,产生更大的接触面积,进而引起更大的范德华力。(2)绝大部分月壤粒径在微米级到毫米级之间,范德华力的迟滞效应可能会对颗粒间的相互作用产生影响,在这方面当前相关研究较少。(3)目前仍缺乏一种能够有效描述颗粒形状以及表面粗糙度对颗粒间范德华力影响的方法。(4)当前的范德华力计算理论大多是基于给定颗粒和表面形状进行推导的,对于不同的形状,其结果也不同,缺乏普适性的计算理论。

参考文献

- [1] CHE X C, NEMCHIN A, LIU D Y, *et al.* Age and composition of young basalts on the Moon, measured from samples returned by Chang'E-5[J]. *Science*, 2021, **374** (6569): 887-890
- [2] KROTIKOV V D, TROITSKI V S. Radio emission and nature of the moon[J]. *Soviet Physics Uspekhi*, 1964, **6**(6): 841-871
- [3] MANKA R H. Plasma and potential at the lunar surface[C]//Proceedings of the 6th Eslab Symposium. Held at Noordwijk: Springer, 1973
- [4] STUBBS T J, VONDRAK R R, FARRELL W M. A dynamic fountain model for lunar dust[J]. *Advances in Space Research*, 2006, **37**(1): 59-66
- [5] WALBRIDGE E. Lunar photoelectron layer[J]. *Journal of Geophysical Research*, 1973, **78**(19): 3668-3687
- [6] PERKO H A, NELSON J D, SADEH W Z. Surface cleanliness effect on lunar soil shear strength[J]. *Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering*, 2001, **127**(4): 371-383

- [7] HEYWOOD H. Particle size and shape distribution for lunar fines sample 12057, 72[J]. *Proceedings of Lunar and Planetary Science Conference*, 1971, **2**: 1989
- [8] MCKAY D S, HEIKEN G H, TAYLOR R M, *et al.* Apollo 14 soils: size distribution and particle types[J]. *Proceedings of Lunar and Planetary Science Conference*, 1972, **3**: 983
- [9] ZHENG Yongchun, OUYANG Ziyuan, WANG Shijie, *et al.* Physical and mechanical properties of lunar regolith[J]. *Journal of Mineralogy and Petrology*, 2004(4): 14-19 (郑永春, 欧阳自远, 王世杰, 等. 月壤的物理和机械性质[J]. *矿物岩石*, 2004(4): 14-19)
- [10] MITCHELL J K, HOUSTON W N, SCOTT R F, *et al.* Mechanical properties of lunar soil: density, porosity, cohesion and angle of internal friction[J]. *Proceedings Lunar and Planetary Science Conference*, 1972, **3**: 3235
- [11] LIU Guanqing. Discrete Element Methods of Fine Particle Dynamics in Presence of van der Waals and Electrostatic Forces[D]. Beijing: Tsinghua University, 2011 (柳冠青. 范德华力和静电力下的细颗粒离散动力学研究[D]. 北京: 清华大学, 2011)
- [12] DERJAGUIN B V, MULLER V M, TOPOROV Y P. Effect of contact deformations on the adhesion of particles[J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 1975, **53**(2): 314-326
- [13] RIMAI D S, DEMEJO L P, BOWEN R C. Surface-force-induced deformations of monodisperse polystyrene spheres on planar silicon substrates[J]. *Journal of Applied Physics*, 1990, **68**(12): 6234-6240
- [14] COOPER K, OHLER N, GUPTA A, *et al.* Analysis of contact interactions between a rough deformable colloid and a smooth substrate[J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2000, **222**(1): 63-74
- [15] BATURENKO D Y, CHERNOBEREZHSHKII Y M, LORENTSSON A V, *et al.* Effect of pH on the aggregation stability of microcrystalline cellulose dispersions in aqueous 0.1 M NaCl solutions[J]. *Colloid Journal*, 2003, **65**(6): 666-671
- [16] DELRIO F W, DE BOER M P, KNAPP J A, *et al.* The role of van der Waals forces in adhesion of micromachined surfaces[J]. *Nature Materials*, 2005, **4**(8): 629-634
- [17] HOANG T V, WU L, PAQUAY S, *et al.* A computational stochastic multiscale methodology for MEMS structures involving adhesive contact[J]. *Tribology International*, 2017, **110**: 401-425
- [18] ZHANG H W, WANG J B, YE H F, *et al.* Parametric variational principle and quadratic programming method for van der Waals force simulation of parallel and cross nanotubes[J]. *International Journal of Solids and Structures*, 2007, **44**(9): 2783-2801
- [19] LU W B, LIU B, WU J, *et al.* Continuum modeling of van der Waals interactions between carbon nanotube walls[J]. *Applied Physics Letters*, 2009, **94**(10): 101917
- [20] LEITE F L, BUENO C C, DA RÓZ A L, *et al.* Theoretical models for surface forces and adhesion and their measurement using atomic force microscopy[J]. *International Journal of Molecular Sciences*, 2012, **13**(10): 12773-12856
- [21] SONG Tianyou, CHNEG Peng, XU Jianing, *et al.* Inorganic Chemistry(4th ed)[M]. Beijing: Higher Education Press, 2019: 227-228 (宋天佑, 程鹏, 徐家宁, 等. 无机化学(第4版)[M]. 北京: 高等教育出版社, 2019: 227-228)
- [22] LENNARD-JONES J E. Cohesion[J]. *Proceedings of the Physical Society*, 1931, **43**(5): 461-482
- [23] EISENSCHITZ R, LONDON F. Über das verhältnis der van der waalsschen kräfte zu den homöopolaren bindungskräften[J]. *Zeitschrift für Physik*, 1930, **60**(7): 491-527
- [24] LONDON F. Zur theorie und systematik der molekularkräfte[J]. *Zeitschrift für Physik*, 1930, **63**(3): 245-279
- [25] WILSON A L, POPELIER P L A. Exponential relationships capturing atomistic short-range repulsion from the interacting quantum atoms (IQA) method[J]. *The Journal of Physical Chemistry A*, 2016, **120**(48): 9647-9659
- [26] BUCKINGHAM R A. The classical equation of state of gaseous helium, neon and argon[J]. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 1938, **168**(933): 264-283
- [27] WU X W, BROOKS B R. A double exponential potential for van der Waals interaction[J]. *AIP Advances*, 2019, **9**(6): 065304
- [28] 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
- [29] CASIMIR H B G, POLDER D. The influence of retardation on the London-van der Waals forces[J]. *Physical Review*, 1948, **73**: 360-372
- [30] CASIMIR H B G. On the attraction between two perfectly conducting plates[J]. *Proceedings of the Koninklijke Nederlandse Akademie van Wetenschappen*, 1948, **51**: 793
- [31] MIAO Bing. Casimir force[J]. *Acta Physica Sinica*, 2020, **69**(8): 080505 (苗兵. 卡西米尔力[J]. *物理学报*, 2020, **69**(8): 080505)
- [32] LIN W H, ZHAO Y P. Nonlinear behavior for nanoscale electrostatic actuators with Casimir force[J]. *Chaos, Solitons & Fractals*, 2005, **23**(5): 1777-1785
- [33] 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
- [34] DOWLATI S, REZAZADEH G. A new approach to the evaluation of Casimir and van der Waals forces in the transition region[J]. *Chinese Journal of Physics*, 2018, **56**(3): 1133-1146
- [35] HAMAKER H C. The London—van der Waals attraction between spherical particles[J]. *Physica*, 1937, **4**(10): 1058-1072
- [36] LIFSHITZ E M. The theory of molecular attractive forces between solids[J]. *Soviet Physics-JETP*, 1956, **2**: 329-349
- [37] ISRAELACHVILI J N. Intermolecular and Surface

- Forces[M]. 3rd ed. Cambridge: Elsevier, 2011
- [38] SOKOLOV I Y, HENDERSON G S, WICKS F J. The contrast mechanism for true atomic resolution by AFM in non-contact mode: quasi-non-contact mode?[J]. *Surface Science*, 1997, **381**(1): L558-L562
- [39] WANG H Y, HU M, LIU N, *et al.* Multi-scale analysis of AFM tip and surface interactions[J]. *Chemical Engineering Science*, 2007, **62**(13): 3589-3594
- [40] NINHAM B W, PARSEGAN V A. van der Waals Forces across Triple-Layer Films[J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1970, **52**(9): 4578-4587
- [41] FOSTER A S. Theoretical Modelling of Non-Contact Atomic Force Microscopy on Insulators[D]. London: University College London, 2000
- [42] JIANG M J, SHEN Z F, THORNTON C. Microscopic contact model of lunar regolith for high efficiency discrete element analyses[J]. *Computers and Geotechnics*, 2013, **54**: 104-116
- [43] ZHONG Shiyang. Study on Mechanical Behaviors of Lunar Soil Simulant and Footpad Dynamic Response in Soft Landing[D]. Hangzhou: Zhejiang University, 2012 (钟世英. 模拟月壤力学特性及软着陆足垫动力响应研究[D]. 杭州: 浙江大学, 2012)
- [44] CHANG C S, HICHER P Y. Model for granular materials with surface energy forces[J]. *Journal of Aerospace Engineering*, 2009, **22**(1): 43-52
- [45] JOHNSON K L, KENDALL K, ROBERTS A D. Surface energy and the contact of elastic solids[J]. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, and Physical Sciences*, 1971, **324**(1558): 301-313
- [46] 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
- [47] PARTELI E J R, SCHMIDT J, BLÜMEL C, *et al.* Attractive particle interaction forces and packing density of fine glass powders[J]. *Scientific Reports*, 2014, **4**(1): 6227
- [48] TABOR D. Surface forces and surface interactions[J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 1977, **58**(1): 2-13
- [49] RUMPF H. Particle Technology[M]. London: Springer Science & Business Media, 2012
- [50] RABINOVICH Y I, ADLER J J, ATA A, *et al.* Adhesion between nanoscale rough surfaces: I. Role of asperity geometry[J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2000, **232**(1): 10-16
- [51] BRAMBILLA S, SPECKART S, BROWN M J. Adhesion and aerodynamic forces for the resuspension of non-spherical particles in outdoor environments[J]. *Journal of Aerosol Science*, 2017, **112**: 52-67
- [52] FANG S J, HAPLEPETE S, CHEN W, *et al.* Analyzing atomic force microscopy images using spectral methods[J]. *Journal of Applied Physics*, 1997, **82**(12): 5891-5898
- [53] LAMARCHE C Q, LEADLEY S, LIU P Y, *et al.* Method of quantifying surface roughness for accurate adhesive force predictions[J]. *Chemical Engineering Science*, 2017, **158**: 140-153
- [54] YOU S M, WAN M P. Mathematical models for the van der Waals force and capillary force between a rough particle and surface[J]. *Langmuir*, 2013, **29**(29): 9104-9117
- [55] COOPER K, GUPTA A, BEAUDOIN S. Simulation of the adhesion of particles to surfaces[J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2001, **234**(2): 284-292
- [56] EICHENLAUB S, GELB A, BEAUDOIN S. Roughness models for particle adhesion[J]. *Journal of Colloid and Interface Science*, 2004, **280**(2): 289-298
- [57] JAISWAL R P, BEAUDOIN S P. Approximate scheme for calculating van der Waals interactions between finite cylindrical volume elements[J]. *Langmuir*, 2012, **28**(22): 8359-8370
- [58] SHEN Zhifu, GAO Feng, JIANG Mingjing, *et al.* An easy method to calculate van der Waals interaction between clay plate and spherical particle[J]. *Chinese Journal of Geotechnical Engineering*, 2021, **43**(12): 776-782 (申志福, 高峰, 蒋明镜, 等. 黏土片与球状颗粒间范德华作用的简便计算方法[J]. 岩土工程学报, 2021, **43**(12): 776-782)
- [59] PRIYE A, MARLOW W H. Computations of Lifshitz-van der Waals interaction energies between irregular particles and surfaces at all separations for resuspension modelling[J]. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2013, **46**(42): 425306
- [60] JAISWAL R P, KUMAR G, KILROY C M, *et al.* Modeling and validation of the van der Waals force during the adhesion of nanoscale objects to rough surfaces: a detailed description[J]. *Langmuir*, 2009, **25**(18): 10612-10623
- [61] MRNKA M. Random Gaussian rough surfaces for full-wave electromagnetic simulations[C]//Proceedings of 2017 Conference on Microwave Techniques. Brno: IEEE, 2017: 1-4
- [62] WILSON R, DINI D, VAN WACHEM B. The influence of surface roughness and adhesion on particle rolling[J]. *Powder Technology*, 2017, **312**: 321-333
- [63] RUSH M N, BRAMBILLA S, SPECKART S, *et al.* Glass-particle adhesion-force-distribution on clean (laboratory) and contaminated (outdoor) surfaces[J]. *Journal of Aerosol Science*, 2018, **123**: 231-244
- [64] PENG M, HAN X, XIAO G Z, *et al.* Spherical volume elements scheme for calculating van der Waals force between irregular particles and rough surfaces[J]. *Chinese Journal of Physics*, 2021, **72**: 645-654
- [65] PETEAN P G C, AGUIAR M L. Determining the adhesion force between particles and rough surfaces[J]. *Powder Technology*, 2015, **274**: 67-76
- [66] ZHENG Min, JIANG Mingjing, SHEN Zhifu. Discrete element numerical analysis of lunar soil with a simplified contact model[J]. *Rock and Soil Mechanics*, 2011, **32**(S1): 766-771 (郑敏, 蒋明镜, 申志福. 简化接触模型的月壤离散元数值分析[J]. 岩土力学, 2011, **32**(S1): 766-771)