

曲率的形状梯度和经典梯度: 微纳米曲面上的驱动力*

殷雅俊^{1,2}, 陈超¹, 吕存景¹, 郑泉水¹

(1. 清华大学 航天航空学院 工程力学系,北京 100084;

2. 南京工业大学 力学部,南京 211816)

(本刊编委郑泉水来稿)

摘要: 近期的实验和分子动力学模拟均表明:圆锥面上粘附液滴能自发地定向运动,且自发定向运动的方向与粘附面的亲水、疏水性质无关.针对这一重要现象,拟从曲面微纳米力学几何化的角度,提供一般性的理论解释.借助于粒子对势,研究了孤立粒子与微纳米硬曲面之间的相互作用,分析了粒子/硬曲面相互作用的几何学基础.可以证实:(a) 粒子/硬曲面的作用势均具有统一的曲率化形式,均可以统一地表达成曲面平均曲率和 Gauss 曲率的函数;(b) 基于曲率化的作用势,能够实现曲面微纳米力学的几何化;(c) 曲率与曲率的内蕴梯度构成卷曲空间上的驱动力;(d) 驱动力方向与曲面的亲水、疏水性质无关,解释了自发定向运动实验.

关键词: 微纳米曲面; 曲率; 形状梯度; 经典梯度; 驱动力

中图分类号: O302;O34;O484.2 **文献标志码:** A

DOI: 10.3879/j.issn.1000-0887.2011.05.001

引言

近期,清华大学郑泉水的研究组在实验中发现(以下简称 Zheng 研究组的实验):圆锥管外表面上的粘附液滴,能够沿母线自发地向粗端运动.出人预料的是,自发定向运动的方向与锥面的亲水、疏水性质无关.陈超^[1]以及 Lv^①和 Chen 等^[2]通过分子动力学模拟,确认了这一奇妙的实验现象.粘附液滴在圆锥上的自发定向运动本身并不是个新现象,但运动方向具有随亲水、疏水性质的不变性,过去却从未在文献中报道过.我们认为,这种不变性具有基本的重要性,值得深入探讨.我们的判断是,既然亲水、疏水性质决定不了自发定向运动的方向,那么就只剩下一个决定性的因素——空间弯曲.也就是说,空间弯曲可能是推动自发定向运动的力量之源.这个推断,与我们早期在生物膜力学和几何中发展的思想^[3-8]完全一致.因此,本文将结合前期的理论^[3-8],从硬曲面上微纳米力学几何化的角度,为上述实验现象提供一般性的理论解释.

微纳米尺度上,常见的效应之一是表面效应,常见的相互作用之一是表面作用.因此,微纳

* 收稿日期: 2010-11-18; 修订日期: 2011-03-14

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10872114;10672089;10832005;11072125)

作者简介: 殷雅俊(1964—),男,河南人,教授,博士,博士生导师(联系人. Tel:+86-10-62795536;
E-mail:yinyj@mail.tsinghua.edu.cn).

① Lv 即 Lü,因作者一直沿用 Lv

米力学的基本内容之一是表面力学。微纳米表面,很少是平坦的 Euclid 平面,大多是卷曲的 Riemann 曲面。于是可以说,表面微纳米力学,核心内容之一就是曲面微纳米力学。

曲面微纳米力学,受制于微分几何或二维的 Riemann 几何。从几何形式看,Riemann 几何可以划分为内蕴几何和外蕴几何。这里的“内蕴”,是“曲面内部”的意思,故内蕴几何主要涉及曲面的“面内”性质。在微分几何中,曲面的面内性质一般通过第一基本张量刻画。因此我们可以说,内蕴几何就是基于第一基本张量的几何。这里的“外蕴”是“曲面外部”的意思,故外蕴几何主要涉及曲面的“面外”性质。在微分几何中,曲面最基本的外蕴性质是其弯曲程度,曲面的弯曲程度一般通过第二基本张量来度量。因此我们可以说,外蕴几何主要是基于第二基本张量的几何。

类似地,曲面微纳米力学,也可以划分为内蕴力学和外蕴力学^[3-4]。借助内蕴几何就能描述的曲面力学,称为内蕴力学。内蕴力学的典型情形是曲面不变形而质点在曲面内运动。借助外蕴几何才能描述的曲面力学,称为外蕴力学。外蕴力学的典型情形是曲面本身有面外(尤其是法线方向)的运动或变形。

从物质形态看,凝聚态物质可以划分为硬物质和软物质,对应地,物质曲面可以划分为刚性的硬曲面(例如微纳米晶粒表面)和柔性的软曲面(例如细胞膜)。微纳米表面上的内蕴力学,一般是硬表面上的力学,即刚性曲面本身不变形,但表面上有物质运动——这类运动,受制于硬曲面的内蕴性质;而微纳米表面上的外蕴力学,一般是软表面上的力学,即柔性曲面不仅有面内的变形和运动,而且有面外的变形和运动——这类变形和运动,改变了软曲面的弯曲程度,受制于软曲面的外蕴性质。

Yin 等^[3-8]证实,微纳米软表面上的外蕴力学中,一个关键性的命题成立,即“空间卷曲诱发驱动力”。我们提出这样一般性的问题:微纳米硬表面上的内蕴力学中,这一命题是否仍然成立?答案是肯定的。这意味着,不论是在软表面还是在硬表面上,空间卷曲都会诱发驱动力。也就是说,“空间卷曲诱发驱动力”这一命题,是一个具有普遍性和统一性的命题,它所刻画的物理学图像,是微纳米表面上普遍存在的物理学实在,因而,有必要对其进行深入的分析 and 凝练,并提升成一般性的理论。这构成了本文的动机。

本文包括如下内容:首先,简要回顾微纳米软表面上的外蕴力学;其次,系统分析和综合微纳米硬表面上的内蕴力学;再者,针对自发定向运动现象和数值模拟,设计理想化试验,一方面检验内蕴力学理论基础的可靠性,另一方面也为自发定向运动现象提供理论解释;最后,分析内蕴力学和外蕴力学统一的几何学基础。

1 微纳米软表面上的外蕴力学

微纳米软表面上外蕴力学的典型之一,是生物膜力学。生物膜力学的核心内容,是其平衡理论。处于平衡态的生物膜,势能取极小值。于是,借助能量极小原理和外蕴几何,我们可以导出生物膜沿膜曲面法线方向的平衡微分方程^[3-8]:

$$\nabla \cdot (\nabla \phi_{,H} / 2 + \bar{\nabla} \phi_{,K}) + f = 0, \quad (1)$$

其中, $\phi = \phi(H, K)$ 是生物膜的自由能面密度,它取决于膜曲面的弯曲程度——平均曲率 H 和 Gauss 曲率 K 。 $\phi_{,H} = \partial \phi / \partial H$ 和 $\phi_{,K} = \partial \phi / \partial K$ 分别是自由能密度对平均曲率和 Gauss 曲率的偏导数, $f = f(H, K)$ 是标量函数。 ∇ 和 $\bar{\nabla}$ 是定义在表面上的微分算子^[3-8]:

$$\nabla(\dots) = g_i g^{ij} \frac{\partial(\dots)}{\partial u^j}, \quad \bar{\nabla}(\dots) = g_i \hat{L}^{ij} \frac{\partial(\dots)}{\partial u^j} \quad (i, j = 1, 2), \quad (2a, b)$$

(u^1, u^2) 是表面上的 Gauss 参数坐标, g_i 是协变基矢量, g^{ij} 是曲面第一基本张量 G 的逆变分

量, $\hat{L}^{\bar{y}}$ 是张量 \hat{L} 的逆变分量. 由于 \hat{L} 和第二基本张量 L 之间满足对偶关系 $\hat{L} \cdot L = KG$, 故 \hat{L} 称为 L 的对偶张量.

从式(1)看出, 生物膜的外蕴力学主要受到矢量微分不变量 ∇ 和 $\bar{\nabla}$ 的控制. 其中, ∇ 是表面上的经典梯度算子, $\bar{\nabla}$ 是表面上的形状梯度算子^[3-8]. 力学中, 梯度是最基本的概念之一: 势的梯度就是力. 例如, 电势梯度是电场力; 压力梯度是流动的驱动力; 温度梯度是热传导的驱动力; 浓度梯度是扩散的驱动力. 鉴于 ∇ 和 $\bar{\nabla}$ 在生物膜平衡方程中平等的地位, 如果说经典梯度 $\nabla(\dots)$ 是驱动力, 那么形状梯度 $\bar{\nabla}(\dots)$ 也必然是驱动力. 但从形式上看, 二者又有深刻的差别, 这在曲面主曲率坐标系下(图1), 可以清晰地显示出来:

$$\nabla(\dots) = \mathbf{g}^1 \frac{\partial(\dots)}{\partial u^1} + \mathbf{g}^2 \frac{\partial(\dots)}{\partial u^2}, \quad \bar{\nabla}(\dots) = c_2 \mathbf{g}^1 \frac{\partial(\dots)}{\partial u^1} + c_1 \mathbf{g}^2 \frac{\partial(\dots)}{\partial u^2}, \quad (3a, b)$$

其中, c_1 和 c_2 是两个主曲率, $\mathbf{g}^1 = \mathbf{g}_1/g_{11}$ 和 $\mathbf{g}^2 = \mathbf{g}_2/g_{22}$ 是两条主曲率线上的逆变基矢量, $g_{ij} = \mathbf{g}_i \cdot \mathbf{g}_j$ 是第一基本张量的协变分量. 很显然, 经典梯度 $\nabla(\dots)$ 是内蕴的微分不变量, 而形状梯度 $\bar{\nabla}(\dots)$ 是外蕴的微分不变量; 前者是由物质分布不均匀性诱发的驱动力, 而后者是由空间曲率诱发的驱动力; 前者主要是物质驱动力, 而后者主要是几何驱动力.

结合图1和式(3b), 我们可以更深刻地理解主曲率加权后的形状梯度的内涵: 环向方向的主曲率 c_2 加权了母线方向的驱动力, 而母线方向的主曲率 c_1 则加权了环向方向的驱动力.

注意到, 式(1)中的驱动力项 $\nabla\phi_{,H}$ 和 $\bar{\nabla}\phi_{,K}$ 可以进一步写成

$$\nabla\phi_{,H} = \phi_{,HH} \nabla H + \phi_{,HK} \nabla K, \quad \bar{\nabla}\phi_{,K} = \phi_{,KH} \bar{\nabla} H + \phi_{,KK} \bar{\nabla} K, \quad (4a, b)$$

其中 $\phi_{,HH} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial H^2}$, $\phi_{,HK} = \phi_{,KH} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial H \partial K}$, $\phi_{,KK} = \frac{\partial^2 \phi}{\partial K^2}$

均为曲率的函数, ∇H 和 $\bar{\nabla} H$ 分别是平均曲率的经典梯度和形状梯度, ∇K 和 $\bar{\nabla} K$ 分别是 Gauss 曲率的经典梯度和形状梯度. 式(4)清晰地诠释了命题“空间卷曲诱发驱动力”的具体含义: $\nabla\phi_{,H}$ 和 $\bar{\nabla}\phi_{,K}$ 都是卷曲空间上的驱动力, 其解析结构中, 都包括了两个基本部分, 一是曲率的函数项 $\phi_{,HH}$, $\phi_{,HK}$, $\phi_{,KH}$ 和 $\phi_{,KK}$, 二是曲率的梯度项 ∇H , ∇K , $\bar{\nabla} H$ 和 $\bar{\nabla} K$. 于是, 与上述命题对应, 我们有更为具体的陈述: 微纳米软曲面上, 曲率和曲率梯度(包括曲率的经典梯度 $\nabla(\dots)$ 和形状梯度 $\bar{\nabla}(\dots)$) 构成了驱动力的基本要素.

2 微纳米硬表面上的内蕴力学

本节尝试将上述命题和陈述由外蕴力学扩展到内蕴力学.

微纳米曲面与周边物质的相互作用, 在微观机制上, 大都表现为粒子/粒子(原子/原子或分子/分子)相互作用. 因此, 微纳米硬表面上的内蕴力学, 主要是粒子(原子或分子)与微纳米硬表面之间相互作用的力学. 作为最基本的情形, 我们考察一个孤立(自由)粒子与微纳米硬表面(表面上的原子群或分子群)之间的相互作用.

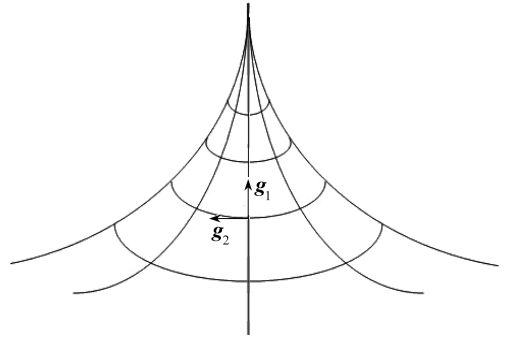


图1 主曲率坐标系

Fig. 1 The curvilinear coordinate system

2.1 粒子/硬曲面的 n 阶势

粒子对(例如原子对)的 van der Waals 相互作用,一般由 Lennard-Jones 势刻画:

$$u(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] = u_{12} - u_6, \quad (5)$$

其中,第1项 $u_{12}(r) = 4\varepsilon(\sigma/r)^{12}$ 是粒子对的斥力势,第2项 $u_6(r) = 4\varepsilon(\sigma/r)^6$ 是粒子对的引力势.为了描述方便,我们统一地将其表达成 n 阶势:

$$u_n(r) = 4\varepsilon \left(\frac{\sigma}{r} \right)^n. \quad (6)$$

需要说明的是,式(6)不仅仅代表 L-J 势中的斥力势或引力势,如果 n 取不同的值, $u_n(r)$ 可以刻画分子尺度的各种短程相互作用^[9].

设孤立粒子位于硬表面上点 O 正上方,到硬曲面的最短距离为 h (图2).由于短程作用力的有效作用长度小于 1 nm ,故 h 的取值范围为 $h < 1 \text{ nm}$.硬曲面一般是固体表面,不仅表层粒子而且内层粒子,都会与孤立粒子发生相互作用.但考虑到短程效应,我们只考虑孤立粒子与表层粒子之间的相互作用,且只计入表面上点 O 的 δ 邻域($\delta < 1 \text{ nm}$) S_δ 内的粒子与孤立粒子之间的相互作用.设 S_δ 内单位面积的粒子数为 ρ_s ,则微面积单元 dS 内的粒子数为 $\rho_s dS$.于是粒子/硬曲面的 n 阶势写成

$$U_n = \iint_{S_\delta} u_n(r) \rho_s dS. \quad (7)$$

设 ρ_s 为常数,于是由式(6)和式(7)得

$$U_n = 4\rho_s \varepsilon \sigma^n \iint_{S_\delta} \frac{1}{r^n} dS. \quad (8)$$

2.2 粒子/硬曲面曲率化的 n 阶势

注意到,以生物膜为代表的微纳米软表面上的外蕴力学中,生物膜的自由能面密度 $\phi = \phi(H, K)$ 是曲率的函数.自由能面密度的曲率化是式(4)成立的必要条件,也是“曲率和曲率梯度构成驱动力的基本要素”得以证实的理论基础.由此我们推测:欲将命题推广到微纳米硬表面上的内蕴力学中,必须实现粒子/硬曲面 n 阶势(即式(8))的曲率化.这一目标,在 $n = 12$ 和 $n = 6$ (即 L-J 势)时,已经达成^[1-2].此处从更一般的情形,再做更精细的归纳和更深入的分析.

以点 O 为坐标原点,建立局部 O - xyz 直角坐标系(图2).其中, z 轴指向硬曲面的法线方向, x - y 平面是硬曲面在点 O 的切平面, x 轴和 y 轴分别沿着点 O 主曲率线切线方向.在 S_δ 内,硬曲面的方程可在局部正交坐标系下表示为 $z = f(x, y)$.在点 O 将函数 $f(x, y)$ 展开成 Taylor 级数,考虑到短程作用,只展开到第2阶:

$$f(x, y) \approx f^0 + f_x^0 x + f_y^0 y + \frac{1}{2!} [f_{xx}^0 x^2 + 2f_{xy}^0 xy + f_{yy}^0 y^2], \quad (9)$$

其中

$$f^0 = f(0, 0), f_x^0 = \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x=0, y=0}, f_y^0 = \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{x=0, y=0}, f_{xx}^0 = \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x=0, y=0}, f_{xy}^0 = \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right|_{x=0, y=0}, f_{yy}^0 = \left. \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right|_{x=0, y=0}.$$

点 O 满足如下关系式:

$$f^0 = f(0, 0) = 0, f_x^0 = \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x=0, y=0} = 0, f_y^0 = \left. \frac{\partial f}{\partial y} \right|_{x=0, y=0} = 0. \quad (10)$$

由于 x 轴和 y 轴分别是点 O 主曲率线的切线,故有

$$f_{xy}^0 = \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} \right|_{x=0, y=0} = 0. \quad (11)$$

于是式(9)可以简化为

$$f(x, y) \approx \frac{1}{2}(f_{xx}^0 x^2 + f_{yy}^0 y^2). \quad (12)$$

式(12)的含义是,在 S_δ 内用二次曲面逼近硬曲面 $z = f(x, y)$ 的形状.

在局部正交坐标系下,孤立粒子的坐标为 $(0, 0, h)$,硬曲面上微面积单元 dS 内的点坐标为 (x, y, z) ,二者之间的距离 r 为

$$r^2 = x^2 + y^2 + [h - f(x, y)]^2 = x^2 + y^2 + h^2 \left[1 - \frac{f(x, y)}{h}\right]^2. \quad (13)$$

假设曲面满足限制条件 $|f(x, y)|/h < 1$,则有 $[f(x, y)/h]^2 \ll 1$.展开式(13)的右端项,并略去高阶项 $[f(x, y)/h]^2$,得

$$r^2 \approx x^2 + y^2 + h^2 - 2hf(x, y). \quad (14)$$

将式(12)代入式(14),得

$$r^2 \approx (1 - hf_{xx}^0)x^2 + (1 - hf_{yy}^0)y^2 + h^2. \quad (15)$$

将式(15)代入式(8),得

$$U_n \approx 4\rho_s \varepsilon \sigma^n \iint_{S_\delta} [(1 - hf_{xx}^0)x^2 + (1 - hf_{yy}^0)y^2 + h^2]^{-n/2} dS. \quad (16)$$

微面积元 dS 的表达式为

$$dS(x, y) = \sqrt{1 + f_x^2 + f_y^2} dx dy. \quad (17)$$

在 S_δ 内,我们要求硬曲面满足条件:

$$f_x^2 = \left[\frac{\partial f(x, y)}{\partial x}\right]^2 \ll 1, f_y^2 = \left[\frac{\partial f(x, y)}{\partial y}\right]^2 \ll 1.$$

略去高阶项,式(17)进一步简化为

$$dS(x, y) \approx dx dy. \quad (18)$$

式(16)和式(18)给出

$$U_n \approx 4\rho_s \varepsilon \sigma^n \iint_{\substack{|x| \leq \delta \\ |y| \leq \delta}} [(1 - hf_{xx}^0)x^2 + (1 - hf_{yy}^0)y^2 + h^2]^{-n/2} dx dy. \quad (19)$$

$n = 12$ 和 $n = 6$ 时, U_{12} 和 U_6 能够实现曲率化^[1-2].实际上,在 $n \geq 3$ 的一般情形下, U_n 都能够统一地表达成点 O 的曲率不变量的函数(见附录):

$$U_n \approx \frac{\bar{U}_n}{\sqrt{1 + 2hH + h^2K}}, \quad (20a)$$

其中, \bar{U}_n 是粒子/平面的 n 阶势, H 和 K 分别是点 O 的平均曲率和 Gauss 曲率.式(20a)定义了从平面到曲面的变换(或映射),实现了粒子的 n 阶平面势 \bar{U}_n 与 n 阶曲面势 U_n 之间一一对应的变换关系.其等价形式为

$$U_n/\bar{U}_n \approx 1/\sqrt{1 + 2hH + h^2K}, \quad (20b)$$

故 \bar{U}_n 与 U_n 之间的变换,可视为一种广义的比例变换(或比例映射),其中的比例因子只与曲面的曲率相关,而与作用势的指数 n 无关.故不论 n 值如何变化($n \geq 3$),比例因子均以不变的形式取决于曲率.这是个出人意料的结果,因为它违反了我们的直觉,直觉告诉我们:不同的 n

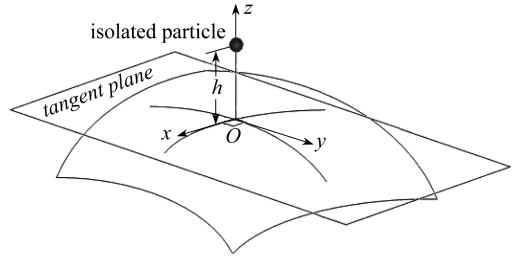


图2 孤立粒子与局坐正交坐标系下的曲面

Fig. 2 The isolated particle and the curved surface under the local orthogonal coordinate system

值,决定了不同相互作用的物理性质^[9],故作为决定性的因素, n 的影响应该无处不在.然而,比例因子却具有随 n 值变化的不变性!基于这种不变性,我们可以很有信心地说,式(20)适用于 $n \geq 3$ 的各种形式的相互作用^[9].

更出人意料的是,不同学科中,看似全然无关的变换,却有着相同的变换因子——式(20)中的变换因子 $(1 + 2hH + h^2K)$,不仅控制了物理量 \bar{U}_n 与 U_n 之间的变换,而且主导了薄壳理论以及平行映射中众多几何量之间的变换^[10-13]!这种相关性,是偶然的巧合,还是逻辑的必然?我们目前还没有答案.

由于曲率是 Riemann 几何中的核心概念,因此我们说,粒子/硬曲面之间的短程相互作用,都以统一且不变的形式,依赖于 Riemann 几何;或者说,主宰粒子/硬曲面相互作用的几何,是 Riemann 几何.

2.3 粒子/硬曲面曲率化的 L-J 势

如果取 $n = 12$ 和 $n = 6$,即粒子对的相互作用取 L-J 势(式(5)),便可得到文献[1-2]中粒子/硬曲面的 L-J 势.此时有 $U = U_{12} - U_6$.由式(20)和附录可知

$$U_{12} \approx \frac{\bar{U}_{12}}{\sqrt{1 + 2hH + h^2K}}, \quad \bar{U}_{12} = U_{12} \Big|_{\substack{H=0 \\ K=0}} \approx \frac{4\pi\rho_s\sigma^2\varepsilon}{5} \left(\frac{\sigma}{h}\right)^{10},$$

$$U_6 \approx \frac{\bar{U}_6}{\sqrt{1 + 2hH + h^2K}}, \quad \bar{U}_6 = U_6 \Big|_{\substack{H=0 \\ K=0}} \approx 2\pi\rho_s\sigma^2\varepsilon \left(\frac{\sigma}{h}\right)^4.$$

于是,粒子/硬曲面曲率化的 L-J 势为

$$U \approx \frac{\bar{U}}{\sqrt{1 + 2hH + h^2K}}, \quad (21)$$

其中 \bar{U} 是粒子/平面的 L-J 势:

$$\bar{U} = U \Big|_{\substack{H=0 \\ K=0}} = 2\pi\rho_s\sigma^2\varepsilon \left(\frac{\sigma}{h}\right)^4 \left[\frac{2}{5} \left(\frac{\sigma}{h}\right)^6 - 1 \right] = \bar{U}_{12} - \bar{U}_6. \quad (22)$$

很显然,粒子/平面相互作用是粒子/硬曲面相互作用的特例.粒子/平面的 L-J 势 \bar{U} ,包括了斥力势 \bar{U}_{12} 和引力势 \bar{U}_6 两部分;粒子/硬曲面的 L-J 势 U ,也包括了斥力势 U_{12} 和引力势 U_6 两部分.

曲面的曲率越大,对 U 的影响也越大;曲率越小,对 U 的影响也越小.如果曲率消失,则曲面退化为平面,粒子/硬曲面的 L-J 势 U ,便退化为粒子/平面的 L-J 势 \bar{U} .

注意到,点 O 的曲率,虽然只是“一点”的曲率,但反映的却是硬曲面在点 O 邻域内的弯曲程度,而作为短程作用势,曲率化的 L-J 势正好反映孤立粒子与该邻域内原子之间的相互作用.故曲率化的 L-J 势具有清晰的物理学图像.

2.4 硬曲面作用在孤立粒子上的驱动力

本节关注的焦点,是驱动力中的曲率和曲率梯度.因此,为突出主要因素,我们特意限定次要因素的影响,即假设高度 h 保持不变,限定孤立粒子只能在硬曲面的等高面内运动.此时,由式(21)知,粒子/硬曲面的 L-J 势 U 仅仅是曲率的函数,亦即

$$U = U(H, K). \quad (23)$$

若忽略高度 h 的影响,则当粒子沿着等高面移动 $d\mathbf{l}$ 时,作用势 U 的改变量为

$$dU = \nabla U \cdot d\mathbf{l}, \quad (24)$$

这里 $\nabla(\dots)$ 是硬表面上的经典梯度,由式(3a)定义.于是硬曲面作用在粒子上的驱动力为

$$\mathbf{F} = -\nabla U = - (U_{,H} \nabla H + U_{,K} \nabla K), \quad (25a)$$

其中, $U_{,H} = \partial U / \partial H$, $U_{,K} = \partial U / \partial K$ 均为曲率的函数. 将式(21)代入式(25a), 便可得到粒子上驱动力的具体表达式:

$$\mathbf{F} = \frac{\bar{U}h}{(1 + 2hH + h^2K)^{3/2}} \left(\nabla H + \frac{1}{2}h\nabla K \right). \quad (25b)$$

设粒子的质量为 m , 加速度为 \mathbf{a} , 则运动方程为 $m\mathbf{a} = \mathbf{F}$. 注意到, 曲率梯度矢量 ∇H 和 ∇K 都位于硬曲面的切平面内, 因此, 驱动力 \mathbf{F} 和加速度 \mathbf{a} , 也是切平面内的矢量.

式(25b)表明, 两个因素决定了驱动力 \mathbf{F} 的方向: 因素之一是曲率梯度. 由几何知识可知: ∇H 总是指向平均曲率增长最快的方向, ∇K 总是指向 Gauss 曲率增长最快的方向. 因此可以统一地说, $(\nabla H + h\nabla K/2)$ 总是指向曲率递增的方向; 因素之二是粒子/平面的 L-J 势 \bar{U} : 如果 $\bar{U} > 0$, 则 \mathbf{F} 的方向与 $(\nabla H + h\nabla K/2)$ 的方向一致, 指向曲率递增的方向; 如果 $\bar{U} < 0$, 则 \mathbf{F} 的方向与 $(\nabla H + h\nabla K/2)$ 的方向相反, 指向曲率递减的方向. 特别要说明的是, 这里的“递增”或“递减”的含义, 是指曲率代数值的增加或减小.

至此, 我们可以回答引言中的问题: 软表面上的命题和陈述的确可以推广到硬表面上——在微纳米硬表面上的内蕴力学中, 空间弯曲也会诱发驱动力, 而且驱动力的源泉, 也是曲率和曲率梯度.

2.5 从微纳米尺度向宏观尺度的推广

与微纳米软表面上的外蕴力学^[3,4]类似, 微纳米硬表面上的内蕴力学, 也可以从微纳米尺度推广到宏观尺度. 确切地说, 粒子/硬曲面作用势 $U(H, K)$ 以及粒子驱动力 \mathbf{F} 的适用范围, 也可以由微纳米曲面推广到宏观曲面, 理由如下所述.

首先, “微纳米曲面”并非理论基础成立的必要条件. van der Waals 之类的短程力, 作用范围均在纳米尺度以下(即 $h < 1 \text{ nm}$, $\delta < 1 \text{ nm}$). 然而, 在曲率化作用势和驱动力的推导过程中, 硬曲面的尺度并没有绝对地限定. 我们之所以再三强调“微纳米曲面”, 是因为只有在尺度足够小的曲面上, 曲率才能足够高, 曲率梯度才能足够大, van der Waals 效应才能足够显著. 但是, 这并不意味着, 曲率化作用势和驱动力只适用于微纳米曲面.

其次, 曲率化作用势和驱动力, 自然而然地包含了尺度效应. 尺度效应是力学中普遍存在的效应之一. 这一效应限定了 Euclid 空间中力学理论的适用范围: 大尺度的理论不能适用于小尺度. 然而, 作用势和驱动力一旦实现曲率化, 我们研究的力学, 就不再是 Euclid 空间中的力学, 而是 Riemann 空间中的力学. Riemann 空间中的力学, 曲率是决定性的, 而曲率的大小, 正好反映了曲面尺度的大小. 因此, 曲率化作用势和驱动力中, 尽管没有人为地引入特征尺度参数, 但它们仍然能够自然地刻画尺度效应, 自然地实现大、小尺度之间的过渡和衔接.

最后, 曲率势与平面势具有统一性. 由式(21)可知, 当曲面曲率趋于 0 时, 曲率化作用势退化为粒子的平面势. 我们知道, 曲率趋于 0, 曲率半径便趋于 ∞ , 即曲面的特征尺度参数趋于 ∞ . 曲面势与平面势的统一性清晰地表明, 微纳米硬表面上的内蕴力学, 确实是微纳米尺度和宏观尺度统一的理论.

3 圆锥面上的理想化试验

曲率化作用势(式(21))是微纳米硬表面上内蕴力学的理论基础. 问题是, 这个理论基础可靠吗? 能够用来解释 Zheng 研究组的实验现象吗? 本节将尝试通过理想化实验回答这些问题.

本节设计的理想化试验, 是孤立粒子与圆锥面的相互作用. 圆锥面是最简单的曲面之一. 以最简单的曲面作为理想化试验的载体, 是基于如下考虑: (a) 曲面越简单, 越能排除干扰因素, 越容易直接地揭示出复杂现象内在的因果关系; (b) 在所有的曲面中, 球面、圆柱面和圆锥

面最为简单。然而,球面和圆柱面均为常曲率曲面,曲率梯度为0,不符合试验目的,故应排除。于是,圆锥面就成为顺理成章的选择;(c)人们从圆锥形粘附面上液滴的定向运动实验(例如Zheng研究组的实验)中,观测到了丰富的现象^[14-16],从而为圆锥面上的理想化试验,提供了定性参照;(d)圆锥面上既有的数值实验数据^[1-2],为圆锥面上的理想化试验,提供了定量参照。

圆锥面的 Gauss 曲率为0($K = 0$),于是孤立粒子/圆锥面的 L-J 势,可以从式(21)退化为

$$U \approx \frac{\bar{U}}{\sqrt{1 + 2hH}}. \quad (26)$$

圆锥面作用在孤立粒子上的驱动力(式(25b))退化为

$$\mathbf{F} = \frac{\bar{U}h}{(1 + 2hH)^{3/2}} \nabla H. \quad (27)$$

设 2θ 是圆锥面的顶角, s 是以圆锥顶点为原点、以母线为坐标轴的坐标, \mathbf{i}_s 是坐标轴上的单位基矢量(图3)。当孤立粒子位于圆锥外部时(图3a),有

$$2H = \frac{1}{s \tan \theta} > 0, \quad \nabla H = -\frac{1}{2s^2 \tan \theta} \mathbf{i}_s = -2H^2 \mathbf{i}_s \tan \theta. \quad (28)$$

式(27)和式(28)给了出圆锥外部的孤立粒子受到的驱动力 \mathbf{F}_{out} :

$$\mathbf{F}_{\text{out}} = -\frac{2\bar{U}hH^2 \tan \theta}{(1 + 2hH)^{3/2}} \mathbf{i}_s. \quad (29)$$

当孤立粒子位于圆锥内部时(图3(b)),有

$$2H = -\frac{1}{s \tan \theta} < 0, \quad \nabla H = \frac{1}{2s^2 \tan \theta} \mathbf{i}_s = 2H^2 \mathbf{i}_s \tan \theta. \quad (30)$$

式(27)、(30)给出了圆锥内部孤立粒子受到的驱动力 \mathbf{F}_{in} :

$$\mathbf{F}_{\text{in}} = \frac{2\bar{U}hH^2 \tan \theta}{(1 + 2hH)^{3/2}} \mathbf{i}_s. \quad (31)$$

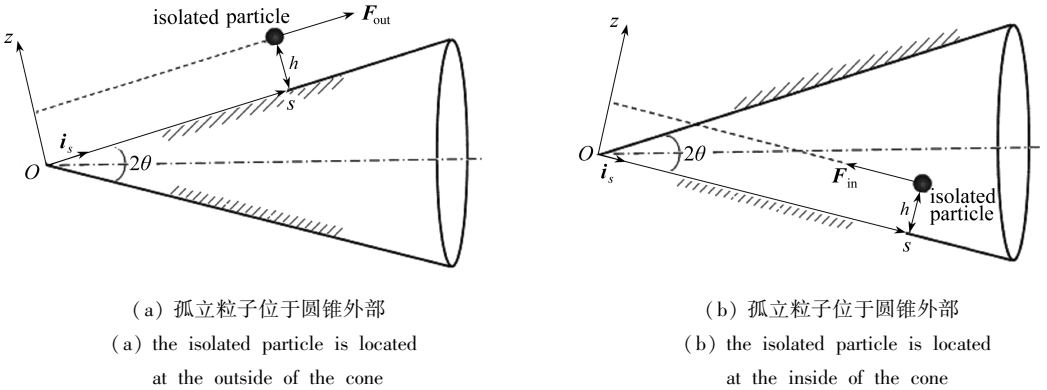
基于式(29)和式(31)中驱动力的方向,就可以勾画孤立粒子在圆锥面上的运动图像。由式(22)、(29)、(31)可知,物理参数 σ 和几何参数 h 共同决定了驱动力的方向。一般情况下,距离 h 的取值,应使孤立粒子的引力势大于斥力势,即应满足条件 $\bar{U} < 0$ 或

$$\left[\frac{2}{5} \left(\frac{\sigma}{h} \right)^6 - 1 \right] < 0. \quad (32)$$

此时,孤立粒子的运动遵循如下规律:在圆锥外部,粒子上的驱动力 \mathbf{F}_{out} 与单位基矢量 \mathbf{i}_s 的正方向一致(见式(29)和图3(a)),从而驱使粒子自发地由圆锥顶点向端点方向运动;在圆锥内部,孤立粒子上的驱动力 \mathbf{F}_{in} 与单位基矢量 \mathbf{i}_s 的正方向相反(见式(31)和图3(b)),驱使粒子自发地由圆锥端点向顶点方向运动。

注意到,在外部,从圆锥顶点到端点,坐标 s 单调递增($0 \rightarrow +\infty$),平均曲率 H 单调递减($+\infty \rightarrow 0$)(见式(28));在内部,从圆锥端点到顶点,坐标 s 单调递减($+\infty \rightarrow 0$),平均曲率 H 也单调递减($0 \rightarrow -\infty$)(见式(30)).因此,孤立粒子的运动图像,可以统一地描述如下:圆锥面上的孤立粒子,总是沿母线向平均曲率代数值减小的方向运动。确切地说,在外部,粒子总是向比较平坦的端点方向运动;在内部,粒子总是向高度卷曲的顶点方向运动。

有必要再深入分析一下驱动力 \mathbf{F}_{out} 和 \mathbf{F}_{in} 。圆锥面的母线和环线是主曲率线。母线的主曲率为 $c_s = 0$,环线的主曲率为 c_φ ,于是平均曲率为 $H = (c_s + c_\varphi)/2 = c_\varphi/2$ 。结合式(27)、式(29)和式(31)可知,驱动力 \mathbf{F}_{out} 和 \mathbf{F}_{in} 的核心组成部分,是环线上的主曲率为 c_φ 及其梯度 ∇c_φ 。换言之,环线的主曲率 c_φ 及其梯度 ∇c_φ 驱动了孤立粒子沿母线方向的运动。



(a) 孤立粒子位于圆锥外部
(a) the isolated particle is located at the outside of the cone
(b) 孤立粒子位于圆锥外部
(b) the isolated particle is located at the inside of the cone

图3 圆锥面作用在孤立粒子上的驱动力

Fig. 3 The driving force acted on the isolated particle by the conical surface

理想化运动图像,与圆锥面上液滴定向运动的宏观实验现象,定性地完全一致:在毫米级直径的圆锥状导线外表面上,硅油滴自发地向直径较大曲率较低的方向运动^[14];在毫米级直径的圆锥状玻璃管内,水柱自发地向直径较小的顶点方向运动^[15];在微米级直径蜘蛛丝的圆锥段外表面上,水滴自发地向直径较大的方向聚集^[16]。

特别要强调的是,理想化运动图像不仅与 Zheng 研究组的实验结果定性地完全一致,而且能够从理论上成功地解释自发定向运动方向随亲水、疏水性质的不变性:从理论上讲,亲水、疏水性质,主要取决于相互作用对势中的物理参数 ε 的数值.由式(22)、(29)、(31)可知,由于 ε 总是取正值,故其数值的大小并不影响驱动力的方向.也就是说,圆锥面上粘附液滴的自发定向运动方向,的确与亲水、疏水性质无关。

理想化运动图像,与碳纳米圆锥管上的数值试验结果^[1-2],定量地完全一致.这些文献通过分子动力学数值试验,计算了氧原子与碳纳米锥管之间的相互作用势 U .结果表明:数值试验曲线与式(26)几乎完美地重合。

综上所述,我们可以说,至少在圆锥面上,粒子/硬曲面曲率化作用势预测的理想化运动图像,与宏观物理实验定性地一致,与纳观数值实验定量地一致.这种一致性在一定程度上证实:粒子/硬曲面曲率化作用势,精确度是可信的,理论基础是可靠的。

需要说明的是,理想化运动图像,虽然是基于粒子/平面的 L-J 势 \bar{U} ,但却具有普遍性.也就是说,用其它形式的粒子/平面势 \bar{U}_n 替换 L-J 势 \bar{U} ,仍然能够得到类似的结论:如果用 $\bar{U}_n < 0$ 的引力势替代 \bar{U} ,则粒子的运动图像与上述理想化运动图像完全一致;如果用 $\bar{U}_n > 0$ 的斥力势替代 \bar{U} ,则粒子的运动图像与上述理想化运动图像相近,差别是粒子的运动方向相反。

4 讨论与结论

微纳米力学作为力学新的分支,具有丰富的内涵和广阔外延,其几何基础不是单一的,而是多样性的.就曲面微纳米力学而言,Riemann 几何只是统一的几何学基础之一,理由如下:曲面是嵌入在三维 Euclid 空间中的二维 Riemann 空间,因此, Euclid 几何和 Riemann 几何,都可以作为曲面微纳米力学的几何学基础.但比较而言, Riemann 几何更符合曲面空间形式的“本性”,更容易展现曲面微纳米力学的逻辑简单性.本文中的曲面微纳米力学(不论是外蕴力学,还是内蕴力学)都是基于 Riemann 几何的力学。

“空间卷曲诱发驱动力”,是具有普遍性意义的命题.其普遍性体现在两个方面:一方面,

形状梯度是驱动力,其定义中包含了空间卷曲程度的几何量——主曲率(见式(3)),而形状梯度存在的普遍性,在外蕴力学中已经得到实证^[3];另一方面,只要自由能密度或作用势能够曲率化,即能够写成 $\phi = \phi(H, K)$ 的形式,那么,式(4)和式(25)就普遍成立。命题的普遍性一旦确证,便可上升为一般性理论,用来诠释微纳米表面上的力学现象。

如果说,我们前期的研究^[3-8],奠定了“空间卷曲诱发驱动力”命题的理论基础,那么,本文则从短程相互作用出发,给予了命题具体的阐释。特别要强调的是,短程相互作用是微纳米尺度上普遍的物理学实在,因此可以说,本文实证了该命题在微纳米尺度上的普遍适用性。

如果说,“空间卷曲诱发驱动力”只是一个存在性命题,那么,“曲率和曲率梯度是驱动力的基本要素”则是一个构造性陈述。陈述将命题具体化了——它清晰地定位了驱动力的两个来源:一是曲率,二是曲率梯度;前者是空间的弯曲程度,后者是空间曲率的不均匀程度。二者虽然都是几何的量,但却构成了物理的力。

力学与几何,是一个硬币的两面。两个侧面不是互相独立的,而是相互关联、互为因果的:一方面,粒子对的相互作用,在卷曲空间中可以借助几何量实现几何化;另一方面,几何量在卷曲空间中“组装”成了驱动力。在微纳米尺度上,几何与力浑然一体,不可分割。由此,我们对“力”这一最基本的力学概念的理解,拓展了、深化了。

核心力学量的曲率化,提供了微纳米力学几何化的途径。前辈力学家武际可教授曾反复强调:“微纳米力学和跨尺度研究,要注重几何概念的突破,要引入几何学,实现几何化。”曲面微纳米力学的几何化,的确实践了他的观点。微纳米力学几何化的路径,可能并不唯一,但曲面微纳米力学(不论是内蕴力学还是外蕴力学)都可以通过曲率化,实现几何化。由此我们推测:几何化的有效途径之一,就是曲率化。

需要强调的是,曲面微纳米力学,虽然可以实现几何化,但其物理基础仍然是粒子对的相互作用;曲率和曲率梯度作为几何化的驱动力,虽然是逻辑的必然结果,但其物理本质仍然是物质的作用力。还要强调的是,与软曲面上的外蕴力学不同,硬曲面上的内蕴力学中,只有经典梯度 $\nabla(\dots)$ (式(25)),没有形状梯度 $\bar{\nabla}(\dots)$ 。这是因为,形状梯度 $\bar{\nabla}(\dots)$ 只有在软曲面发生外蕴的形状改变时才会出现^[3-8],而硬曲面是刚性的,其形状是不会改变的。这一差异,强化了文献[3-4]中的看法:Riemann流形上,借助既有的几何学概念,内蕴力学就可以得到刻画;但只有在定义了形状梯度 $\bar{\nabla}(\dots)$ 之后,外蕴力学才能方便地得到描述。换言之,内蕴力学只需要引入几何;而外蕴力学不仅要引入几何,而且要拓展几何,要发展诸如形状梯度这样的几何学概念。

我们的曲面微纳米力学探索,也印证了前辈力学家钱伟长教授的观点。他对Göttingen学派的学术风格有这样的论述^[17]:“Göttingen学派是应用数学的倡导者,他们既有深厚的数学根底,又有对物理本质的深刻理解。他们都认为物理本质是主要的,但在数学方法的使用上却从不吝啬,且力求将数学用在刀刃上,要用得漂亮,要用得朴素简洁。有时为了解决一个力学问题,他们不惜跳进数学的海洋,从中寻求最合适的数学工具,必要时甚至创造新的数学工具。”他的观点,对于微纳米力学的探索者,具有深刻而又恒久的启示。

附 录

粒子/硬曲面 n 阶势的曲率化

短程作用下,硬曲面上点 O 邻域 S_0 之外的粒子对作用势的影响可以忽略不计,但考虑到数学处理上的方便,我们将积分域扩展到 S_0 之外,于是式(19)变为

$$U_n \approx 4\rho_s \varepsilon \sigma^n \iint_{\substack{|x| \leq \infty \\ |y| \leq \infty}} [(1 - hf_{xx}^0)x^2 + (1 - hf_{yy}^0)y^2 + h^2]^{-n/2} dx dy. \quad (A1)$$

令

$$a = \sqrt{1 - hf_{xx}^0}, \quad b = \sqrt{1 - hf_{yy}^0}, \quad c = \sqrt{b^2 y^2 + h^2}, \quad (A2)$$

则有

$$U_n \approx 4\rho_s \varepsilon \sigma^n \int_{-\infty}^{+\infty} dy \int_{-\infty}^{+\infty} (a^2 x^2 + c^2)^{-n/2} dx = 4\rho_s \varepsilon \sigma^n \int_{-\infty}^{+\infty} c^{-n} dy \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(\frac{a}{c} x \right)^2 + 1 \right]^{-n/2} dx = \\ 16\rho_s \varepsilon \sigma^n \int_0^{+\infty} c^{-n} dy \int_0^{+\infty} \left[\left(\frac{a}{c} x \right)^2 + 1 \right]^{-n/2} dx. \quad (A3)$$

令

$$\frac{a}{c} x = \tan \alpha, \quad \alpha \in \left[0, \frac{\pi}{2} \right], \quad (A4)$$

得到

$$\int_0^{+\infty} \left[\left(\frac{a}{c} x \right)^2 + 1 \right]^{-n/2} dx = \frac{c}{a} \int_0^{\pi/2} \cos^{n-2} \alpha d\alpha. \quad (A5)$$

于是式(A3)化为

$$U_n \approx 16\rho_s \varepsilon \sigma^n \frac{1}{a} \int_0^{+\infty} c^{-(n-1)} dy \int_0^{\pi/2} \cos^{n-2} \alpha d\alpha, \quad (A6)$$

又有

$$\int_0^{+\infty} c^{-(n-1)} dy = \int_0^{+\infty} (b^2 y^2 + h^2)^{-(n-1)/2} dy = \frac{1}{h^{n-1}} \int_0^{+\infty} \left[\left(\frac{b}{h} y \right)^2 + 1 \right]^{-(n-1)/2} dy. \quad (A7)$$

令

$$\frac{b}{h} y = \tan \beta, \quad \beta \in \left[0, \frac{\pi}{2} \right], \quad (A8)$$

则有

$$\int_0^{+\infty} \left[\left(\frac{b}{h} y \right)^2 + 1 \right]^{-(n-1)/2} dy = \frac{h}{b} \int_0^{\pi/2} \cos^{n-3} \beta d\beta. \quad (A9)$$

将式(A9)、(A7)代入式(A6),得

$$U_n \approx 16\rho_s \sigma^2 \varepsilon \left(\frac{\sigma}{h} \right)^{n-2} I_{n-2} I_{n-3} \frac{1}{ab}, \quad (A10)$$

其中

$$I_{n-2} = \int_0^{\pi/2} \cos^{n-2} \alpha d\alpha, \quad I_{n-3} = \int_0^{\pi/2} \cos^{n-3} \beta d\beta, \quad (A11)$$

I_n 可以表达为

$$I_n = \int_0^{\pi/2} \cos^n \varphi d\varphi = \begin{cases} \frac{n-1}{n} \cdot \frac{n-3}{n-2} \cdot \dots \cdot \frac{1}{2} \cdot \frac{\pi}{2} & (n \text{ 为偶数}), \\ \frac{n-1}{n} \cdot \frac{n-3}{n-2} \cdot \dots \cdot \frac{2}{3} \cdot 1 & (n \text{ 为奇数}). \end{cases} \quad (A12)$$

再由式(A2)可得

$$ab = \sqrt{1 - hf_{xx}^0} \sqrt{1 - hf_{yy}^0} = \sqrt{1 - h(f_{xx}^0 + f_{yy}^0) + h^2 f_{xx}^0 f_{yy}^0}. \quad (A13)$$

在微分几何中,点 O 的平均曲率 H 和 Gauss 曲率 K 的一般表达式为

$$2H = - \frac{(1 + f_x^0) f_{yy}^0 - 2f_x^0 f_y^0 f_{xy}^0 + (1 + f_y^0) f_{xx}^0}{(1 + f_x^0 + f_y^0)^{3/2}}, \quad K = \frac{f_{xx}^0 f_{yy}^0 - f_{xy}^0{}^2}{(1 + f_x^0 + f_y^0)^2}. \quad (A14)$$

在图2所示的主坐标系下,式(10)和式(11)成立,于是式(A14)简化为

$$2H = - (f_{xx}^0 + f_{yy}^0), \quad K = f_{xx}^0 f_{yy}^0. \quad (A15)$$

由式(A13)、(A15)、(A10)化为

$$U_n \approx 16\rho_s\sigma^2\varepsilon\left(\frac{\sigma}{h}\right)^{n-2}\frac{I_{n-2}I_{n-3}}{\sqrt{1+2hH+h^2K}}. \quad (\text{A16a})$$

式(A16a)就是粒子/硬曲面曲率化的 n 阶势. 令

$$\tilde{U}_n = U_n \Big|_{\substack{H=0 \\ K=0}} = 16\rho_s\sigma^2\varepsilon\left(\frac{\sigma}{h}\right)^{n-2}I_{n-2}I_{n-3} = \frac{8\pi\rho_s\sigma^2\varepsilon}{n-2}\left(\frac{\sigma}{h}\right)^{n-2}, \quad (\text{A17})$$

这里 \tilde{U}_n 是粒子/平面的 n 阶势. 式(A16a)可被变换为

$$U_n \approx \frac{\tilde{U}_n}{\sqrt{1+2hH+h^2K}}. \quad (\text{A16b})$$

下面简要讨论曲率化 n 阶势成立的必要条件. 由式(A12)和式(A16a)可知, I_{n-3} 项要求 $n \geq 3$. 于是, 必要条件之一, 就是 $n \geq 3$. 指数 n 越大, 短程相互作用越弱, 曲率化 n 阶势的精度越高; 必要条件之二, 来自式(A2)和式(A10)对参数 a 和 b 的限制, 即 $1 - hf_{xx}^0 > 0$ 和 $1 - hf_{yy}^0 > 0$. 这个必要条件, 排除了 $ab = \sqrt{1+2hH+h^2K} = 0$ 的可能性, 避免了 n 阶势的奇异性; 必要条件之三, 来自 2.2 节的推导, 即 $h > |f(x,y)|, [\partial f(x,y)/\partial x]^2 \ll 1, [\partial f(x,y)/\partial y]^2 \ll 1$. 这些必要条件, 限定了曲率化 n 阶势的适用范围.

参考文献:

- [1] 陈超. 水在碳纳米表面上的湿润和滑移性质的研究[D]. 清华大学硕士论文. 北京: 清华大学, 2010. (CHEN Chao. Study on the wetting and slippy property of water on carbon nano surface [D]. M Sc dissertation, Beijing: Tsinghua University, 2010.)
- [2] LV Cun-jing, CHEN Chao, YIN Ya-jun, ZHENG Quan-shui. Surface curvature-induced directional movement of water droplets[J]. arXiv: 1011.3689v1, <http://arxiv.org/abs/1011.3689>, 2010.
- [3] YIN Ya-jun, WU Ji-ye. Shaper gradient: a driving force induced by space curvatures[J]. *International Journal of Nonlinear Sciences and Numerical Simulations*, 2010, **11**(4): 259-267.
- [4] 殷雅俊. 生物膜力学与几何中的对称[J]. 力学与实践, 2008, **30**(2): 1-10. (YIN Ya-jun. Symmetries in the mechanics and geometry for biomembranes[J]. *Mechanics in Engineering*, 2008, **30**(2): 1-10. (in Chinese))
- [5] YIN Ya-jun, CHEN Yan-qiu, NI Dong, SHI Hui-ji, FAN Qin-shan. Shape equations and curvature bifurcations induced by inhomogeneous rigidities in cell membranes[J]. *Journal of Biomechanics*, 2005, **38**(7): 1433-1440.
- [6] YIN Ya-jun, YIN Jie, LV Cun-jing. Equilibrium theory in 2D Riemann manifold for heterogeneous biomembranes with arbitrary variational modes[J]. *Journal of Geometry and Physics*, 2008, **58**(1): 122-132.
- [7] YIN Ya-jun, YIN Jie, NI Dong. General mathematical frame for open or closed biomembranes (part I): equilibrium theory and geometrically constraint equation[J]. *Journal of Mathematical Biology*, 2005, **51**(4): 403-413.
- [8] YIN Ya-jun, LV Cun-jing. Equilibrium theory and geometrical constraint equation for two-component lipid bilayer vesicles[J]. *J Biol Phys*, 2008, **34**(6): 591-610.
- [9] Israelachvili J N. *Intermolecular and Surface Forces*[M]. 2nd ed. London: Academic Press, 1991: 27-28.
- [10] 黄克智, 夏之熙, 薛明德, 任文敏. 板壳理论[M]. 北京: 清华大学出版社, 1987: 152-154. (HUANG Ke-zhi, XIA Zhi-xi, XUE Ming-de, REN Wen-min. *The Theory of Plates and Shells* [M]. Beijing: Tsinghua University Press, 1987: 152-154. (in Chinese))
- [11] 武际可, 王敏中, 王炜. 弹性力学引论[M]. 北京: 北京大学出版社, 2001: 255-257. (WU Ji-ke,

- WANG Min-zhong, WANG Wei. *Introductions to Elasticity*[M]. Beijing: Beijing University Press, 2001: 255-257. (in Chinese))
- [12] 黄克智, 薛明德, 陆明万. 张量分析[M]. 第二版. 北京:清华大学出版社, 2003: 221-223. (HUANG Ke-zhi, XUE Ming-de, LU Ming-wan. *Tensor Analysis*[M]. 2nd ed. Beijing: Tsinghua University Press, 2003: 221-223. (in Chinese))
- [13] YIN Ya-jun, WU Ji-ye, FAN Qin-shan, HUANG Ke-zhi. Invariants for parallel mapping[J]. *Tsinghua Science & Technology*, 2009, **14**(5): 646-654.
- [14] Lorenceau E, Quere D. Drops on a conical wire[J]. *J Fluid Mech*, 2004, **510**: 29-45.
- [15] LIU Jian-lin, XIA Re, LI Bing-wei, FENG Xi-qiao. Directional motion of drops in a conical tube or on a conical fiber[J]. *Chin Phys Lett*, 2007, **24**(11): 3210-3213.
- [16] ZHENG Yong-mei, BAI Hao, HUANG Zhong-bing, TIAN Xue-lin, NIE Fu-qiang, ZHAO Yong, ZHAI Jin, JIANG Lei. Directional water collection on wetted spider silk[J]. *Nature*, 2010, **463**(4): 640-643.
- [17] 钱伟长. 钱伟长文选[M]. 第四卷. 上海:上海大学出版社, 2004, 69. (CHEIN Wei-zang. *Selected Works of Chien Wei-zang*[M]. Vol. 4. Shanghai: Shanghai University Press, 2004, 69. (in Chinese))

Shape Gradient and Classical Gradient of Curvatures: Driving Forces on Micro/Nano Curved Surfaces

YIN Ya-jun^{1,2}, CHEN Chao¹, LV* Cun-jing¹, ZHENG Quan-shui¹

(1. *Department of Engineering Mechanics, School of Aerospace, Tsinghua University, Beijing 100084, P. R. China;*

2. *Division of Mechanics, Nanjing University of Technology, Nanjing 211816, P. R. China*)

Abstract: Recent experiment and molecule dynamics simulation showed that adhesion droplet on conical surface could move spontaneously and directionally. Besides, this spontaneous and directional motion was independent of the hydrophilicity and hydrophobicity of the conical surface. Aimed at this important phenomenon, a general theoretical explanation was provided from the viewpoint of the geometrization of micro/nano mechanics on curved surfaces. Based on the pair potentials of particles, the interactions between an isolated particle and a micro/nano hard-curved-surface were studied, and the geometric foundation for the interactions between the particle and the hard-curved-surface were analyzed. The following results are derived: (a) The potential of the particle/hard-curved-surface is of the unified curvature-form (i. e. the potential is always a unified function of the mean curvature and Gauss curvature of the curved surface); (b) On the basis of the curvature-based potential, the geometrization of the micro/nano mechanics on hard-curved-surfaces can be realized; (c) Curvatures and the intrinsic gradients of curvatures form the driving forces on curved spaces; (d) The direction of the driving force is independent of the hydrophilicity and hydrophobicity of the curved surface, which explains the experimental phenomenon of spontaneous and directional motion.

Key words: micro/nano curved surfaces; curvatures; shape gradient; classical gradient; driving forces

* LV 即 LÜ,因作者一直沿用 LV