

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

Биологические микроструктуры с высокой адгезией и трением. Численный подход

В.Л. Попов, А.Э. Филиппов, С.Н. Горб

В процессе эволюции многие классы живых существ развили высокоэффективные адгезивные устройства для сцепления с твёрдыми поверхностями, имеющими различную физическую природу и топографию. Знаменитым примером является лапа геккона, однако подобные структуры находят у животных различных размеров и эволюционных линий. В последние десятилетия подобные адгезивные структуры стали объектом интенсивного теоретического и экспериментального исследования, в том числе с целью развития технологий производства искусственных поверхностей с подобными адгезивными свойствами. Представлен обзор исследований биологических структур с высокой адгезией и трением. Особое внимание уделено исследованию одного из классов таких структур: систем с эластичными волокнами, взаимодействующими с шероховатой поверхностью. Обсуждаются также некоторые близкие по структуре системы.

Ключевые слова: адгезия, трение, ворсистые структуры, градиентные материалы, бионика

PACS numbers: 68.35.Np, 87.10. – e, 87.85.jf

DOI: 10.3367/UFNr.2016.01.037677

Содержание

1. Введение (913).
 2. К вопросу об оптимальной эластичности нитей, взаимодействующих с адгезивной поверхностью (917).
 3. Эластичная ткань с присоединёнными к ней волокнами, взаимодействующими с адгезивной поверхностью (919).
 4. Адгезия без кластеризации волокон: функциональная значимость градиента материала адгезивной щетинки у насекомых (922).
 5. Пространственная модель ворсистой структуры на подошве геккона. Функциональная значимость высокоспециализированной неоднородной геометрии (924).
 6. Адгезия, индуцированная сдвигом. Контактная механика биологических систем со спатулами (927).
 7. Заключение (929).
- Список литературы (930).

1. Введение

В течение двух последних десятилетий значительное внимание научной общественности привлечено к существенной для некоторых биологических объектов сухой адгезии, проявляющейся на микро- и наномасштабах [1–7]. За это время с целью более глубокого понимания явлений, связанных с этой проблематикой, были проведены важные экспериментальные и теоретические исследования.

Одним из самых знаменитых объектов, ставших предметом детальнейших исследований во многих лабораториях мира, оказались лапы гекконов. В частности, обнаружилось, что подошва гекконов покрыта слоем ворсинок (волокон), каждая из которых заканчивается тонкой (5–10 нм), похожей на листик, пластинкой (спатулой). Эта пластинка настолько мала, что способна следовать профилю шероховатой поверхности практически на молекулярном уровне.

С самого начала предполагалось, что именно ворсистая структура даёт ключ с усилением адгезии и контролю над ней. Существование природных систем, резко повышающих суммарную площадь контакта и адгезию в такой степени, что животные способны буквально ходить по стенам и потолку, стимулировало нанотехнологические направления исследований таких природных систем и создание подобных им искусственных. Были достигнуты значительные успехи в производстве поверхностных покрытий на основе полимеров, которые имитируют структуру щетинок и пластинок на лапе геккона [6–8]. В некоторых случаях свойства этих синтетических систем уже сопоставимы со свойствами природных систем. Созданы также структуры на основе относительно

В.Л. Попов. Technische Universität Berlin, Institut für Mechanik, FG Systemdynamik und Reibungsphysik, Sekr. C8-4, Raum M 122, Straße des 17. Juni 135, 10623 Berlin, Germany

E-mail: v.popov@tu-berlin.de

А.Э. Филиппов. Донецкий физико-технический институт им. А.А. Галкина НАН Украины,

ул. Р. Люксембург 72, 83114 Донецк, Украина

E-mail: filippov_ae@yahoo.com

С.Н. Горб. Department Functional Morphology and Biomechanics, Zoological Institute of the University of Kiel,

Am Botanischen Garten 1–9, D-24098 Kiel, Germany

E-mail: sgorb@zoologie.uni-kiel.de

Статья поступила 8 ноября 2015 г.

жестких материалов, таких как нанотрубки или произведённые микроэлектромеханически наностержни из органических полимеров (так называемые органороды (organorods)) [9, 10], которые также демонстрируют хорошие адгезивные свойства.

Натуральная подошва с адгезивными свойствами имеет очень сложную структуру, и её адгезия комбинируется из множества вкладов на различных масштабах [4, 11–13]. Такая подошва представляет собой результат эволюции на основе естественного отбора и, вероятно, является весьма высокооптимизированной. Хотя, возможно, она сохраняет и случайные отпечатки, своеобразные рудименты, относительно случайно развивавшейся вплоть до настоящего времени структуры. Поэтому вовсе не обязательно копировать её абсолютно, а следует лишь заимствовать главную идею волокон, или отростков, для того чтобы создать искусственные структуры наподобие нанотрубок или эластичных грибоподобных структур, сделав их производство настолько технологичным, насколько это возможно. Вопрос о практической реализации адгезивных структур порождает потребность в численном моделировании, которое должно помочь найти оптимальное соотношение между параметрами системы [14–16]. Хотя искусственные структуры моделировать гораздо проще, чем мезоскопические природные объекты, они остаются, тем не менее, сложными многочастичными системами, движущимися во всех трёх измерениях.

При разработке искусственных адгезивных систем представляет интерес провести анализ структур и их свойств, заложенных природой в устройство различных живых существ. Так, например, известно, что формирование контакта адгезивных подошв насекомых на различных подложках обусловлено также способностью их подошв адаптироваться к разным топографиям, которая существенно увеличивается благодаря наличию на подошвах специфических микро- и наноструктур [17–21]. Кроме того, остановка распространения трещин в адгезивных системах со множественными контактами предоставляет дополнительные преимущества при присоединении к шероховатым поверхностям [22]. Так же как и у геккона, иерархическая организация структуры подошв насекомых делает возможным образование множественных контактов, что вносит определяющий вклад в увеличение суммарной длины контакта и полного времени отщепления [23].

Недавно было показано [24], что тонкие, подобные плёнкам, окончания щетинок под действием прилагаемой силы сдвига приводят к образованию максимальной контактной области без проскальзывания вдоль контакта. По этой причине эластичность материала окончаний щетинок важна для формирования контактов адгезивных подошв. Гибкие материалы могут образовывать большую область контакта при минимальной нагрузке. С другой стороны, протяжённые структуры из очень мягких материалов имеют низкую механическую устойчивость [25]: ворсинки адгезивных подошв насекомых из таких материалов могут скручиваться и коллапсировать, приводя к так называемой кластеризации (слипанию) [26, 27]. Вследствие кластеризации функциональные свойства адгезивных контактов в отсутствие их адаптации могут сильно ухудшиться или вообще исчезнуть. Таким образом, адгезивные структуры насекомых представляют собой типичный случай решения проблемы оптимизации,

которое осуществляется в ходе биологической эволюции посредством появления градиентов толщины и механических свойств. Градиенты толщины в различных адгезивных щетинках насекомых хорошо известны благодаря многочисленным исследованиям под электронным микроскопом [17].

Недавно было выполнено комбинированное исследование структуры материала и локальных механических свойств тарзальных щетинок жука *Coccinella septempunctata* и продемонстрировано наличие градиента толщины на уровне каждой отдельной щетинки [28]. Модуль упругости щетинок был исследован с помощью атомного силового микроскопа (АСМ), причём обнаружено, что этот модуль изменяется от 1,2 МПа на окончаниях щетинок [28] до 6,8 ГПа на их основании. На окончаниях ворсинок обнаружен резиноподобный протеин резилин в высокой концентрации [29, 30], тогда как в их основаниях доминирует затвердевшая кутикула. Предшествовавший анализ методом контактной лазерной сканирующей микроскопии (КЛСМ) окончаний щетинок также ясно показал наличие резиноподобного протеина в довольно высоких концентрациях [28, 31, 32]. Обе, центральная и базальная, части щетинок благодаря присутствию других, предположительно затвердевших, протеинов окрашены в доминирующие синий, жёлтый и красный цвета автофлуоресценции, вероятно всего, резилина (синий) и склеротизированного хитина (жёлтый и красный) (рис. 1). Между преимущественно резилиновыми дистальными частями и более твёрдыми частями у основания была обнаружена достаточно чётко выраженная градиентная композиция материала. Эксперименты по наноиндентации с помощью АСМ подтвердили низкий модуль упругости на окончании волосков, ($1,2 \pm 0,3$) МПа, и достаточно большой у их основания, ($2,43 \pm 1,9$) ГПа [28].

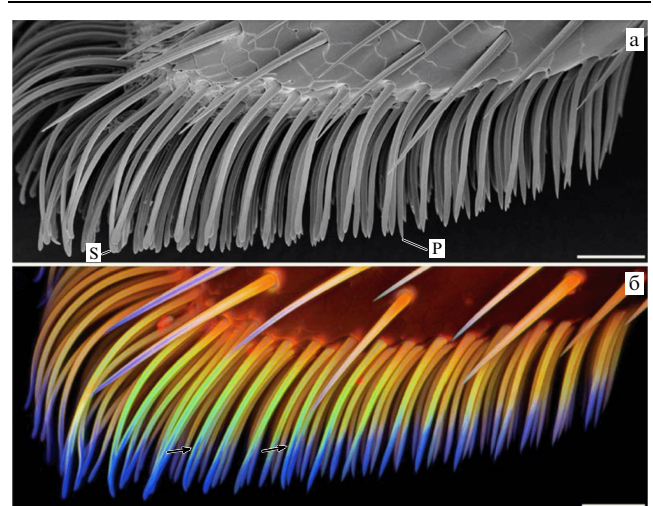


Рис. 1. (В цвете онлайн.) Морфология и композиция материалов адгезивных тарзальных щетинок. Вентральная часть второй адгезивной подошвы передней ноги самки семиточечной божьей коровки *Coccinella septempunctata* (вид сбоку). (а) Фотография в сканирующем электронном микроскопе (СЭМ) (образец высушен 1-пропанолом). (б) КЛСМ-проекция максимальной интенсивности, показывающая перекрытие четырёх автолюминесценций, упомянутых в тексте. Стрелки указывают на дорсовентральный градиент материала. S — щетинка с окончанием лопаточкой, P — с точечным окончанием. Масштабные отрезки 25 мкм. (Из работы [28].) (Воспроизводится с разрешения Nature Publishing Group, © Peisker et al., 2013.).

Биологические материалы — это практически всегда композиты. Кроме того, градиенты материальных свойств хорошо известны в биологии, а биологическая структура может приводить к новым неожиданным свойствам. Ранее это было показано для кутикулы насекомых [33, 34], кожи змеи [35], человеческих зубов [36, 37] и других биологических композитов. Наличие градиентов модуля упругости у гладких устройств прикрепления на подошве насекомых также показано в работе [38]. Интересно, что градиенты гладких подошв саранчи и кузнечиков различны. Градиенты также наблюдаются в ворсистых подошвах божьих коровок [28]. Гладкая адгезивная подошва состоит из мягкого основания, покрытого более жёстким слоем, а ворсистая подошва, напротив, имеет более жёсткое основание в сочетании с более мягким окончанием. Наличие градиентов двух типов увеличивает приспособляемость и тем самым силу прикрепления к различным шероховатым поверхностям.

Разнонаправленность градиентов может быть объяснена различием в архитектуре подошв. Гладкая подошва состоит из разветвляющихся стержней или клеточной пены, которая вместе с заполненной жидкостью областью поддерживает форму подошвы. Кроме того, в подошве имеется относительно жёсткий верхний слой, который ограничивает нити. Этот слой обеспечивает постоянную длину окончаний нитей (поэтому виды, обитающие в засушливых условиях, оберегают подошву от высыхания) [28, 39]. В ворсистых структурах щётка не завершается непрерывным слоем и в принципе может сгущаться и кластеризоваться [27, 40–47]. Большая степень кластеризации приводит к снижению функционального преимущества множественности контактов [23], и этот нежелательный эффект подавляется наличием градиентов толщины [18] и механических свойств [28].

Итак, как правило, между окончанием и основанием имеется градиент материала, который, предположительно, является результатом эволюционной оптимизации адаптации адгезивной подошвы к шероховатой поверхности, одновременно предотвращающей кластеризацию нитей. Такая оптимизация, как предполагается, повышает эффективность адгезивной системы в целом. Несмотря на то что недостатки чисто жёстких и чисто мягких массивов нитей интуитивно понятны, довольно сложно судить о преимуществах или недостатках разных вариантов градиентов: от основания к окончанию или от окончания к основанию — а также о соотношении областей большей или меньшей жёсткости. Многочисленные гипотезы относительно этого трудно проверить экспериментально на природных биологических образцах, что повышает ценность математического моделирования систем с такими градиентами.

Кластеризация является одной из важнейших проблем экспериментальной реализации искусственных адгезивов, мотивированных структурой ворсистых биологических подошв [48]. Если искусственная структура является достаточно гибкой для того, чтобы обеспечить хороший контакт с природной шероховатой поверхностью, то после всего нескольких циклов присоединения к поверхности ворсинки стремятся, притянувшись друг к другу, образовать кластеры [49, 50]. Поскольку обычно такие кластеры гораздо крупнее самих ворсинок, в результате способность системы обеспечивать хороший контакт с фрактальной поверхностью резко снижается. Главная проблема здесь состоит в том, что

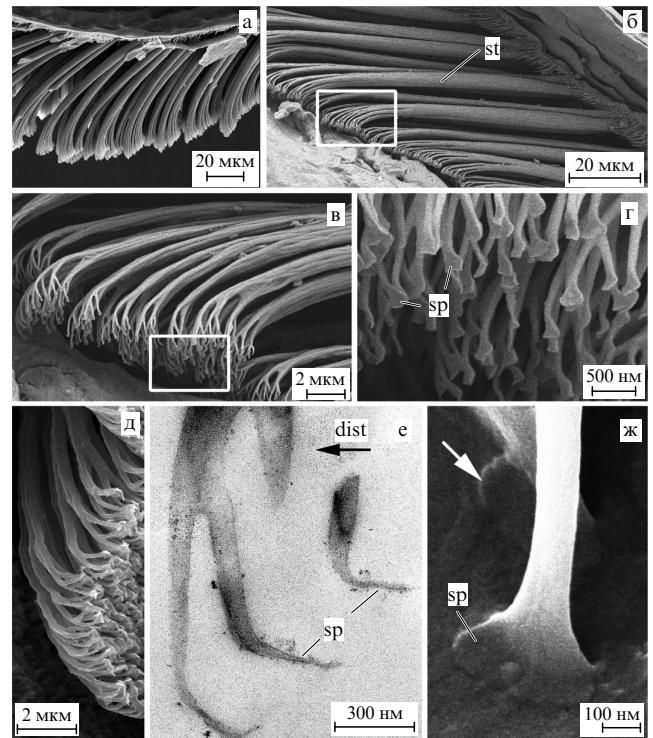


Рис. 2. Иерархическая организация адгезивной системы геккона. (а) Продольное сечение стопы геккона с ламеллой (тонкая горизонтальная кератиновая плёнка), покрытой щетинками в неконтактном состоянии. (б) Щетинки (st) в контакте с поверхностью. Щетинки, разветвляющиеся на отдельные нанонити, заканчивающиеся лопаточками (sp): (в) увеличенный фрагмент, выделенный белым прямоугольником на рис. б, (г) увеличенный фрагмент, выделенный белым прямоугольником на рис. в. Ориентация лопаточек в неконтактном (д, е) и контактном (ж) состояниях. Чёрная стрелка (dist) показывает периферийное направление подошвы. Белая стрелка указывает на лопаточку в процессе поворота от неконтактной ориентации к контактной.

силы взаимодействия ворсинок, ответственные за образование кластеров, имеют ту же природу, что и сила притяжения к внешней поверхности [44]. Интересно, что структура вористой поверхности подошвы животных демонстрирует намного меньшую тенденцию к образованию кластеров. Одна из важных причин последнего заключается в том, что пространственная организация этой системы гораздо сложнее. Ворсинки подошвы животных образуют изощрённую трёхмерную структуру, сложность которой намного превышает всё то, что было до сих пор в этом направлении создано искусственно. Например, внутренняя сторона подошв геккона имеет так называемые ламеллы с массивами из щёточек толщиной 3–5 мкм, которые на концах разделены на 100–1000 отдельных нанонитей, в свою очередь заканчивающихся уплощёнными лопаточками (спатулами) длиной и шириной порядка 200 нм [1, 2, 41, 42] и толщиной около 15 нм [11] (рис. 2).

Помимо того что само по себе разделение большого адгезивного контакта на множество единичных контактов приводит к увеличению силы адгезии этой фибриллярной системы [43–45], эффект усиливается специфической спатулой отдельного контакта [24, 46, 47] и тем, что каждая отдельная ворсинка является частью иерархической структуры на разных уровнях (рис. 3б, в), причём

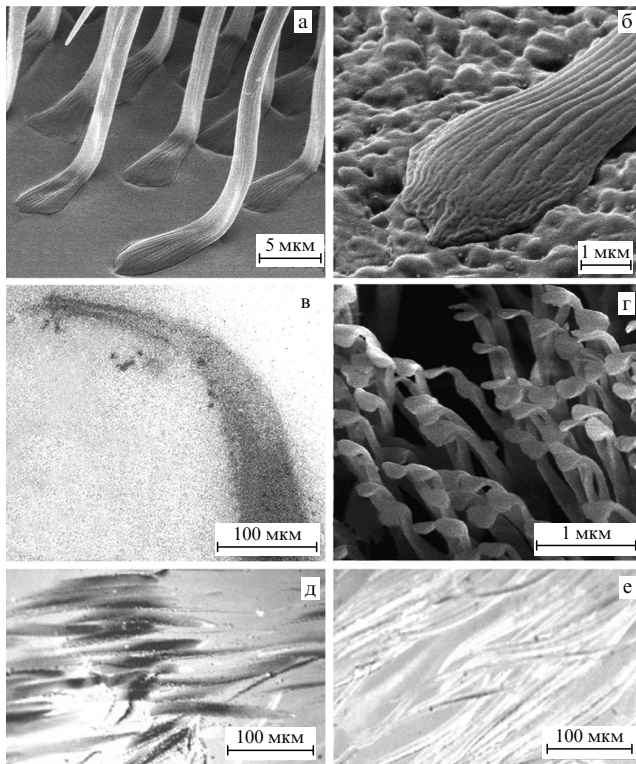


Рис. 3. Окончания ворсинок различных животных. (а) Лопаточка жука *Gastrophysa viridula* в контакте с плоской поверхностью (СЭМ-изображение). (б) То же при неоднородностях поверхности порядка 300 нм. (в) Продольное изображение лопаточки *Gekko gekko* в просвечивающем электронном микроскопе. (г) Множество лопаточек *Gekko gekko* (крио-СЭМ-изображение). (д, е) Ворсистая структура паука *Cupiennius salei* в отражающем оптическом микроскопе во время дистального (д) и проксимального (е) скольжения по стеклянной подложке (тёмные области соответствуют местам контакта со стеклянной поверхностью).

каждый уровень такой многоуровневой архитектуры не чувствителен к кластеризации [51, 52]. Важной причиной низкой кластеризации реальной живой системы является то, что окончание щетинок имеет более изошрённую неоднородно распределённую трёхмерную структуру (рис. 3), чем искусственные аналоги [49, 50] или структуры, которые рассматривались в предыдущих моделях [51].

Фибриллярные системы прикрепления насекомых, паукообразных и рептилий состоят из ворсинок [52–70]. При этом большинство ворсистых адгезивных систем насекомых, паукообразных и рептилий имеют не суженные заострённые кончики, а скорее, структуры, подобные лопаточкам. Как частично обсуждалось выше, для объяснения функциональной важности такой контактной геометрии предлагались различные гипотезы: усиление приспособляемости к шероховатой поверхности [32]; создание контакта с помощью скорее силы сдвига, чем нормальной нагрузки [1]; увеличение полной линии отслаивания благодаря наличию множества лопаточек [45]; разрушение контакта посредством отслаивания [45, 46, 61].

Хорошо известно, что приложение нормальной силы может увеличивать адгезию [63]. Однако для ворсистых систем сила адгезии всегда меньше, чем приложенная нормальная сила [64]. Этого может быть недостаточно

для хождения по потолку. Другая возможность улучшить адгезию — это приложение силы сдвига. В настоящем обзоре мы представим численную модель динамики окончаний в виде "лопаточки" при формировании контакта с шероховатой поверхностью. В частности, будет продемонстрировано, что, особенно в тех случаях, когда лопаточка первоначально не параллельна поверхности, сдвиг приводит к увеличению площади контакта. Сила, которую нужно приложить, имеет оптимальное значение, обусловленное тем, что её возрастание приводит к увеличению контакта лишь до тех пор, пока не возникнет проскальзывание уже закреплённой части. Именно при интенсивности протяжки, близкой к критической, может быть достигнут максимум адгезии, что играет, по-видимому, принципиальную роль в биологических и технических приложениях.

В работе [45] контакт между индивидуальным элементом, подобным лопаточке, и поверхностью был визуализирован на свежих подошвах различных насекомых с использованием методов криогенной сканирующей электронной микроскопии (крио-СЭМ). В ряде работ был обнаружен градиент толщины подошв от основания до окончания (муха [58], геккон [59], жук [60]) (рис. 3б, в). В контакте лопаточки выровнены и ориентированы в направлении, обратном подошве (рис. 3а, б). Показано, что приложение силы сдвига в некотором направлении к ворсистой системе паука приводит к возрастанию площади реального контакта [58] (рис. 3д, е).

Мухи также совершают сдвиговые движения в процессе образования контакта [59]. Некоторые авторы отмечают сильную зависимость от сдвига измеренной силы отрыва системы прикрепления геккона и даже именуют это "адгезией, вызванной трением" [1, 2]. Поскольку эффективный модуль упругости для тонких пластинок даже из относительно прочных материалов, таких как кератин или кутикула членистоногих, очень мал, такая геометрия имеет фундаментальную важность для адгезии на шероховатых поверхностях [32] ввиду малой энергии деформаций, запасённой в материале в ходе образования контакта.

Показано также, что адгезия в таких системах зависит от природы шероховатости подложки [56] и она сильнее для тех устройств прикрепления, которые имеют в основном похожие на спатулы окончания [21]. Важная роль такой формы контакта в образовании адгезии недавно была экспериментально продемонстрирована на искусственных поверхностях с аналогичной геометрией [66–70]. Недавние теоретические исследования подтвердили важность приложения силы сдвига для увеличения силы отрыва [71]. Учитывая вышесказанное, мы разделили процесс численного моделирования описанных систем на следующие этапы, которые будут воспроизведены в настоящем обзоре.

1. Вначале была рассмотрена простейшая задача о поведении массива вертикально закреплённых нитей, которые вступают в контакт с адгезивной поверхностью. При этом основной упор делался на определение оптимальной эластичности нитей.

2. Затем в модифицированной модели этим нитям было "разрешено" двигаться в ортогональном направлении, что резко повысило их способность адаптироваться к выступам поверхности. Однако притяжение концов нитей к одним и тем же выступам поверхности привело к их вполне ожидаемой кластеризации.

3. Естественным способом борьбы с кластеризацией, который, собственно, и был выбран природой, является использование градиентов структуры или, что то же самое, механических свойств (жесткости) материала нитей. Этот способ также был протестирован в численной модели.

4. Другой способ противостоять кластеризации, найденный в ходе естественного отбора, состоит, по-видимому, в нетривиальном распределении в трёхмерном пространстве самих нитей на завершающем уровне их организации в виде своеобразных гроздей, свисающих с общего относительно жесткого корня. Этот вариант повышения эффективности системы был также рассмотрен в последующей модификации численной модели. Особое внимание было уделено возникновению эффективной "протяжки", приводящей как к развороту спатул в процессе их присоединения к поверхности, так и к значительному повышению площади суммарной контактной поверхности, а кроме того, к существенному уменьшению эффекта кластеризации после отделения спатул от контактной поверхности.

5. Наконец, была учтена структура окончания нити с характерной спатулой, спонтанно найденной в результате конвергентной эволюции для самых разных использующих адгезивное притяжение к шероховатым поверхностям видов, дающая им, по-видимому, существенное преимущество. Был учтён ярко выраженный экспериментально наблюдаемый градиент жесткости вдоль спатулы. Главным вопросом в данном контексте являлось то, насколько описанный ранее эффект "протяжки" способствует лучшей адаптации спатулы к шероховатой поверхности.

Эти общие, а также связанные с ними конкретные вопросы рассмотрены в разделах 2–6, посвящённых вопросам численного моделирования таких систем.

2. К вопросу об оптимальной эластичности нитей, взаимодействующих с адгезивной поверхностью

Как отмечалось во введении, вначале удобно сконструировать простейшую модель, в которой движение ограничено только вертикальным z -направлением, которое в свою очередь ортогонально усреднённым положениям двух контактирующих пластин, и "проиграть" в рамках этой модели основные аспекты численного описания системы. Эффективная упругость модельных нитей K_{eff} в этом простейшем случае может рассматриваться как интегральная величина, отражающая совместное действие изгибной жесткости природных ворсинок и их растяжения молекулярными силами адгезии (называемыми также силами Ван-дер-Ваальса). Вид принципиальной структуры такой упрощённой модели в достаточно общем случае показан на рис. 4. Сплошная кривая представляет некоторый малый фрагмент фрактальной шероховатой поверхности. Такая модель, несмотря на её простоту, напоминает многие из недавно созданных реальных полимерных адгезивных покрытий, например углеродные волоски, о которых говорилось во введении [10]. Эти структуры, которые намного проще созданных естественным отбором в живых организмах, состоят из плотных наномасштабных щёточек из почти параллельных отростков, которые обеспечивают хороший контакт поверхности на наномасштабах. Искусственные покры-

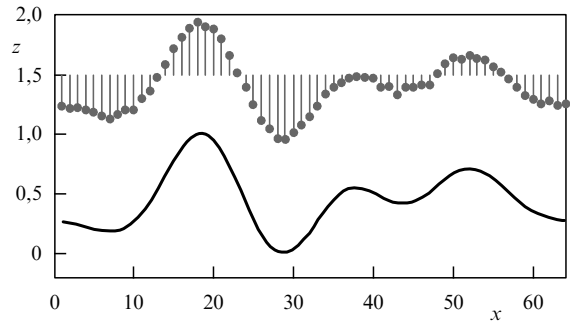


Рис. 4. Принципиальная схема упрощённой модели (см. текст). Сплошная кривая представляет малый фрагмент фрактальной шероховатой поверхности. Прямые отрезки с кружками изображают упругие связи.

тия, несмотря на их простоту по сравнению с природными, имеют очень хорошее нанометровое отношение силы адгезии на единицу площади: $(1,6 \pm 0,5) \times 10^{-2}$ нН нм^{-2} , которое, например, в 200 раз выше, чем наблюдаемое для волосков подошвы геккона. Типичные кривые напряжение–смещение в течение цикла нагрузки–разгрузки показывают большие адгезионные гистерезисы, вплоть до масштаба 20 нм.

Конечно, с теоретической точки зрения эти модельные структуры отличаются от природных ворсинок гекконов, у которых самая тонкая ворсинка заканчивается почти на молекулярном уровне тонкой спатулой. Но зато в упрощённой модели можно ограничиться описанием простой контактной силы, учитывающей только приспособление окончаний (заменяющих в модели спатулы) к шероховатой поверхности. Такая модель, которая концептуально представлена на рис. 4, и была построена в работе [14]. Эта модель учитывает как упругое взаимодействие, так и химический потенциал, связывающий каждую ниточку с поверхностью. Стандартный потенциал такого типа — это взаимодействие Ван-дер-Ваальса. В работе [14] использовано одно из известных представлений потенциала Ван-дер-Ваальса:

$$U_{\text{vdw}} = -\frac{U}{12} \left[2 \left(\frac{z}{z_{\text{vdw}}} \right)^{-6} - \left(\frac{z}{z_{\text{vdw}}} \right)^{-12} \right], \quad (1)$$

где U — характерная энергия адгезии, z_{vdw} — положение минимума потенциала. Каждая упругая ворсинка может быть деформирована с соответствующей энергией:

$$U_{\text{elastic}} = \frac{K_{\text{eff}}(z - Z)^2}{2}. \quad (2)$$

Здесь Z — равновесное положение кончика ворсинки. Как обычно, силы в уравнениях движения определяются производными от соответствующих потенциалов:

$$F_{\text{vdw}} = -\frac{\partial U_{\text{vdw}}}{\partial z}, \quad F_{\text{elastic}} = -\frac{\partial U_{\text{elastic}}}{\partial z}. \quad (3)$$

Для численных исследований обычно удобно нормировать все энергии, интенсивность шума и пространственные масштабы на характерные значения физических величин. В безразмерных единицах получаем

$$U_{\text{vdw}} = -\frac{U(2r^{-6} - r^{-12})}{12}, \quad U_{\text{elastic}} = \frac{K(z - Z)^2}{2}. \quad (4)$$

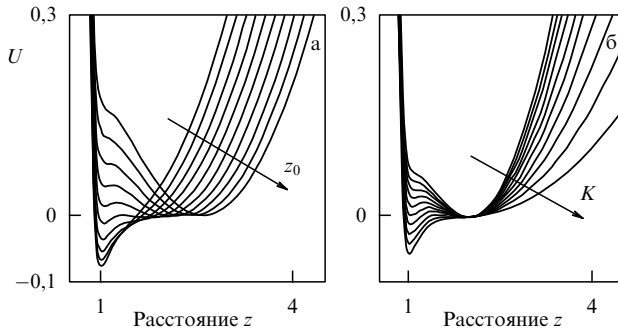


Рис. 5. Полный потенциал U упругой и ван-дер-ваальсовой сил, $U = U_{\text{elastic}} + U_{\text{vdW}}$, вычисленный при варьируемых расстояниях z_0 (а) и коэффициенте упругости K (б). Стрелками указано направление возрастания z_0 и K .

Хаотичное поведение в микроскопической системе порождается разными причинами: фрактальной структурой поверхности $z = w(x)$, к которой происходит притяжение, сложной динамикой нитей, наконец, просто температурными флуктуациями, которые важны на наномасштабах.

В численной модели [14] фрактальная поверхность может быть задана в виде зависящего от координаты x массива данных; в соответствии со стандартным определением:

$$w(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} B(q) \cos(qx + \zeta), \quad (5)$$

где коэффициенты фурье-разложения имеют масштабно-инвариантный вид, $B(q) = c_0 q^\alpha$, а $\zeta(x)$ представляет собой δ -коррелированную случайную фазу:

$$\langle \zeta(x)\zeta(x') \rangle = \delta(x - x'). \quad (6)$$

Конечно, реальная поверхность $w(x)$ никогда не может быть по-настоящему фрактальной, простираясь от нулевых расстояний до бесконечных. Это так называемый квазифрактал, включающий в себя некоторый ограниченный спектр волновых векторов $q_{\min} < q < q_{\max}$ в формуле (5). Амплитуда его максимумов и минимумов (иными словами, шероховатость или, на математическом языке, стандартное отклонение) также ограничена:

$$\langle (w(x) - \langle w(x) \rangle)^2 \rangle^{1/2} \leq A, \quad (7)$$

где параметр A описывает характерную физическую шероховатость поверхности.

В некоторой области параметров полный потенциал, содержащий адгезионную и упругую составляющие, имеет две долины (ямы) с сопоставимой глубиной. Этот полный потенциал показан на рис. 5 в виде семейств кривых, рассчитанных при различных значениях расстояния и константы упругости. Видно, что в обоих случаях есть области параметров, в которых потенциал является двухъямным. В соответствии с общими принципами физической кинетики можно ожидать, что при флуктуирующих параметрах возникнет и два альтернативных состояния системы. При флуктуирующих параметрах сопоставимые энергетические долины провоцируют динамические прыжки кончиков нитей между двумя, при-

соединённым и отцепленным, состояниями. Такой своеобразный "обмен возбуждениями", усреднённый по времени, и обеспечивает притяжение к поверхности [14].

Для начала можно пренебречь, в грубом приближении, взаимодействием между ворсинками. Тогда равновесие определяется просто балансом сил: $F_{\text{vdW}} = F_{\text{elastic}}$. Однако это, казалось бы тривиальное, уравнение в случае фрактальной поверхности приходится решать численно. Компьютерная процедура должна быть выполнена как для разных расстояний между поверхностями, так и для различных шероховатостей A . Каждое значение A порождает семейство соотношений между силой притяжения и упругой постоянной. Однако можно принять во внимание, что существует довольно много природных поверхностей, которые обладают примерно одинаковыми фрактальными свойствами на масштабах, приближающихся к молекулярным. Так что довольно естественно несколько упростить задачу перебора, как это было сделано в [14], выбрав оптимальную упругость близкой к единице для нормированного уравнения (4), когда в свою очередь шероховатость $A \approx 1$. Конечно, идеализированный случай $A \approx 1$ с учётом того, что всё нормировано на параметры сил Ван-дер-Ваальса, соответствует практически молекулярным масштабам и почти никогда не соответствует действительности. По сути, это означает, что искусственная система должна сочетать в себе два свойства, а именно: иметь мягкую базовую ткань, для того чтобы предварительно адаптироваться к поверхности на относительно больших масштабах, и сравнительно жёсткие короткие наросты на наноуровне. Моделирование систем такого типа и было проведено в рамках динамического подхода. Были численно решены следующие уравнения движения:

$$\frac{\partial^2 z_k}{\partial t^2} = -\gamma \frac{\partial z_k}{\partial t} + F_{\text{elastic},k} + F_{\text{vdW},k} + \zeta(z_k; t). \quad (8)$$

Случайные источники $\zeta(z_k; t)$ и диссипация $\gamma \partial z_k / \partial t$ здесь включены для того, чтобы воспроизвести существенное на таких масштабах влияние флуктуаций, которые обычно являются комбинацией термальных шумов и хаотической динамики и могут быть формально отражены некоторой эффективной температурой системы T_{eff} :

$$\langle \zeta(z_{k'}; t') \zeta(z_k; t) \rangle = D \delta(z_{k'} - z_k) \delta(t' - t), \quad D = 2k_B \gamma T_{\text{eff}}. \quad (9)$$

Как и ожидалось, когда параметры близки к оптимальным, динамический хаос в потенциале с двумя сопоставимыми минимумами приводит к колебаниям концов связей между этими минимумами. Эффективное обменное взаимодействие способствует приспособлению подвижной поверхности к жёсткой шероховатой. Это напоминает эффект, известный в физике трения, проявляющийся в том, что вибрирование поверхностей может приводить к увеличению области контакта и адгезионной силы между ними. Усреднённая по времени вероятность $P(z)$ обнаружить окончание нити на произвольном z , вычисленная при оптимальном соотношении взаимодействий двух типов, показана на рис. 6.

Не вдаваясь в подробности, заметим, что численный эксперимент был проведён при различных шероховатостях поверхности (в результате чего возникает разное среднее расстояние между контактирующими поверхно-

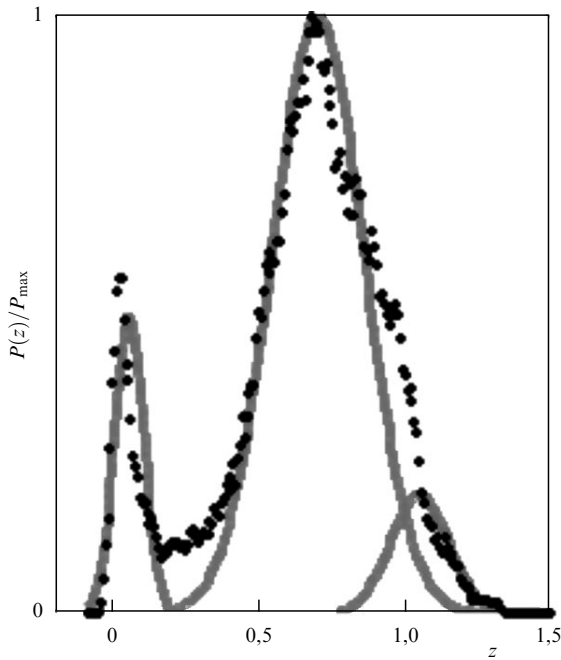


Рис. 6. Усреднённая по времени гистограмма вероятности обнаружить окончание нити в положении z , нормированной на её максимальное значение, $P(z)/P_{\max}(z)$. Серыми сплошными кривыми показано разложение численно этой гистограммы на три основных состояния (вблизи каждой из поверхностей и промежуточное).

стями), а также при трёх различных соотношениях констант упругости: $K < K_{\text{opt}}$, $K \approx K_{\text{opt}}$ и $K > K_{\text{opt}}$. Результаты моделирования представлены соответственно на рис. 7а, б и в. Каждое вертикальное сечение, показанное градациями серого цвета, соответствует конкретной реализации гистограмм $P(z)/P_{\max}(z)$. Более тёмный цвет отвечает большей вероятности $P(z)$.

Как видно из рис. 7, если константа упругости слишком велика, то все связи в основном притянуты к верхней пластине. Они не могут должным образом приспособиться к шероховатой поверхности, и суммарная сила притяжения слишком мала. В противоположном пределе, конечно, все нити приближаются к жёсткой поверхности "идеально". Однако в этом случае соответствующие им эффективные "пружинки" очень слабы для того, чтобы при необходимости отцепления вернуться в своё исходное положение. Для отцепления всей этой клейкой системы от адгезивной поверхности необхо-

димы очень сильное растяжение и огромный гистерезис, что, конечно, крайне неэффективно ни с биологической, ни с технической точек зрения. Эти результаты свидетельствуют в пользу того, что оптимальная эластичность ворсинок системы в самом деле существует. Более того, как обнаружилось, вопреки интуитивным предположениям, соответствующие нити должны быть достаточно жёсткими.

Следует также отметить, что компромисс между жёсткостью нитей и хорошей адаптацией к поверхности в принципе возможен ещё и потому, что имеется некоторый запас в величине притяжения, так как даже те системы, которые уже созданы, в известной степени "перевозвооружены" и в принципе способны обеспечить намного большее притяжение, чем необходимо на практике. Дополнительная адаптация может быть также достигнута благодаря учёту движения (вращения, искривления) ворсинок в горизонтальных направлениях, которым мы пока пренебрегали. В этом случае ворсинки способны находить относительно близкие выступы жёсткой шершавой поверхности, расположенные, тем не менее, непосредственно над ними. Эта возможность обсуждается в разделе 3.

3. Эластичная ткань с присоединёнными к ней волокнами, взаимодействующими с адгезивной поверхностью

В разделе 2 мы описали численное моделирование искусственной структуры из нитей, контактирующих посредством сил Ван-дер-Ваальса с шероховатой поверхностью. Основная цель моделирования состояла в том, чтобы найти оптимальное соотношение между параметрами при достаточно сильных ограничениях; одно из ограничений заключалось в том, что уравнения равновесия решались для 1 + 1-мерной системы, в которой разрешено только вертикальное движение ворсинок. Такая модель, несмотря на её математическую простоту и удобство, нуждается в дальнейшем развитии, в первую очередь в учёте движений в направлении, ортогональном вертикальному. Помимо чисто теоретических предсказаний имеется множество экспериментальных свидетельств значимости подобных движений. В частности, скольжение или вибрирование в направлении, ортогональном к вертикальному, может переводить энергию макроскопических перемещений "вглубь", вплоть до микроскопических масштабов, обеспечивая тем самым лучшую адаптацию поверхностей и увеличение площади

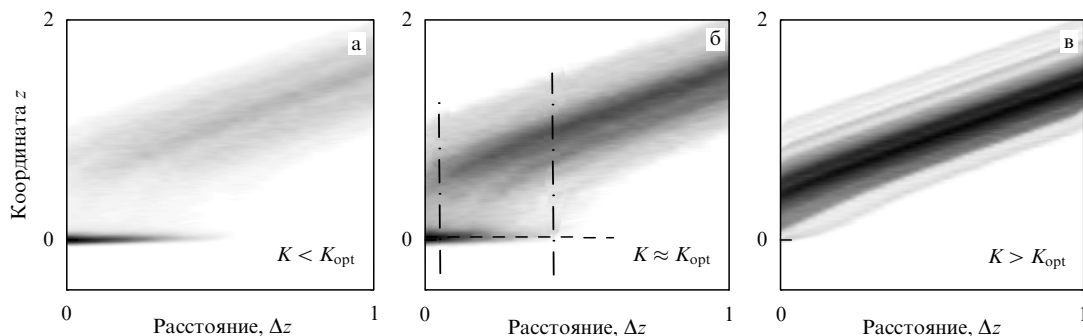


Рис. 7. Карты плотности гистограмм, показанных градациями серого для различных соотношений коэффициента упругости: (а) $K < K_{\text{opt}}$, (б) $K \approx K_{\text{opt}}$, (в) $K > K_{\text{opt}}$. Штрихпунктирные линии на рис. б выделяют интервал упругости, в котором концы нитей распределены в основном посередине между поверхностями.

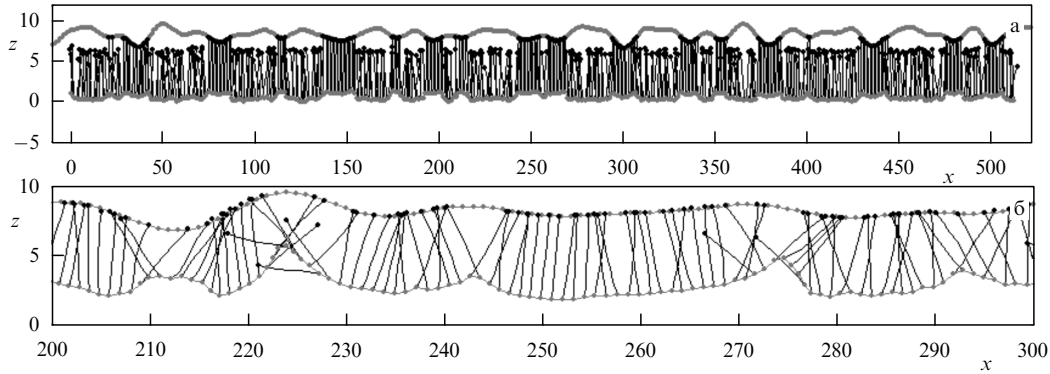


Рис. 8. Принципиальная структура модели (см. текст). (а) Ранняя стадия контакта со множеством неприсоединённых связей. Нижняя и верхняя жирные линии представляют фрагменты шероховатой поверхности и гибкой ткани соответственно. Линии с чёрными кружками отображают мгновенные положения эластичных ворсинок. (б) Приближённый вид той же системы на более поздней стадии процесса: нити искажены и наклонены для нахождения наиболее близких к идеальным условиям контакта с поверхностью.

взаимного контакта [11, 13, 15, 16]. Для того чтобы учесть эту дополнительную степень свободы, предыдущая модель будет ниже расширена. Мы также рассмотрим, как интенсивность притяжения и вообще сценарии присоединения и отделения плёнки зависят от разных исходных расстояний, поверхностной неоднородности, а также от угла наклона. Концептуальная структура обобщённой модели проиллюстрирована на рис. 8. Адгезивная жёсткая поверхность показана жирной кривой. Нити изображены тонкими линиями с кружками на концах. Рисунок 8а отображает раннюю стадию процесса, во время которой большинство связей ещё разорвано. Из рисунка 8б, на котором представлен в более крупном масштабе фрагмент той же системы на более поздней стадии, видно, как наклонены и искривлены многие нити для достижения лучшего контакта. Вообще говоря, нити, конечно, не могут найти абсолютно оптимальную конфигурацию и занимают некоторое компромиссное положение, определяемое "вмороженной кинетикой" поиска такого положения. Результирующую конфигурацию можно найти только численно, решая соответствующие уравнения движения.

В целом уравнения остаются теми же, что и в разделе 2. Разница, однако, состоит в том, что одномерный потенциал Ван-дер-Ваальса заменяется двумерным:

$$U_{\text{vdw}} = -\frac{U}{12} \left[2 \left(\frac{|\mathbf{r}|}{r_{\text{vdw}}} \right)^{-6} - \left(\frac{|\mathbf{r}|}{r_{\text{vdw}}} \right)^{-12} \right], \quad (10)$$

где U , как и ранее, — амплитуда характерной энергии адгезии, а $\mathbf{r} = \{x, z\}$ теперь — двумерный вектор, r_{vdw} — положение минимума потенциала в двумерном пространстве. Более сложные изменения необходимы, однако, в упругой части взаимодействий. Прежде всего, для того чтобы иметь возможность изгибаться, упругие ворсинки должны теперь состоять из достаточно большого числа отдельных сегментов с координатами концов $\{r_i, r_j\}$, $j = 1, 2, \dots, n_{\text{max}}$. Чтобы сократить вычисления, в качестве компромисса можно принять, что только окончание последнего сегмента взаимодействует с поверхностью посредством потенциала Ван-дер-Ваальса. Это означает, что слагаемое $U_{\text{vdw}} = U_{\text{vdw}}^{n_{\text{max}}}$ в энергии действует только при $j = n_{\text{max}}$. В нулевом приближении можно, так же как и ранее, пожертвовать взаимодействием между отдельными нитями. Каждый эластичный

сегмент может быть растянут (сжат) с упругой энергией

$$U_{\text{elastic}}^{ij} = \frac{K_{\text{eff}}(r_i - r_j)^2}{2}. \quad (11)$$

Принципиально новая часть в энергии обобщённой модели, по сравнению с описанной в разделе 2, связана с возможностью изгибания нитей. Математически такая энергия должна быть сконструирована так, чтобы препятствовать взаимным отклонениям векторов, направленных вдоль каждого из двух ближайших сегментов:

$$U_{\text{bending}} = K_{\text{bending}} \left[1 - \frac{(r_j - r_{j+1})(r_{j-1} - r_j)}{|r_j - r_{j+1}| |r_{j-1} - r_j|} \right]. \quad (12)$$

Соответствующие этим компонентам модели силы теперь определяются производными всех вкладов в энергию вдоль двух ортогональных направлений:

$$\begin{aligned} F_{\text{vdw}}^z &= -\frac{\partial U_{\text{vdw}}}{\partial z}, & F_{\text{vdw}}^x &= -\frac{\partial U_{\text{vdw}}}{\partial x}, \\ F_{\text{elastic}}^{z,ij} &= -\frac{\partial U_{\text{elastic}}^{ij}}{\partial z}, & F_{\text{elastic}}^{x,ij} &= -\frac{\partial U_{\text{elastic}}^{ij}}{\partial x}, \\ F_{\text{bending}}^{z,j} &= -\frac{\partial U_{\text{bending}}^j}{\partial z}, & F_{\text{bending}}^{x,j} &= -\frac{\partial U_{\text{bending}}^j}{\partial x}. \end{aligned}$$

Как и в разделе 2, воспользуемся безразмерными единицами с помощью нормировки на базовые параметры системы $F_{\text{vdw}}, \zeta_{\text{vdw}} < 10$, $S = 0,1K$. В этих единицах имеем

$$U_{\text{vdw}} = -\frac{U}{12} (2r^{-6} - r^{-12}), \quad U_{\text{elastic}}^{ij} = \frac{K(r_i - r_j)^2}{2}, \quad (13)$$

$$U_{\text{bending}}^j = S \left[1 - \frac{(r_j - r_{j+1})(r_{j-1} - r_j)}{|r_j - r_{j+1}| |r_{j-1} - r_j|} \right].$$

Фрактальная поверхность задаётся так же, как это сделано в уравнениях (5)–(7):

$$z = w(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{q_{\text{min}}}^{q_{\text{max}}} B(q) \cos(qx + \zeta),$$

с аналогичным обрезанием волновых векторов, $q_{\text{min}} < q < q_{\text{max}}$. Все расстояния измеряются в единицах фиксированного интервала между двумя ближайшими нитями, выбранного для определённости равным

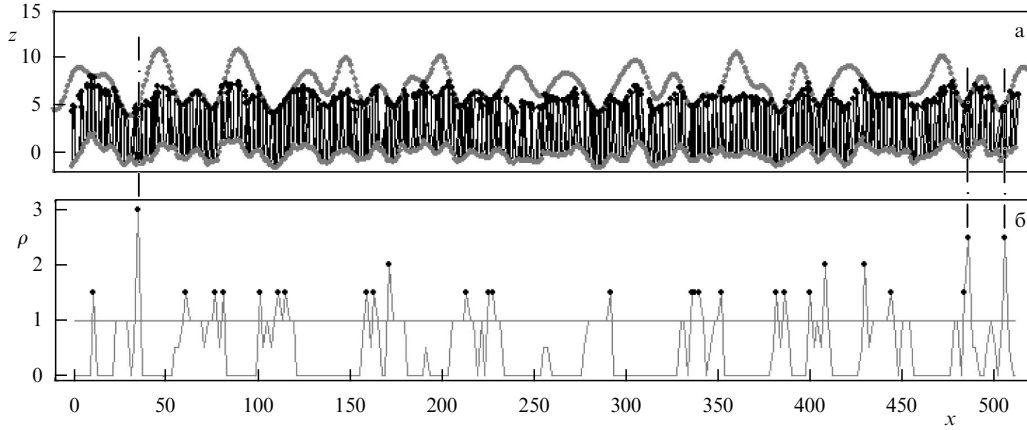


Рис. 9. Сопоставление мгновенных пространственных положений соединений нитей с поверхностью (а) и экстремумов неоднородно распределённой плотности (б), нормированной на среднюю плотность в системе, показанную горизонтальной прямой на уровне единицы. Некоторые области с высокой плотностью пространственной локализации нитей отмечены вертикальными штрихпунктирными линиями, проходящими через рис. а и б.

$\Delta x_k = \text{const} \equiv 1$ нм, а амплитуда шероховатости варьируется вплоть до $A_{\max} = 10\Delta x_k$. В тех же единицах сил адгезии и расстояний выбрана константа упругости $K = 1$, и жёсткость, соответственно, $S_{\max} = 10K$. Последнее предположение, необходимое для написания уравнений движения, относится к деформациям эластичной плёнки. Будем считать, что корневой сегмент каждой нити жёстко присоединён к плёнке. Это означает, что координаты сегментов ткани совпадают с положениями первых элементов нитей: $\{x_k^{j=1}, z_k^{j=1}\}$. Кроме того, полагается, что модельная плёнка имеет собственную упругость в вертикальном направлении:

$$U_{\text{elastic}}^1 = \frac{K_z^1}{2} [(z_k^1 - z_{k+1}^1)^2 + (z_k^1 - z_{k-1}^1)^2],$$

тогда как расстояние между её сегментами в горизонтальном направлении задано, и оно, по существу, однозначно определяет массив нитей, $\Delta x_k = \text{const} \equiv 1$. Для удержания равновесия в вертикальном направлении z плёнка поддерживается некоторой внешней силой F_{external}^z , что приводит к появлению двух граничных условий для координат $\{z_k^{j=1}\}$:

$$F_{\text{elastic}}^{z,1} = -\frac{\partial U_{\text{elastic}}^1}{\partial z}, \quad F_k^{z,1} = F_{\text{external}}^z. \quad (14)$$

Полная система динамических уравнений при этих условиях может быть представлена в виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 z_k^j}{\partial t^2} = & -\gamma \frac{\partial z_k^j}{\partial t} + F_{\text{elastic},k}^{z,j} + F_{\text{bending},k}^{z,j} + F_{\text{VdW},k}^{z,j=n_{\max}} + \\ & + \delta_{j1} (F_{\text{elastic},k}^{z,1} + F_{\text{external}}^z) + \zeta(x_k^j, z_k^j; t), \end{aligned} \quad (15)$$

$$\frac{\partial^2 x_k^j}{\partial t^2} = -\gamma \frac{\partial x_k^j}{\partial t} + F_{\text{elastic},k}^{x,j} + F_{\text{bending},k}^{x,j} + F_{\text{VdW},k}^{x,j=n_{\max}} + \zeta(x_k^j, z_k^j; t).$$

Здесь δ_{j1} — символ Кронекера. Случайный источник $\zeta(z_j; t)$ и включённые в систему члены $\partial z_j / \partial t$ теперь также модифицированы с учётом двумерности и многочастичности задачи:

$$\begin{aligned} \langle \zeta(x_k^j, z_k^j; t) \zeta(x_{k'}^{j'}, z_{k'}^{j'}; t') \rangle = & D \delta(x_{k'}^{j'} - x_k^j) \delta(z_{k'}^{j'} - z_k^j) \delta(t' - t), \\ D = & 2k_B \gamma T_{\text{eff}}. \end{aligned} \quad (16)$$

Совокупность численных экспериментов, выполненных с системой (15), была организована следующим образом. Каждый раз численно генерировалась новая реализация шероховатой поверхности и изгибаемая плёнка располагалась на затравочном расстоянии z_0 . Плёнка изначально задавалась плоской (прямой линией в двумерной модели), и щетинки на плёнке располагались ортогонально к ней в виде регулярной последовательности. Вначале системе позволялось двигаться естественным образом в соответствии с уравнениями движения и граничными условиями (15), (16), и она постепенно достигала некоторого равновесия, вообще говоря, разного для каждой реализации. Время достижения такого равновесия можно формально оценить на основе релаксационной константы, $t_{\max} \propto \gamma^{-1}$. Но поскольку коэффициент пропорциональности неизвестен, надёжнее это сделать апостериори, т.е. восстановить его по выходу всех вычисляемых величин на стационарное асимптотическое поведение. Обычно такой процесс занимает для данной задачи время порядка $t_{\max} \approx 200\gamma^{-1}$.

Нет необходимости воспроизводить здесь все этапы и результаты этого довольно трудоёмкого процесса. Отметим лишь кратко, что, как показывает типичное наблюдение, на промежуточной стадии процесса кончики ворсинок интенсивно движутся вдоль поверхности в горизонтальном направлении. Эта способность двигаться горизонтально, собственно, и отличает данный вариант модели от рассмотренного в разделе 2 [14, 15]. Именно поперечное движение позволяет сформировать очень неоднородное распределение щетинок. Можно сказать, что такое *перераспределение в горизонтальном направлении компенсирует фрактальную структуру в направлении оси z* .

Рисунок 9а иллюстрирует типичное перераспределение ворсинок на промежуточном этапе эволюции системы с постепенным формированием неоднородной плотности, показанной для сравнения на рис. 9б, $\rho_0 = N_{\text{fibers}}/L_{\text{tissue}}$. Для удобства сопоставления с реальным пространственным распределением области, в которых плотность особенно велика, на рис. 9а отмечены вертикальными штрихпунктирными прямыми.

Механические свойства системы, естественно, зависят от шероховатости, жёсткости нитей и эластичности плёнки. Поэтому численные эксперименты проводились в

широком диапазоне всех этих параметров. Обнаружилось, что, несмотря на некоторые конкретные различия, главное остаётся общим: *искажение ворсинок в горизонтальном направлении компенсирует фрактальную структуру в вертикальном направлении* при различных амплитудах шероховатости, вплоть до достаточно больших. Однако следует признать, что сильные пространственные искажения существенно влияют на процесс отсоединения плёнки от поверхности, поскольку множество ворсинок держится за одни и те же выступы поверхности и отрывается практически одновременно (лавинами). Это делает одно из важных приближений модели, а именно *приближение невзаимодействующих концов нитей, слишком искусственным*. В действительности силы взаимодействия концов нитей между собой должны быть той же природы, что и их адгезия к поверхности, а значит, сопоставимыми с ней. В этом случае нити, собравшись в пучки возле выступов поверхности, могут оставаться сцепленными между собой и после удаления их от поверхности. Этот эффект, его последствия и возможные варианты борьбы с ними мы обсудим в разделе 4.

4. Адгезия без кластеризации волокон: функциональная значимость градиента материала адгезивной щетинки у насекомых

В этом разделе мы рассмотрим следующие вопросы: 1) вносит ли вклад в подходящее формирование контакта наличие градиента состава при сопоставлении с материалами без градиента? 2) понижает ли градиент тенденцию к кластеризации?

Для того чтобы проанализировать влияние градиентных свойств щетинок, была сконструирована простая, но всё же достаточно реалистичная модель. Для быстрого действия эта модель, учитывающая взаимодействие нитей, лишь частично включает в себя элементы моделей, описанных в разделах 2, 3. Массив первоначально параллельных между собой нитей прикреплен к жёсткому основанию. Градиент свойств отражён тем, что эластичность нитей (соответствующая сила F_{elastic}) непрерывно изменяется вдоль их длины и может варьироваться от очень мягкой до гораздо более сильной, практически вплоть до жёсткой. Продольная $\mathbf{F}_{jk}^{\parallel}$ и поперечная \mathbf{F}_j^{\perp} жёсткости щетинок воспроизводятся посредством взаимодействий между дискретными сегментами нитей,

$$\mathbf{F}_{jk}^{\parallel} = K^{\parallel}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k) \left[1 - \frac{(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k)^2}{dr^2} \right],$$

$$\mathbf{F}_j^{\perp} = K^{\perp}(2\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_{j+1} - \mathbf{r}_{j-1}).$$

Здесь мы ограничиваемся двумерной моделью, в которой векторы $\mathbf{r}_j = \{x_j, y_j\}$ определяют координаты начала сегмента с номером j , $k = j \pm 1$. Продольная сила $\mathbf{F}_{jk}^{\parallel}$ определяется потенциалом с двумя долинами, который стремится поддерживать расстояние между точками \mathbf{r}_j и $\mathbf{r}_{j\pm 1}$ постоянным, близким к равновесной длине сегмента dr . Поперечная сила \mathbf{F}_j^{\perp} удерживает \mathbf{r}_j близким к среднему между парой соседей $(\mathbf{r}_{j+1} + \mathbf{r}_{j-1})/2$, а также сохраняет угол между соседними сегментами равным примерно 180° .

Принимая во внимание обсуждавшиеся в разделах 2, 3 силы различной природы, которые используются животными, будем считать, что поверхность притягивает концы нитей суммой капиллярных и молекулярных сил.

Для повышения быстродействия расчётов по модели, рассматриваемой в этом разделе, притяжение задаётся простейшим способом, а именно: градиентом потенциала Морса (Morse) $U_{\text{vdw}}(r) = U_0(1 - \exp(-r/r_0))^2$ с некоторой физически разумной амплитудой $U_0 = 10 \text{ нН нм}$ и минимумом, расположенным на расстоянии $r_0 = 0,01 \text{ мкм}$ от поверхности. Как и выше, жёсткая фрактальная поверхность [24] имеет заданный спектр $C(q) = 1/q^\beta$, $\beta \approx 0,9$, и амплитуду шероховатости, которая сопоставима с расстоянием до минимума потенциала, $A = r_0$. Конечные части каждой из нитей взаимодействуют между собой. Поскольку это взаимодействие имеет ту же природу, что и притяжение к поверхности, для простоты его можно описать тем же потенциалом: $U_{\text{interact}}(r_{jk}) = U_0[1 - \exp(-r_{jk}/r_0)]^2$, с сопоставимыми характеристическими параметрами U_0 , r_0 . Для быстрого действия можно также ограничиться только взаимодействием ближайших соседей: $r_{jk} = |r_j - r_{j\pm 1}|$. Система на таких масштабах может рассматриваться как передемпфированная, так что уравнение движения включает в себя только первую производную по времени $\partial r/\partial t = F$. Суммарная сила в этом уравнении аккумулирует все описанные выше вклады, $F = F_{\text{elastic}} + F_{\text{vdw}} + F_{\text{interact}}$.

Схема модели представлена на рис. 10. Жёсткая поверхность показана жирными кривыми. Для выяснения функциональной роли градиента материальных свойств [28] рассмотрены три варианта массивов нитей: а) длинные жёсткие нити с короткими эластичными концами; б) длинные эластичные нити с короткими жёсткими концами, присоединёнными к пластине основания; в) относительно жёсткие нити с короткими эластичными фрагментами, присоединёнными к пластине основания. Все эти варианты показаны соответственно на рис. 10а, б и в.

Во всех случаях математически жёсткость каждой нити непрерывно изменяется вдоль вертикальной координаты и универсально описывается сглаженной ступенчатой функцией $\Theta(y) = 1/[1 + \exp(-(y - y_0)/\Delta)]$ с регулируемым положением y_0 и шириной Δ ступени. Функция Θ стремится к единице, когда $y \ll y_0$, и плавно убывает до нуля в противоположном пределе. Это позволяет провести моделирование всех описанных выше случаев, используя единый подход. Сегменты с целью визуальной иллюстрации их жёсткости были формально разделены на три группы: 1) с жёсткостью, близкой к максимальной; 2) с жёсткостью, составляющей менее половины от максимальной (область шириной Δ вокруг y_0); 3) с жёсткостью, составляющей менее 0,1 от максимальной. Области каждой из этих трёх условных групп сегментов показаны на рис. 10 градацией цвета: жёсткие, средние и мягкие сегменты обозначены чёрными, тёмно-серыми и светлыми кружками соответственно.

Численная процедура была организована следующим образом. Массив первоначально эквидистантных и параллельных ворсинок, присоединённых к горизонтальной базе, компьютерная процедура приводит в соприкосновение с численно генерированной фрактальной поверхностью. Нити искажаются вследствие взаимодействия как с фрактальной поверхностью, так и между собой. Из-за неоднородности поверхности многие нити притягиваются к одним и тем же её выступам и собираются в своеобразные жгуты. Для численного контроля удобно записывать зависящие от времени как искажения нитей, так и силы между ними. Когда эти величины выходят на стационарное поведение, процедура остано-

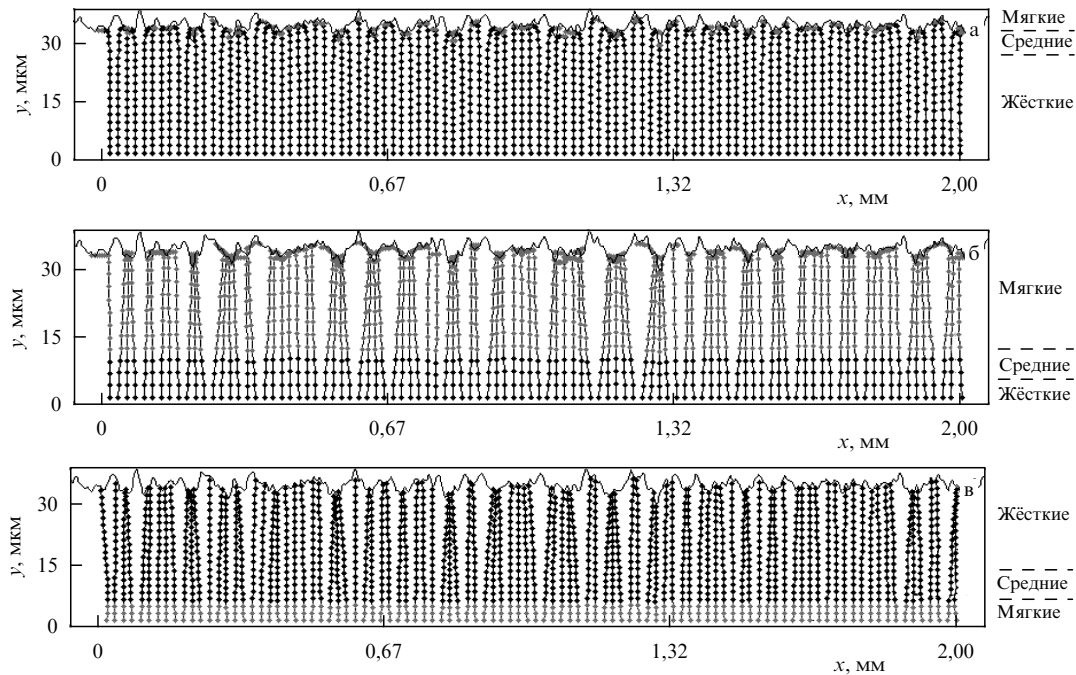


Рис. 10. Типичные конфигурации присоединённой к жёсткой поверхности снизу нитевидной структуры, контактирующей с фрактальной поверхностью сверху. Показаны три варианта массивов нитей: (а) длинные жёсткие нити с короткими эластичными концами; (б) длинные эластичные нити с короткими жёсткими корнями, присоединёнными к пластине основания; (в) относительно жёсткие нити с короткими эластичными фрагментами, присоединёнными к пластине основания. Жёсткие, средние и мягкие сегменты обозначены чёрными, тёмно-серыми и светлыми кружками соответственно.

вливается. Теперь можно формально "удалить" фрактальную поверхность и наблюдать, как система будет релаксировать к новому стационарному состоянию. Эта процедура позволяет определить, будет ли система возвращаться к начальному состоянию, и если будет, то как быстро. Когда фрактальная поверхность удалена, взаимное притяжение собранных в жгуты нитей противостоит только силам упругости, и всё дальнейшее поведение системы зависит от пространственного распределения и величины этих сил. В описанных выше трёх случаях распределение сил различно. Качественно результаты моделирования для этих случаев представлены на рис. 11, где показаны финальные конфигурации массивов при выходе на стационарное состояние после удаления фрактальной поверхности. Отчётливо видно различие между сильно кластеризованными системами как с длинными мягкими (рис. 11б), так и длинными жёсткими (рис. 11в) нитями с мягким креплением основания, с одной стороны, и системой, имеющей длинные жёсткие нити с короткими гибкими концами, с другой. Только последняя система практически полностью возвращается в исходное состояние.

Итак, чтобы получить возвращение к исходному состоянию, необходимо иметь достаточно гибкие окончания нитей и жёсткие, почти не деформируемые, их стволы по остальной длине. Это в принципе может приводить к сильной деформации окончаний и недостаточно большой суммарной силе адгезии. Чтобы проверить это утверждение, необходимо сравнить силы притяжения в трёх случаях: а, б и в. Эти силы были аккумулированы по всей системе в течение всего интервала присоединения (см. рис. 11). Максимальные силы в случаях а и б сопоставимы. Более того, потенциальный барьер, т.е. разница между максимумом силы вначале и её минимумом, при котором система достигает наибольшей адаптации к

поверхности, оказывается даже выше в случае а. Качественно такой эффект возникает потому, что гибкие окончания нитей слишком длинные в случае б, а в случае в длинных почти жёстких стержней, вращающихся вокруг гибких оснований, просто не удастся достичь достаточно хорошей адаптации к поверхности. В результате максимум силы притяжения в этом случае остаётся существенно меньшим, чем в случаях а и б.

Зависящую от времени информацию о деформациях щетинок удобно аккумулировать, введя массивы расстояний $\{dx_j\}$ между контактными окончаниями ближайших соседей, $dx_j = x_{j+1} - x_j$, $j = 1, 2, \dots, N_x$. Эволюция во времени каждого из таких массивов в течение всего цикла присоединения–отделения для всех трёх случаев (а–в) показана на рис. 12. Каждая линия на рисунке соответствует одному конкретному зависящему от времени расстоянию для пары ближайших соседей $dx_j = x_{j+1} - x_j$. Все расстояния нормированы на исходное расстояние в невозмущённом однородном массиве, так что $dx_j = 1$ при $t = 0$.

История процесса достаточно отчётливо просматривается из этих построений. Когда нити притягиваются к одному и тем же выступам на поверхности и формируют кластеры, расстояния между их концами приближаются к нулю, $dx_j = x_{j+1} - x_j \rightarrow 0$. В то же время расстояние между щетинками, принадлежащими разным кластерам, вообще говоря, увеличивается. Это расстояние должно коррелировать с характерным расстоянием между выступами поверхности, но из-за их случайного распределения (с характерным спектральным распределением) на фрактальной поверхности также остаётся случайным. Окончательно "замороженная" конфигурация определяется компромиссом между упругостью нитей, силой их притяжения к поверхности и силой их взаимного притяжения.

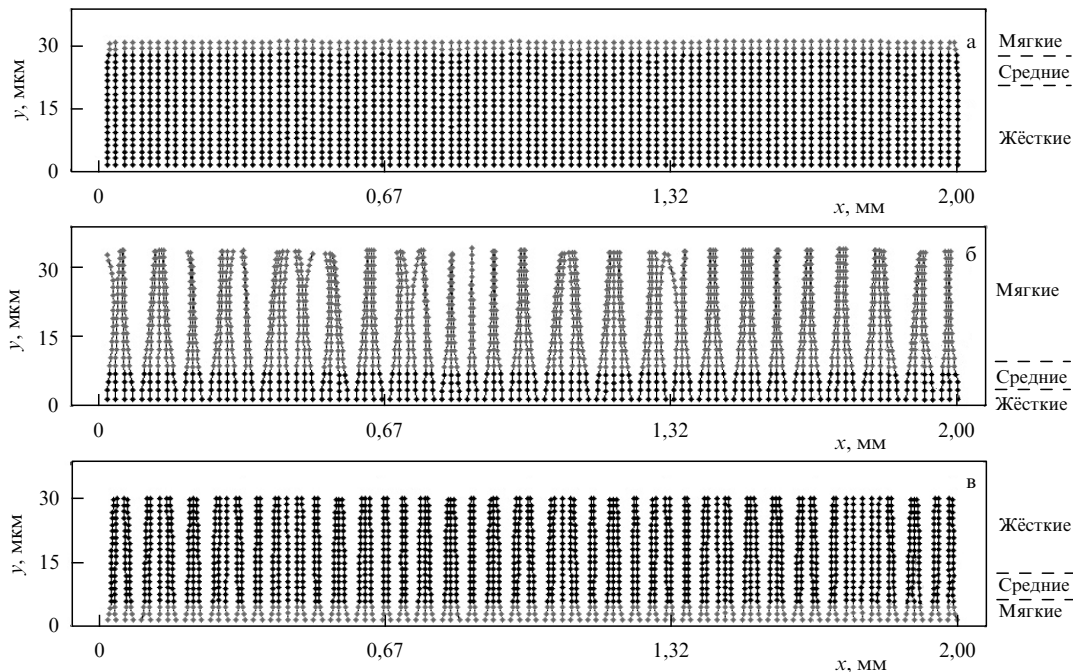


Рис. 11. Та же система, которая представлена на рис. 10, после отделения от фрактальной поверхности и достаточно длительной релаксации к стационарному состоянию. Хорошо видно различие между сильно кластеризованными системами, имеющими длинные эластические (б) или длинные жёсткие с мягким основанием (в) нити, и системой с короткими мягкими окончаниями (а), которая практически возвращается к исходной конфигурации.

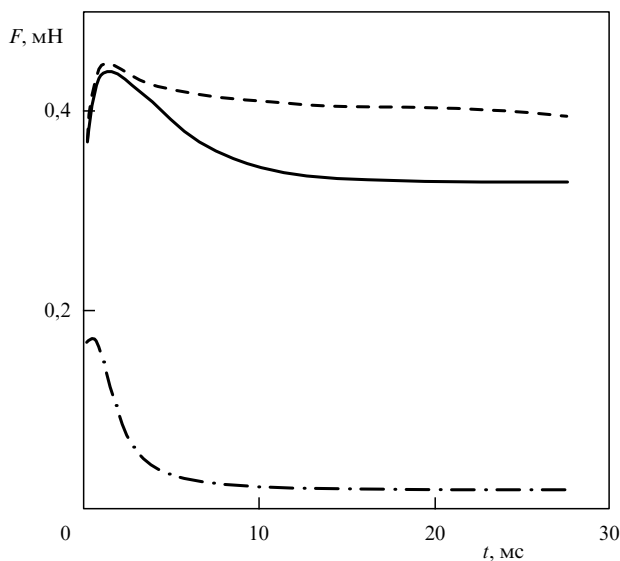


Рис. 12. Зависящие от времени суммарные вертикальные силы, развиваемые на протяжении всего периода присоединения к фрактальной поверхности первоначально невозмущённой системы, проинтегрированные по всей длине. Сплошная, штриховая и штрихпунктирная кривые соответствуют случаям а, б и в рис. 10 и 11.

После того как поверхность удалена, массив нитей релаксирует к новой стационарной конфигурации, которая определяется только компромиссом между упругостью и взаимным притяжением нитей. В пределе больших времён распределение нитей непосредственно не зависит от структуры поверхности и определяется в основном лишь жёсткостью и градиентами материалов. Однако распределение нитей может сохранять память о распределении выступов на поверхности, задающем

конкретную реализацию кластеров. Зависящий от времени процесс на этом этапе, который отчётливо виден на рис. 13, соответствует интуитивным ожиданиям. А именно, массив расстояний возвращается к своему первоначальному распределению только в случае, когда относительно жёсткие почти всюду щетинки имеют короткие гибкие окончания. Хотя рис. 13 и показывает эволюцию зависящих от времени массивов во всей полноте, однако из-за взаимного перекрытия множества отдельных траекторий трудно визуальное установить, с какой частотой конкретные расстояния встречаются в системе. Удобно обработать эти массивы, построив гистограммы распределений $P = P(dx)$ расстояний $dx_j = x_{j+1} - x_j$ для каждого момента времени. Эта информация представлена на рис. 14.

Описанный выше численный эксперимент ясно продемонстрировал, что градиентно устроенные нити с высокой жёсткостью почти по всей длине и относительно короткими мягкими окончаниями обладают преимуществом над нитями с другими комбинациями параметров. В частности, именно такие градиенты были недавно описаны для жуков [28], однако теперь мы можем предсказать, что аналогичные градиенты должны были развиваться в результате конвергентной эволюции в различных группах членистоногих.

5. Пространственная модель ворсистой структуры на подошве геккона. Функциональная значимость высокоспециализированной неоднородной геометрии

Опираясь на результаты, представленные в разделах 2–4, можно перейти к построению трёхмерной модели со сложной пространственной геометрией и неоднородно

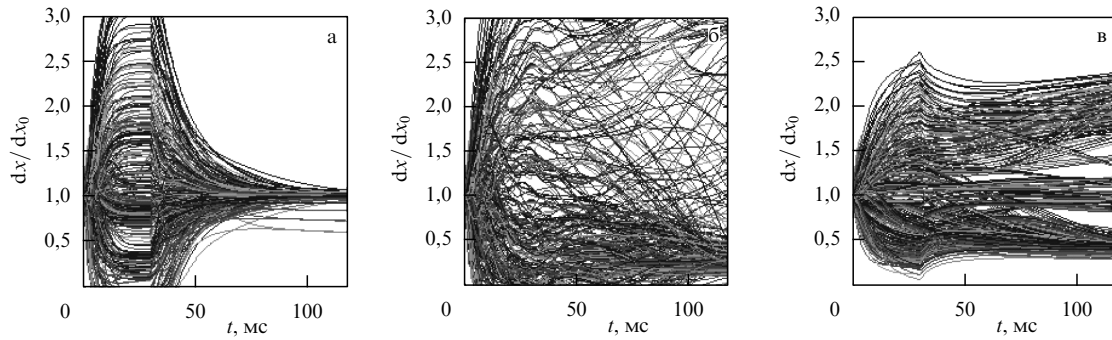


Рис. 13. Эволюция во времени массивов $\{dx_j\}$ расстояний, $j = 1, 2, \dots, N_x$, между окончаниями ближайших соседей $dx_j = x_{j+1} - x_j$ во время отдельных циклов присоединения–отделения для трёх случаев а–в, показанных на рис. 10–12. Все расстояния нормированы на исходный период невозмущённой системы: $dx_j = dx_0$ при $t = 0$. Каждая линия на рисунке соответствует расстоянию в одной паре соседей $dx_j = x_{j+1} - x_j$. В прикреплённом состоянии каждая система демонстрирует компромисс между притяжением нитей к набору выступов поверхности, взаимным притяжением и упругими силами. После отделения остаётся только баланс сил взаимного притяжения уже сформированных кластеров и упругости.

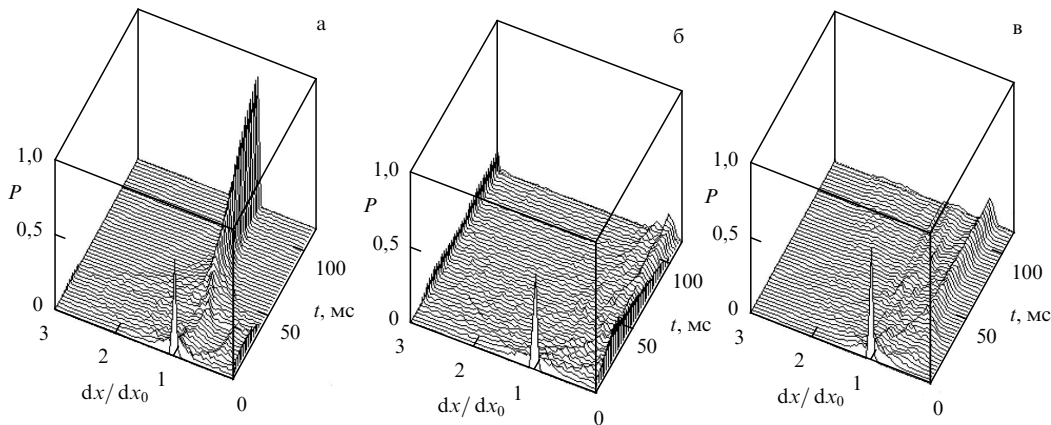


Рис. 14. Статистический анализ траекторий, представленных на рис. 11. Последовательности гистограмм показывают эволюцию во времени вероятности обнаружить расстояние между ближайшими соседями $dx_j = x_{j+1} - x_j$ в каждом конкретном интервале. Случаи а–в те же, что и на рис. 10–13. Начиная с невозмущённой конфигурации (уединённый пик вокруг $dx_j = dx_0 = 1$), все системы эволюционируют в контакте к относительно плавным распределениям с хорошо заметным максимумом при $dx \approx 0$, что соответствует кластеризации. После разрыва контакта с поверхностью лишь распределение, представленное на рис. а, возвращается к состоянию с уединённым пиком $P(dx)$ вокруг $dx_j = dx_0 = 1$, практически точно совпадающему с начальным.

распределёнными свойствами ветвей и постараться выяснить, в чём состоят преимущества такой структуры над структурой с плоской пространственной геометрией.

Численное описание системы выглядит следующим образом. Представим себе жёсткий стержень, первоначально направленный под некоторым углом $\varphi_{t=0} = \varphi_0$ к контактной поверхности и расположенный на некотором фиксированном расстоянии от неё. К стержню прикреплены более тонкие нити. Принципиальная структура модели показана на рис. 15. Для определённости зададим число нитей $N_x = 10$; каждую нить составим из 50 упругих сегментов, $N_y = 50$, каждый длиной $dR = 0,04$ мкм, так чтобы суммарная длина каждой нити соответствовала измеренной на СЭМ-изображениях (см. рис. 13). Нити, как обычно, имеют продольную (K^{\parallel}) и поперечную (K^{\perp}) жёсткости. (Ради определённости и простоты модели положим $K^{\parallel} = K^{\perp}$.) Деформация нитей порождает упругие силы, пропорциональные их жёсткости. Продольная сила F_{jk}^{\parallel} описывается потенциалом с двумя долинами, который сконструирован так, чтобы поддерживать расстояние между узлами \mathbf{R}_j и $\mathbf{R}_{j\pm 1}$ близким к равновесной длине сегмента dR : $F_{jk}^{\parallel} = -K^{\parallel}(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k)\{1 - [(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_k)/dR]^2\}$, где \mathbf{R}_j — положение

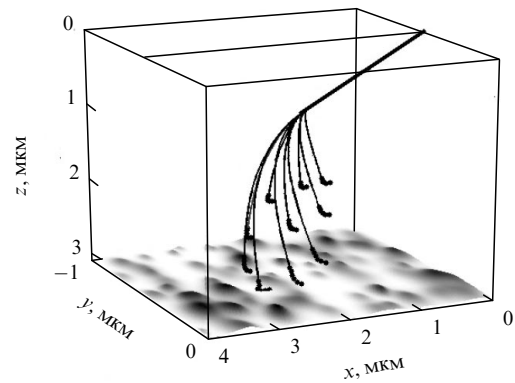


Рис. 15. Трёхмерная структура модельной системы. Жирная прямая линия соответствует корневому сегменту. Тонкие линии воспроизводят нитевидные щетинки. Чёрными кружками на концах щетинок отмечены особенно гибкие области, соответствующие лопаточкам. Фрактальная поверхность z , генерированная двумерным обобщением одномерной процедуры, показана поверхностью с градациями серого над плоскостью xy . Всё изображение перевернуто сверху вниз, чтобы не заслонить нити поверхностью сверху.

вектора в центре j -го сегмента, $k = j \pm 1$. Такая структура продольной силы выбрана с тем расчётом, чтобы эта сила была линейной при малых отклонениях, но нелинейной при больших отклонениях и могла подавлять их. Наличие этих двух (линейного и нелинейного) слагаемых порождает минимум эффективного потенциала при равновесной длине dR . Вторая сила, \mathbf{F}_j^\perp , является пропорциональной поперечным отклонениям и поддерживает \mathbf{R}_j близким к среднему между положением ближайших соседей, $\mathbf{F}_j^\perp = K^\perp(2\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j+1} - \mathbf{R}_{j-1})$.

Исходная конфигурация нитей сконструирована таким образом, чтобы воспроизвести, насколько это возможно, форму такой структуры у реального животного, показанную на рис. 2, 3. Каждая нить эластично присоединена к единому жёсткому корневому стержню (жирная прямая линия на рис. 15). Нити имеют различные длину и ориентацию. В результате их окончания сдвинуты по отношению друг к другу во всех трёх измерениях, как параллельно линии общего основания, так и в двух перпендикулярных направлениях. Для большего сходства с реальной системой начальное положение каждого сегмента нитей подбирается индивидуально. Результирующая конфигурация показана на рис. 15. Помимо прочего, она воспроизводит и реальную ориентацию окончаний (спатул) в начале процесса, которые развёрнуты в обратную сторону по отношению к корневому стержню и к их ориентации в состоянии присоединения к поверхности. Согласно основной гипотезе все эти компоненты структуры важны для её эффективности.

Важно отметить, что в реальной системе дополнительная степень свободы происходит от вращения относительно жёсткого корневого стержня. Для того чтобы воспроизвести это в модели, введена жёсткость по отношению к вращению B , которая стремится динамически поддерживать угол корневого стержня φ близким к некоторому затравочному значению φ_0 , хотя и позволяет ему вращаться. В первом приближении соответствующая сила пропорциональна разности $\varphi_0 - \varphi$: $f^\varphi = B(\varphi_0 - \varphi)$. При $B > 0$ она возвращает φ к φ_0 . В результате под совместным действием этой силы и остальных сил вся система вращается относительно исходного положения, когда нити притягиваются к поверхности или принудительно удаляются от неё.

Поверхность в трёхмерном пространстве генерируется действительной частью функции

$$Z(x, y) = A \iint dq_x dq_y B(q) \exp(iq_x x + iq_y y + \zeta(x, y))$$

со степенной спектральной плотностью $B(q) = 1/q^\beta$, $\beta \approx 0,9$. Притяжение к поверхности, как и ранее, определяется межмолекулярной силой, задаваемой потенциалом $U_{\text{vdW}}(r_j) = U_0[1 - \exp(-r_j/r_0)]^2$, где r_j — расстояние от окончания каждого j -го сегмента нити до поверхности $Z(x, y)$, $U_0 = 10$ нН нм, $r_0 = 0,01$ мкм, $A = r_0$. Гибкие и тонкие части каждой из нитей взаимодействуют между собой. Это взаимодействие имеет то же происхождение, что и их притяжение к поверхности,

$$U_{\text{interact}}(r) = U_0 \left[1 - \exp\left(-\frac{r_{jk}}{r_0}\right) \right]^2,$$

и сопоставимые по величине параметры U_0, r_0 .

Численный эксперимент организован следующим образом. Вся система располагается по отношению к поверхности так, чтобы ближайший к поверхности сегмент

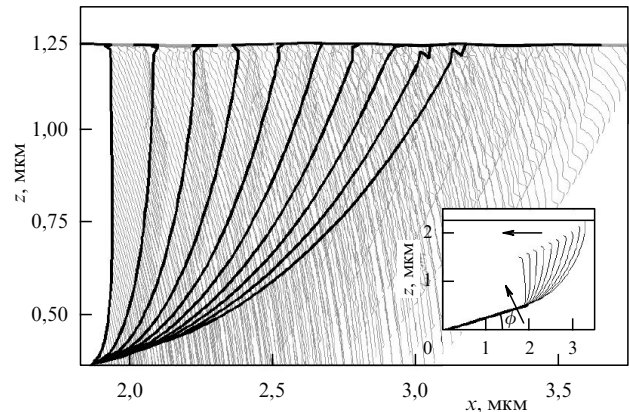


Рис. 16. Поведение редуцированной модели в плоскости xz . Нити и траектории точек соединения сегментов показаны чёрными и серыми линиями соответственно. Начальная конфигурация изображена на вставке. Стрелки показывают направления движения системы, возникающие вследствие совместного действия притяжения к поверхности и эффективной протяжки вдоль горизонтальной оси из-за вызванного им вращения.

оказался на расстоянии r_0 от неё и, притягиваясь к поверхности, постепенно потянул за собой остальные элементы системы в соответствии с уравнениями движения $\partial r_j / \partial t = F^j$, где полная сила включает в себя все взаимодействия системы, $F^j = F_{\text{elastic}}^j + F_{\text{vdW}}^j + F_{\text{interact}}^j$. Постепенно нити деформируются, притягиваясь к поверхности и друг к другу, и начинают тянуть за собой жёсткий стержень основания. Вся система поворачивается, вызывая тем самым не только приближение к поверхности вдоль вертикальной оси, но и протяжку уже зацепленных фрагментов вдоль горизонтальной оси. Легче всего этот эффект увидеть на упрощённой двумерной (2D) модели, в которой движение происходит только в xz -плоскости. В этом случае все мгновенные положения сегментов в дискретные моменты времени, а также траектории точек их соединения могут быть совместно изображены на плоскости. Такая картина для типичного сценария представлена на рис. 16, где мгновенные положения и траектории показаны чёрными и серыми линиями соответственно.

Вращение корневого стержня — ключевое отличие данного сценария от обычного сценария притяжения регулярной "щётки" нитей к поверхности. Как непосредственно видно из рис. 16, это вращение приводит к эффекту протяжки, которая не требует активного контроля со стороны животного (или искусственного механизма), а срабатывает автоматически благодаря уже зафиксированной отбором структуре системы. Ранее было экспериментально проверено и продемонстрировано теоретически, что такой продольный сдвиг усиливает адгезию тонких плёнок [1, 24]. Важно отметить, что в ходе такой протяжки спатулы, зацепившись за поверхность, постепенно разворачиваются в направлении, противоположном направлению движения. Этот разворот создаёт характерные конфигурации, отчётливо видимые на СЭМ-изображениях реальных щетинок геккона, постепенно присоединяющихся к поверхности (рис. 2ж), на которых спатулы обычно разворачиваются в направлении, противоположном их начальной ориентации (рис. 3д, е).

Взаимный сдвиг окончаний нитей в вертикальном направлении способствует предотвращению их кластеризации после отделения от поверхности. Структура

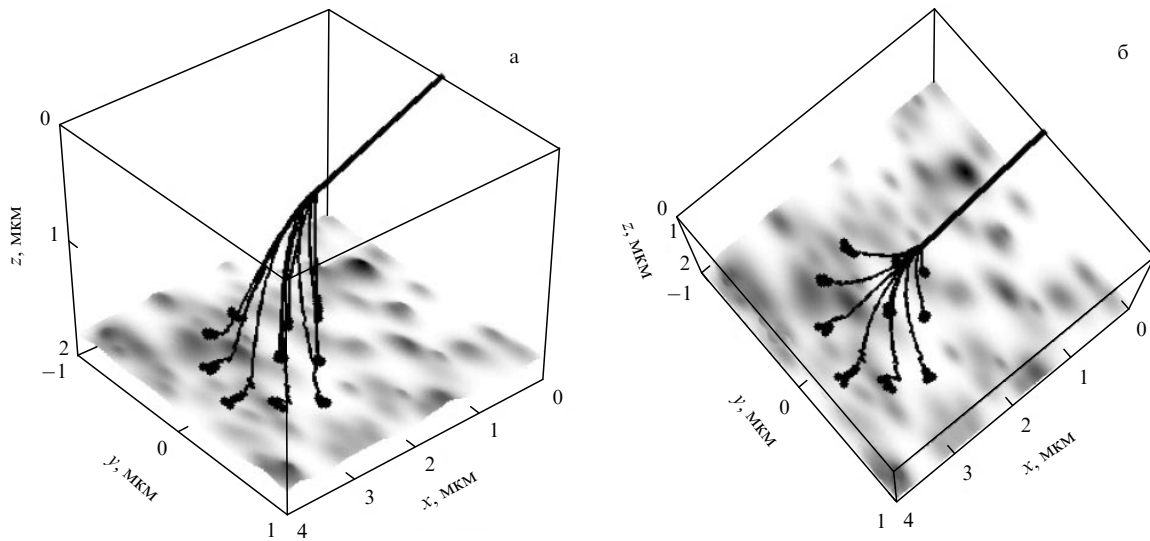


Рис. 17. Два вида одной и той же конфигурации модельной системы, присоединённой к поверхности, показанные в изометрической (а) и почти вертикальной (б) проекциях. Все обозначения те же, что и на рис. 15.

была оптимизирована естественным отбором так, что взаимно сдвинутые в пространстве нити высвобождают упругую энергию, запасённую не только в горизонтальном, но и в вертикальном направлениях, что способствует их разделению при удалении от поверхности. С другой стороны, при фиксированном угле наклона базового стержня φ_0 слишком большой сдвиг в вертикальном направлении может приводить к тому, что некоторые из нитей останутся слишком удалёнными от поверхности и вообще никогда не придут в соприкосновение с ней. Это порождает формально-математическую проблему оптимизации. Для решения этой проблемы следует сравнить поведение структуры нитей при наличии взаимодействия между нитями и его отсутствии. При этом удобно визуализировать зависящие от времени доли присоединённых нитей и угол φ , а также их финальные значения в зависимости от различной величины вертикального сдвига Δ . Конечно, в этой задаче зависимость угла φ от времени вполне предсказуема. Когда первая из нитей присоединяется к поверхности, угол φ начинает возрастать. Возвращающая сила $f^\varphi = B(\varphi_0 - \varphi)$ направлена против этого вращения и в принципе останавливает возрастание угла φ на некоторой равновесной величине в асимптотике $t \rightarrow \infty$. В этом пределе те из нитей, окончания которых слишком сильно сдвинуты в вертикальном направлении, так и остаются неприсоединёнными и не участвуют в формировании суммарной силы адгезии. Вместе с тем подключение к контакту дополнительных нитей увеличивает силу адгезии и способствует изменению окончательного угла φ при $t \rightarrow \infty$. Так что задача оказывается самосогласованной и результат определяется совокупностью всех сил, которые вступают в действие по мере развития процесса.

Весьма отличная от предыдущей картина, однако, возникает, когда нити взаимодействуют. Система демонстрирует ярко выраженный оптимум Δ в зависимости от величины сдвига. Основная причина этого заключается в том, что при очень малом сдвиге свисающие рядом и опускающиеся синхронно нити способны сформировать кластеры ещё до того, как они приблизятся к поверхности. Такая кластеризация уменьшает способность нитей

найти подходящее положение на поверхности и уменьшает силу адгезии. Как и ранее, в пределе $\Delta \rightarrow \infty$ нити, очевидно, практически не взаимодействуют между собой и ведут себя примерно так же, как и в отсутствие взаимодействия.

Важнейшим недостатком двумерной модели является то, что она не позволяет воспроизвести расстояние между нитями в ортогональном направлении y по отношению к плоскости вращения базового стержня xz . В то же время координата y становится чрезвычайно важной, когда все нити касаются поверхности. Во-первых, потому, что присоединение совместно с вращением приводят к развороту и эффективной протяжке спатул, а во-вторых, потому, что в двух измерениях они формально перекрываются, чего на самом деле не происходит. Это хорошо видно из рис. 17, на котором одна и та же конфигурация модельной системы, присоединённой к поверхности, показана в изометрической (рис. 17а) и почти вертикальной (рис. 17б) проекциях.

Разнесённые таким образом в пространстве ворсинки легко возвращаются в исходное положение после отделения от поверхности. Этот эффект, несомненно, препятствует кластеризации и совместно с иерархической организацией, видимо, играет важную роль в эффективности природной системы [51, 52]. В то же время эффект протяжки способствует улучшению контакта в закреплённом состоянии [24]. Следует подчеркнуть, что эти эффекты имеют чисто механическую природу и не нуждаются в регулировании после того, как система уже оптимизирована либо естественным отбором, либо с помощью моделирования в случае искусственных конструкций.

6. Адгезия, индуцированная сдвигом. Контактная механика биологических систем со спатулами

Среди множества проблем, связанных с поведением сложной адгезивной системы, остаётся непрояснённым то, как контакт спатулы с шероховатой поверхностью может быть генерирован сдвигом в том случае, когда её

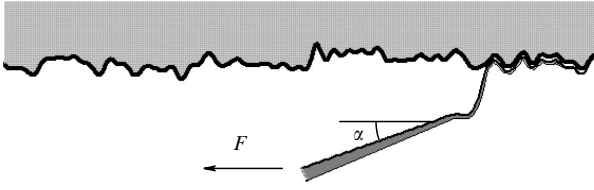


Рис. 18. Принципиальная схема численной модели. Окончание щетинки (спатула) рассматривается как эластичная пластина с переменной толщиной. Спатула приводится в контакт с шероховатой поверхностью под некоторым углом α и протаскивается в горизонтальном направлении силой F .

окончание не направлено первоначально вдоль поверхности. В этом разделе на основе численного динамического подхода мы обсудим связанные с данной проблемой следующие вопросы.

1. Какова роль градиента толщины в процессе формирования контакта?
2. Приводит ли сдвиг к улучшению контакта?
3. Существуют ли оптимальное расстояние или оптимальная сила сдвига для улучшения контакта?

Для моделирования адгезии, вызванной сдвигом, была использована модельная конфигурация, схематически показанная на рис. 18, на котором представлена двумерная проекция системы на вертикальную плоскость. Спатула рассматривается как эластичная пластина с переменной толщиной. Она приводится в контакт с шероховатой поверхностью под некоторым углом $0 < \alpha < \pi/2$ и протаскивается в горизонтальном направлении силой F .

Как обычно, притяжение к поверхности обусловлено силой Ван-дер-Ваальса, порождаемой потенциалом $U_{\text{vdw}}(r) = U_0[1 - \exp(-ar)]^2$, а жёсткая контактная поверхность фрактальна. Сила адгезии конкурирует с сопротивлением изгибу со стороны пластины. В соответствии с общей теорией упругости [62] упругая энергия пластины определяется следующим интегралом:

$$W_{\text{elastic}} = \frac{E}{24(1-\nu^2)} \iint dx dy h^3(x,y) \left\{ \left(\frac{\partial^2 z}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 z}{\partial y^2} \right)^2 + 2(1-\nu) \left[\left(\frac{\partial^2 z}{\partial x \partial y} \right)^2 - \frac{\partial^2 z}{\partial x^2} \frac{\partial^2 z}{\partial y^2} \right] \right\}, \quad (17)$$

где E — модуль Юнга, ν — отношение Пуассона, $\nu = 1/3$. Уравнение движения имеет вид

$$\gamma \frac{\partial z(x,y)}{\partial t} = - \frac{\partial W_{\text{elastic}}[z]}{\partial z} - \frac{\partial U_{\text{vdw}}[z]}{\partial z}, \quad (18)$$

где γ — диссипативная постоянная, задающая характерное время релаксации, $\gamma = 1$. Горизонтальной компоненте силы Ван-дер-Ваальса $F_{\text{vdw}}^x = -\partial U_{\text{vdw}}(z(x))/\partial x$ противостоит внешняя сила сдвига F^x . Когда F^x превышает суммарное сопротивление контактирующих (в действительности — просто искажённых силой F_{vdw}^x) сегментов, $\int dx dy F_{\text{vdw}}^x > |F^x|$, вся передемпфированная система начинает двигаться в горизонтальном направлении со скоростью, определяемой соотношением

$$\gamma \frac{\partial x}{\partial t} = F^x - \int dx dy F_{\text{vdw}}^x. \quad (19)$$

Уравнения (18) и (19) образуют полную систему, которая решается численно. Типичная найденная численно мгновенная конфигурация системы показана на рис. 19.

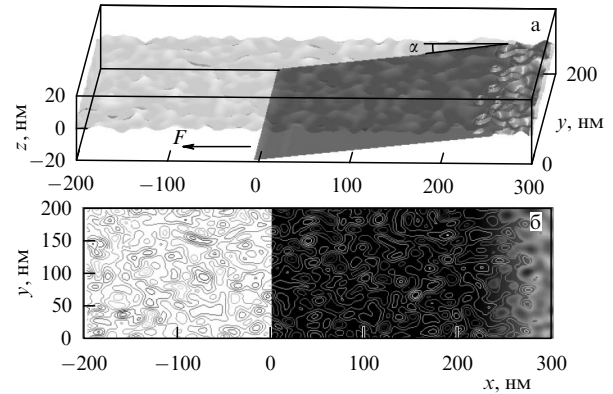


Рис. 19. (а) Типичная трёхмерная конфигурация эластичной пластины, полученная в произвольный момент времени. Жёсткий "потолок" показан полупрозрачной светло-серой верхней поверхностью. Мгновенная конфигурация гибкой пластины изображена градиентами серого (более тёмный цвет соответствует более глубоко расположенной координате z). (б) Контурное изображение шероховатой поверхности, на котором мгновенные контактные области видны непосредственно.

В принципе можно ожидать, что чем больше внешняя сила, тем быстрее происходит притяжение вращающейся пластины к поверхности. Однако если внешняя сила превысит некоторое критическое значение, то она может вообще сорвать начавшие закрепляться сегменты. В этом случае начинается скольжение, что, собственно, и порождает в данном случае проблему оптимизации. С целью решения задачи оптимизации было выполнено два набора численных экспериментов: при фиксированном угле наклона α и переменной силе F , а также при переменном угле с фиксированной силой. Результаты экспериментов представлены на рис. 20.

Численные эксперименты были организованы следующим образом. Поверхность $Z(x,y)$ генерируется как численный массив $(500, 200)$, которому соответствует область 500×200 нм, при этом подвижная пластина имеет размер 200×200 нм. Было проверено, что такой размер массива достаточен для самоусреднения всех вычисляемых величин. После этого один конец пластины приводится в контакт под заданным начальным углом α и оставляется в таком положении на некоторое переходное время t_0 , в течение которого спонтанно устанавливается реальное распределение участков контакта в этой области ($t_0 \approx 2$ мкс) при нулевой внешней силе, $F_{t < t_0} = 0$. При $t = t_0$ включается протяжка. Процесс продолжается до тех пор, пока фиксируемое время не достигнет экспериментально наблюдаемого времени ($t_{\text{max}} = 10$ мкс) формирования контакта стопой геккона [46].

Из рисунка 20 можно увидеть, что случайные реализации $Z(x,y)$ проявляются либо в незначительных колебаниях величин, либо иногда во взаимном пересечении качественно одинаковых монотонных кривых и не сказываются на общем результате. Как и ожидалось, большая сила приводит к более быстрым уменьшению угла наклона и притяжению пластины к поверхности, до тех пор пока сила не достигнет критического значения $F_{\text{crit}} \approx 20$ нН, после чего слабый горизонтальный дрейф $\delta x = x - x_0$ системы от её начального положения x_0 сменяется быстрым скольжением.

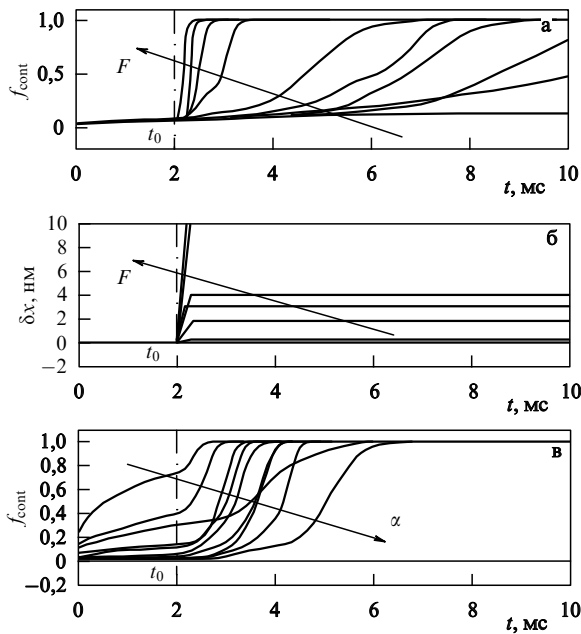


Рис. 20. Зависимости от времени находящейся в контакте доли площади f_{cont} пластины, нормированной на её полную площадь, при различных значениях силы протяжки при фиксированном $\alpha = 0,2\pi$ (а) и соответствующего горизонтального сдвига δx присоединённого конца пластины (б). Стрелками показано направление возрастания величины внешней силы. Жирные линии обозначают зависимости, соответствующие силам $F = 22 \text{ нН}$ и $F = 20 \text{ нН}$, большему критической силы F_{crit} , при которых происходит непрерывное скольжение пластины. Остальные кривые соответствуют силам, равномерно распределённым в интервале $0 < F < F_{\text{crit}}$. (в) Доля площади пластины, находящаяся в контакте, при фиксированной силе протяжки $F = 10 \text{ нН}$ и переменном угле $0,05\pi/2 \leq \alpha \leq 0,95\pi/2$. Стрелка показывает направление возрастания угла.

Представляется естественным, что, хотя животное неспособно точно оптимизировать силу горизонтальной протяжки, оно вполне может контролировать приближение суммарной силы закрепления к порогу, по достижении которого происходит срыв, и по возможности удерживает её близкой к этой пороговой величине, но не допускает её превышения. Критическая сила F_{crit} зависит от первоначально присоединённой области и, следовательно, F_{crit} коррелирует с начальным углом наклона α . На рисунке 20в показаны зависимости от времени величины той доли пластины, которая находится в контакте, при фиксированной силе протяжки $F = 10 \text{ нН}$ и переменном угле, изменяющемся в интервале $0,05\pi/2 \leq \alpha \leq 0,95\pi/2$. Стрелка показывает направление возрастания угла. Хорошо видно, что протяжка усиливает процесс притяжения даже при очень малых углах — доля присоединённых сегментов спонтанно возрастает и в переходный период $t < t_0$.

Суммируя результаты, можно отметить, что горизонтальная протяжка имеет определённые преимущества перед вертикальной нагрузкой. Возможно, именно поэтому большинство живых существ с ворсистым покрытием стоп так или иначе реализуют горизонтальную протяжку и окончания ворсинок на их стопах соответствующим образом адаптировались в виде "лопаточки". Численный эксперимент показывает, что этот подход срабатывает в широком интервале сил и начальных углов наклона пластинок к поверхности и в этом смысле он очень устойчив к вариациям реальных условий.

Таким образом, можно предположить, что искусственные адгезивы с формой окончаний в виде "лопаточки" будут иметь преимущество перед изотропными грибоподобными структурами. В комбинации с градиентом толщины (или жёсткости материала) [72], а также с нетривиальным распределением в трёхмерном пространстве самих нитей [73] это может быть наиболее удачной конструкцией для перспективных биологически инспирированных адгезивных систем.

7. Заключение

В настоящем обзоре дан анализ биологических микроструктур, обладающих высокими адгезией и трением, с акцентом на методы их численного моделирования и поиск параметров, определяющих оптимальную адгезию на поверхностях с различной топографией. Исходной простейшей моделью послужил массив вертикально закреплённых волокон (ворсинок), контактирующих с шероховатой поверхностью. Посредством варьирования геометрических и упругих свойств волокон было обнаружено, что существует оптимальная упругость, причём, в противоречии с наивными интуитивными предположениями, оказалось, что волокна должны быть достаточно жёсткими. Далее модель была развита посредством добавления дополнительной степени свободы — отклонения ворсинок в латеральном направлении по отношению к поверхности.

Эта степень свободы позволяет ворсинкам адаптироваться к локальной топографии поверхности: их искажение в горизонтальном направлении компенсирует фрактальную структуру в вертикальном направлении при различных амплитудах шероховатости, вплоть до достаточно больших. Пространственное перераспределение ворсинок имеет два существенных следствия. Во-первых, нарушение равномерного распределения существенно влияет на процесс отсоединения плёнки от поверхности, поскольку многие ворсинки держатся за один и тот же выступ поверхности и отрываются практически одновременно. Во-вторых, этот эффект может привести к кластеризации ворсинок: волокна могут остаться сцепленными между собой и после удаления их от поверхности. Притяжение концов нитей к одним и тем же выступам поверхности приводит к взаимному притяжению нитей с их последующей кластеризацией.

Одним из методов предотвращения кластеризации является введение градиентов жёсткости ворсинок — этот способ был выбран самой природой во многих биологических структурах. Влияние градиента жёсткости подробно исследовано в численных экспериментах, которые показали, что нити с высокой жёсткостью почти по всей длине, но с относительно коротким мягким окончанием обладают преимуществом перед нитями с другими возможными комбинациями свойств.

Другой способ предотвращения кластеризации, также "использующийся" во многих биологических структурах, состоит в создании иерархической структуры — трёхмерного пространственного распределения нитей в виде своеобразных гроздей, свисающих с общего относительно жёсткого корня. Этот вариант повышения эффективности системы был также рассмотрен в рамках численной модели. Являясь разнесёнными в пространстве, ворсинки легко возвращаются в исходное положение после отделения от поверхности. Это препятствует

кластеризации и совместно с иерархической организацией играет важную роль в эффективности природной системы, способствуя улучшению контакта в закреплённом состоянии.

К чисто механическим способам оптимизации адгезии относится "протяжка", которая приводит к оптимальному распределению ворсинок по поверхности. Эффект протяжки частично имеет место даже при строго нормальном контакте, с учётом латерального движения ворса. Как с биологической, так и с конструкционной (прикладной) точек зрения важно, что это чисто механический эффект, который не нуждается в регулировании.

Наконец, было проведено моделирование структуры окончания нити с характерной спатулой, спонтанно найденной конвергентной эволюцией, для самых разных видов, использующих адгезивное притяжение к шероховатым поверхностям. Был учтён ярко выраженный градиент жёсткости вдоль спатулы.

Главным вопросом в этом контексте являлось то, насколько эффект протяжки способствует лучшей адаптации спатулы к шероховатой поверхности. Обнаружено, что применение горизонтальной протяжки имеет определённые преимущества перед вертикальной нагрузкой. Возможно, именно поэтому большинство живых существ с ворсистым покрытием стоп так или иначе использует этот способ и соответствующим образом адаптировало форму окончания ворсинок к форме "лопаточки". Численные эксперименты показали, что этот подход срабатывает в широком интервале сил и начальных углов наклона пластинок к поверхности и в этом смысле является очень устойчивым к вариациям реальных условий. Принимая это во внимание, можно предположить, что искусственные адгезивы с такой формой окончаний будут обладать преимуществом перед изотропными грибоподобными структурами [72, 73].

Полученные результаты могут быть использованы для разработки перспективных биологически инспирированных адгезивных систем.

Список литературы

- Autumn K et al. *Nature* **405** 681 (2000)
- Autumn K et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **99** 12252 (2002)
- Cappella B, Dietler G *Surf. Sci. Rep.* **34** 1 (1999)
- Persson B N J *J. Chem. Phys.* **118** 7614 (2003)
- Persson B N J et al. *J. Phys. Condens. Matter* **17** R1 (2005)
- Scherge M, Gorb S N *Biological Micro- and Nanotribology. Nature's Solutions* (Berlin: Springer, 2001)
- Sitti M, Fearing R S, Adhes J J. *Adhesion Sci. Technol.* **17** 1055 (2003)
- Geim A K et al. *Nature Mater.* **2** 461 (2003)
- Northern M T, Turner K L *Nanotechnology* **16** 1159 (2005)
- Yurdumakan B et al. *Chem. Commun.* **2005** 3799 (2005)
- Persson B N J, Gorb S J. *Chem. Phys.* **119** 11437 (2003)
- Campolo D, Jones S D, Fearing R S, in *IEEE Nano August 12–14, San Francisco* (2003)
- Autumn K et al. *J. Exp. Biol.* **209** 3569 (2006)
- Filippov A E, Popov V L *Phys. Lett. A* **358** 309 (2006)
- Majidi C et al. *Phys. Rev. Lett.* **97** 076103 (2006)
- Filippov A E, Popov V J. *Phys. Condens. Matter A* **19** 096012 (2007)
- Gorb S *Attachment Devices of Insect Cuticle* (Dordrecht: Kluwer Acad. Publ., 2001)
- Gorb S N, Beutel R G *Naturwissenschaften* **88** 530 (2001)
- Gorb S N et al. *Integr. Comp. Biol.* **42** 1127 (2002)
- Creton C, Gorb S N *MRS Bull.* **32** 466 (2007)
- Voigt D, Schuppert J M, Dattinger S, Gorb S N *J. Insect Physiol.* **54** 765 (2008)
- Hui C Y et al. *J. R. Soc. Interface* **1** 35 (2004)
- Varenberg M, Pugno N M, Gorb S N *Soft Matter* **6** 3269 (2010)
- Filippov A E, Popov V L, Gorb S N *J. Theor. Biol.* **276** 126 (2011)
- Borodich F M, Gorb E V, Gorb S N *Appl. Phys. A* **100** 63 (2010)
- Jagota A, Bennison S J *Integr. Comp. Biol.* **42** 1140 (2002)
- Spolenak R, Gorb S N, Arzt E *Acta Biomater.* **1** 5 (2005)
- Peisker H, Michels J, Gorb S N *Nature Commun.* **4** 1661 (2013)
- Weis-Fogh T *J. Exp. Biol.* **37** 889 (1960)
- Weis-Fogh T *J. Mol. Biol.* **3** 648 (1961)
- Michels J, Gorb S N *J. Microsc.* **245** 1 (2012)
- Gorb S, Varenberg M, Peressadko A, Tuma J J. *R. Soc. Interface* **4** (13) 271 (2007)
- Vincent J F V *Composites A* **33** 1311 (2002)
- Barbakadze N, Enders S, Gorb S, Arzt E *J. Exp. Biol.* **209** 722 (2006)
- Klein M-C, Deuschle J, Gorb S J. *Comp. Physiol. A* **196** 659 (2010)
- Wang R Z, Weiner S J. *Biomech.* **31** 135 (1997)
- Fong H et al. *Mater. Sci. Eng. C* **7** 119 (2000)
- Perez Goodwyn P et al. *J. Comp. Physiol. A* **192** 1233 (2006)
- Gorb S N "Smooth attachment devices in insects", in Casas J, Simpson S J (Eds) *Advances in Insect Physiology: Insect Mechanics and Control* (Eds J Casas, S J Simpson) (London: Elsevier, 2008) p. 81
- Jagota A, Bennison S J *Integr. Comp. Biol.* **42** 1140 (2002)
- Hiller U Z. *Morphol. Tiere* **62** 307 (1969)
- Huber G, Gorb S N, Spolenak R, Arzt E *Biol. Lett.* **1** 2 (2005)
- Arzt E, Gorb S, Spolenak R *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **100** 10603 (2003)
- Schargott M *Bioinspir. Biomim.* **4** 026002 (2009)
- Varenberg M, Pugno N M, Gorb S N *Soft Matter* **6** 3269 (2010)
- Gao H, Yao H *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **101** 7851 (2004)
- Spolenak R, Gorb S, Arzt E *Acta Biomater.* **1** 5 (2005)
- Jagota A, Bennison S J *Integr. Comp. Biol.* **42** 1140 (2002)
- Sameoto D, Menon C *Smart Mater. Struct.* **19** 103001 (2010)
- Yurdumakan B et al. *Chem. Commun.* **2005** 3799 (2005)
- Kim T W, Bhushan B *Ultramicroscopy* **107** 902 (2007)
- Bhushan B, Peressadko A G, Kim T W *J. Adhes. Sci. Tech.* **20** 1475 (2006)
- Stork N E *Zool. J. Linn. Soc.* **68** 173 (1980)
- Stork N E *J. Nat. Hist.* **17** 583 (1983)
- Gorb S N *Proc. R. Soc. London B* **265** 747 (1998)
- Gorb S N *Attachment Devices of Insect Cuticle* (Dordrecht: Kluwer Acad. Publ., 2001)
- Tian Y et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **103** 19320 (2006)
- Niederegger S, Gorb S N *J. Insect Physiol.* **49** 611 (2003)
- Niederegger S, Gorb S N *J. Comp. Physiol. A* **192** 1223 (2006)
- Eimüller T, Guttman P, Gorb S N *J. Exp. Biol.* **211** 1958 (2008)
- Kendall K J. *Phys. D* **8** 1449 (1975)
- Landau L D, Lifshits E M *Theory of Elasticity* 2nd ed. (Oxford: Pergamon Press, 1981)
- Popov V L *Contact Mechanics and Friction. Physical Principles and Applications* (Heidelberg: Springer, 2010)
- Schargott M, Popov V, Gorb S J. *Theor. Biol.* **243** 48 (2006)
- Huber G et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **102** 16293 (2005)
- Kim S, Aksak B, Sitti M *Appl. Phys. Lett.* **91** 221913 (2007)
- Kim S, Sitti M *Appl. Phys. Lett.* **89** 261911 (2006)
- Kim S et al. *IEEE Nano* **08** 780 (2008)

69. Kim T W, Bhushan B *J. Adhesion Sci. Technol.* **21** 1 (2007)
 70. Murphy M P, Aksak B, Sitti M *J. Adhesion Sci. Technol.* **21** 1281 (2007)
 71. Chen B, Wu P D, Gao H J. *R. Soc. Interface* **6** 529 (2009)
 72. Filippov A E, Gorb S N *Beilstein J. Nanotechnol.* **5** 837 (2014)
 73. Filippov A E, Gorb S N *Interface Focus* **5** 20140065 (2015)

Biological microstructures with high adhesion and friction. Numerical approach

V.L. Popov⁽¹⁾, A.E. Filippov⁽²⁾, S.N. Gorb⁽³⁾

⁽¹⁾ Technische Universität Berlin, Institut für Mechanik,

FG Systemdynamik und Reibungsphysik, Sekr. C8-4, Raum M 122, Straße des 17. Juni 135, 10623 Berlin, Germany

⁽²⁾ A.A. Galkin Donetsk Institute for Physics and Engineering, National Academy of Sciences of Ukraine, R. Luxemburg str. 72, 83114 Donetsk, Ukraine

⁽³⁾ Department Functional Morphology and Biomechanics, Zoological Institute of the University of Kiel, Am Botanischen Garten 1–9, D-24098 Kiel, Germany

E-mail: ⁽¹⁾v.popov@tu-berlin.de, ⁽²⁾filippov_ae@yahoo.com, ⁽³⁾sgorb@zoologie.uni-kiel.de

During the process of biological evolution, many groups of organisms have developed highly effective adhesive mechanisms that allow them to attach to various kinds of surfaces of different physical nature and topography. The most famous instance of this is the foot of the gecko, but many similar examples are found in animals of different sizes and evolutionary lineages. In recent decades such adhesive structures have become the objects of intensive theoretical and experimental studies, partly due to research aimed at developing and producing artificial surfaces with similar adhesive properties. Here we present a review of research on biological structures with high adhesion and high friction. We focus our attention on one particular kind of structure: systems of elastic fibers and their interaction with rough surfaces. Other structurally similar systems are discussed as well.

Keywords: adhesion, friction, fibrous structures, gradient materials, bionics

PACS numbers: 68.35.Np, **87.10.–e**, 87.85.jf

Bibliography — 73 references

Received 8 November 2015

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **186** (9) 913–931 (2016)

Physics – Uspekhi **59** (9) (2016)

DOI: 10.3367/UFNr.2016.01.037677

DOI: 10.3367/UFNe.2016.01.037677