

行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

奈米彈性接觸之有限元素分析

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC94-2218-E-034-003-

執行期間：94年08月01日至95年07月31日

執行單位：中國文化大學機械工程學系

計畫主持人：吳俊仲

計畫參與人員：蘇幸吟

報告類型：精簡報告

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 95 年 10 月 25 日

行政院國家科學委員會補助專題研究計畫  成果報告  
 期中進度報告

## 奈米彈性接觸之有限元素分析

計畫類別： 個別型計畫  整合型計畫  
計畫編號：NSC — 93 — 2212 — E034 — 003  
執行期間：94年8月1日至95年7月31日

計畫主持人：吳俊仲  
共同主持人：  
計畫參與人員：蘇幸吟

成果報告類型(依經費核定清單規定繳交)： 精簡報告  完整報告

本成果報告包括以下應繳交之附件：

- 赴國外出差或研習心得報告一份
- 赴大陸地區出差或研習心得報告一份
- 出席國際學術會議心得報告及發表之論文各一份
- 國際合作研究計畫國外研究報告書一份

處理方式：除產學合作研究計畫、提升產業技術及人才培育研究計畫、  
列管計畫及下列情形者外，得立即公開查詢  
 涉及專利或其他智慧財產權， 一年  二年後可公開查詢

執行單位：中國文化大學機械系

中華民國 95 年 10 月 25 日

# 奈米彈性接觸之有限元素分析

## Finite Element Analysis on Nano-Scale Elastic Contact

計劃編號：NSC 94-2218-E034-003

執行期限：94 年 8 月 1 日至 95 年 7 月 31 日

主持人：吳俊仲 中國文化大學 機械工程學系

### 中文摘要

本研究使用有限元素法分析奈米球體與剛性半平面之彈性吸引接觸，球體的吸引力採用 Lennard-Jones potential、Derjaguin's approximation 與 Surface integration method。結果可以成功地得到奈米球體之各部應力。本研究方法可推廣至任意形狀之物體與固定形狀之剛體之彈性吸引接觸。

關鍵詞：奈米接觸、有限元素法、吸引接觸

### Abstract

Finite element method is used to analyze the elastic contact between a nano-scale sphere and a rigid half space. Lennard-Jones potential, Derjaguin's approximation and surface element integration are employed for the adhesive forces. The internal stress of the sphere can be obtained successfully. This method can be extended to the adhesive contact between a body of arbitrary shape a rigid body of fixed shape.

Keywords: Finite element method, nanocontact, adhesive contact

### 1. Introduction

目前奈米級的吸引接觸力分析，有三種方法，一是連續力學的方法，二是分子動力學的方法，三是有限元素法。

連續力學的方法多限於簡單幾何形態，而且僅能算出表面的力量。在球體之彈性吸引接觸的理論分析方面，1970 年，Johnson 等人提出的 JKR model [1]，1975 年

Derjaguin 等人提出的 DMT model [2]，1992 年，Maugis 使用 Dugdale model，找出整合兩種 model 的解析解[3]。在數值解方面，1997 年 Greenwood [4]提出球體吸引接觸的解。Feng[5]於 2000 年提出更詳盡且較佳數值解。

在分子動力學方面，目前已廣泛使用於奈米接觸上[6、7]，由於需要大量的計算，因此受到電腦性能的限制，僅能分析數個 nm 的物體，無法分析較大體積的吸引接觸問題。

在有限元素法方面，目前研究的進展不多。Johnson 等人[8]曾進行分析彈塑性吸引接觸，Liu 等人[9]也用來分析吸引接觸現象。但上述這些人都先使用連續力學的方法，先估計接觸面積或力量，再計算吸引力，所以是混合的模式，並非純脆的有限元素法。Cho 和 Park[10]用 Lennard-Jones Potential 和有限元素法分析計算球體與剛性平面之吸引接觸，算是第一個有限元素的分析，然而 Cho 與 Park 的方法必須將接觸面附近的格點分格成與分子一樣的大小，這個方法在計算 50 nm 以下的球體尚可，若計算較大的球體接觸，可能會產生問題，而且僅能分析與無限半平面的吸引接觸。

本研究針對有限元素法作研究，吸引接觸力使用 Lennard-Jones potential、Derjaguin's approximation 與 surface element integration [11]來分析奈米級的之彈性吸引接觸力。結果可推廣至任意形狀的物體與固定形狀的剛體接觸。

## 2. Adhesive Force

在奈米接觸時，需考慮分子之間的作用力。根據 Lennard-Jones Law，兩分子之間的位能為

$$w(s) = 4e \left[ \left( \frac{\sigma}{s} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{s} \right)^6 \right] \quad (1)$$

其中，

- $w(s)$  為兩分子之間的位能
- $e$  為位能之極小值
- $\sigma$  為位能為零之距離
- $s$  為兩分子之間的距離

由(1)式可推知，兩無限大半平面間的作用力如下式[7]：

$$p(h) = \frac{8\Delta\gamma}{3\epsilon} \left[ \left( \frac{\epsilon}{h} \right)^3 - \left( \frac{\epsilon}{h} \right)^9 \right] \quad (2)$$

其中，

- $p(h)$  為作用力
- $\Delta\gamma$  為 surface energy
- $h$  為兩平面之間的距離

根據 Derjaguin's approximation，如果兩平面距離短，曲率大時，(2)可近似為任兩平面之間的作用力。

根據 surface element integration[11]，如果作用的平面是傾斜時，可用下式校正：

$$p = p(h) \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z}{|\mathbf{n} \cdot \mathbf{e}_z|} \quad (3)$$

其中，

- $\mathbf{e}_z$  為作用力方向
- $\mathbf{n}$  為平面之向量

本研究的作用力採用(3)式。

在連續力學的分析中，Feng[5]的研究發現，作用力與 Tabor parameter  $\mu$  有關，

$$\mu = \left( \frac{R\Delta\gamma^2}{E^* \epsilon^3} \right)^{1/3}$$

因此，本研究將改變  $\mu$  的大小與 Feng[5]的結果比較。

## 3 Finite Element Analysis

本研究使用有限元素法分析，在有限元素法中，governing equation 可以寫成

$$KU = R = R_B + R_S + R_C - R_I$$

其中，

$K$  為 stiff matrix

$U$  為變形量

$R_B$ ， $R_S$ ， $R_C$ ， $R_I$  分別為：body force, surface force, concentrated force 與 initial force.

在本研究中，沒有 body force，沒有 concentrated force，沒有 initial force，只須考慮 surface force。兩平面間的 surface force 使用 Lennard-Jones Law，不會接觸；因此，governing equation 可寫成：

$$KU = R_S$$

$R_S$  由(2)(3)式來表示，式中的  $h$  為球體表面與無限半平面之垂直距離。

為求解上述有限元素的問題，本研究使用 ABAQUS/Standard V6.5 軟體。

(2)式的作用力為 surface force，固定向  $z$  的方向。因為並非於表面的垂直方向，在 abaqus 中必須使用 \*DLOAD 與 UTRACLOAD 的 user subroutine 來定義作用力的大小與方向。因為(2)(3)式的作用力與變形後的座標有關，因此分析時，必須使用 large deformation：\*STEP, NLGEOM，如此，方能使用變形後的座標來計算作用力。

本研究因為是 nonlinear 的分析，有收斂的困難，為避免發散，使用 \*STATIC，STABILIZE 指令，使用 quasi-static 分析，同時 \*STEP 的大小、\*CONTROLS 的收斂條件都必須適度放寬，方能得到解答。

## 4. Result

JKR [1]、DMT [2]與 Feng[5]的研究雖然稱之為球體接觸。但是若要用有限元素法來模擬，須假設球體為半球體，並非整個球體。邊界條件則需定義左邊邊界的  $r$  方向固定，上方的  $z$  方向逐部向下移動。

本研究使用的格點與邊界條件如圖 1 所示：在接觸面附近，格點較密集，元素的邊長約為數個  $\epsilon$  的大小，距離越遠，格點越疏。

本研究使用下列參數：

$$\nu = 0.3$$

$\varepsilon = 0.3 \times 10^{-9} \text{ m}$   
 $R = 0.03 \times 10^{-6} \text{ m}$   
 $\Delta\gamma = 30 \text{ mJ/m}^2$   
 $\rho = 7.5 \times 10^{-4} \text{ kg/m}^3$   
Tabor parameter 用  
 $\mu = 0.1 \text{ or } 0.5$

楊氏係數由前面參數求得：

$$E^* = \left( \frac{R\Delta\gamma^2}{\mu^3 \varepsilon^3} \right)^{1/2}$$

本研究使用高速網路計算中心的 IBM P690 電腦作計算。

在 ABAQUS 的程式中，本研究假設一個球體與一剛體平面接觸。由距離  $5\varepsilon$  慢慢接近。

由 quasi-static 的分析可以得到 Load-displacement 關係如圖 2，由圖中，可以與 Feng[5]的方法結果相近。但是因為 Feng[5]的分析是以點作用力作用於無限半平面的公式導出，本研究則真正分析球體形狀的物體受力，而且是 large deformation，因此本研究的結果較符合真正的情形。

應力分佈如圖 3、4。Feng[5]的研究無法得到的應力分佈，本研究使用有限元素法可以得到。結果發現，應力與 Hertz Contact 有相似之處，也有不同之處。

由上述結果發現，有限元素法提供了一個新的方法可以求得奈米接觸力。

## 5. Conclusion

本研究使用有限元素法，求得球體與剛體半平面奈米接觸之彈性吸引力分析。同樣的方法可以應用於任何形狀之物體與固定形狀之平面奈米接觸之彈性。

由於研究時間的限制，本研究僅針對 Derjaguin's approximation、surface integration method 與彈性接觸來作分析。未來可使用 ABAQUS/Explicit、Argento[12]的方法求出兩個不同形狀，且都是彈性變形的物體的奈米接觸現象。未來也可針對塑性變形等方面來分析，可進一步了解對微奈米接觸現象。

至於本研究方法的極限，未來則須與分

子動力學的方法作比較。

## 誌謝

本計畫感謝高速網路計算中心提供電腦設備。

## Reference:

1. Johnson, K.L., Kendal, K. and Roberts, A.D., "Surface energy and the contact of elastic solids", Proc. R. Soc. London, A. 324, pp. 301-313, 1971.
2. Derjaguin, B.V., Muller, V.M. and Toporov, Yu.P., "Effect of contact deformations on the adhesion of particles", Journal of Colloid and Interface Science, Vol. 53, No. 2, pp. 314-326, 1973.
3. Maugis, D., "Adhesion of spheres: the JKR-DMT transition using Dugdale model", J. Coll. Interf. Sci., Vol. 150, pp.243-269, 1992.
4. Greenwood, J.A., "Adhesion of elastic spheres", Proc. R. Soc. London, Vol. A 453, pp. 1277- 1297, 1997
5. Feng, J.Q., "Contact behavior of spherical elastic particles: a computational study of particle adhesion and deformations", Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, Vol. 172, pp. 175-198, 2000.
6. Vergeles, M., Maritan, A., Koplik, J. and Banavar, J.R., "Adhesion of solid", Physical Review E, Vol. 56, No. 3, pp. 2626-2534, 1997.
7. Zhang, H. and Ono, K., "Molecular dynamics study of dynamic contact and separation between tip and disk surface", Tribology International, Vol. 36, pp. 361-365, 2003.
8. Mesarovic, S.Dj. and Johnson, K.L., "Adhesive contact of elastic-plastic spheres", Journal of Mechanics and Physics of Solids, vol. 48, pp. 2009-2033.

9. Liu, T., Liu, G., Xie, Q. and Wang, Q.J., “An EFG-FE coupling method for microscale adhesive contact”, ASME, Journal of Tribology, Vol. 128, pp. 40-48, 2006.
10. Cho, S.S. and Park, S., “Finite element modeling of adhesive contact using molecular potential”, Tribology International, Vol. 37, pp. 763-739, 2004.
11. Bhattacharjee, S. and Elimelech, M., “Surface element integration: a novel technique for evaluation of DLVO interaction between a particle and a flat plat”, Journal of Colloid and Interface Science, Vol. 193, pp. 273-285, 1997.
12. Argento, C., Jagota, A. and Carter, W.C., “Surface formulation for molecular interactions of macroscopic bodies”, Journal of the Mechanics and Physics of Solids Vol. 45, No. 7, pp. 1161-1183, 1997

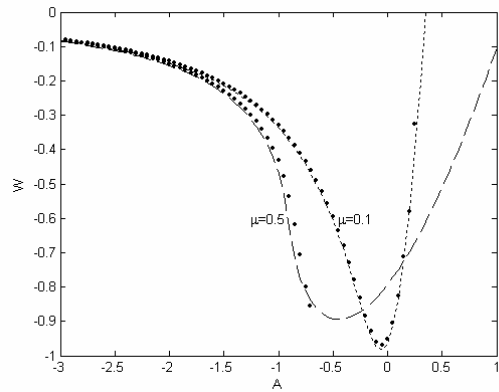


圖 2，A vs. W for  $\mu = 0.5, 0.1$

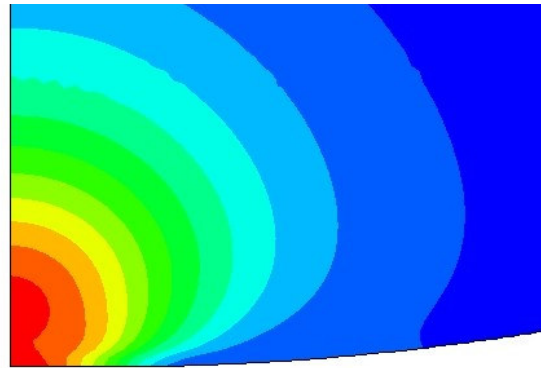


圖 3、應力變化， $\mu = 0.1, D = 0.25$

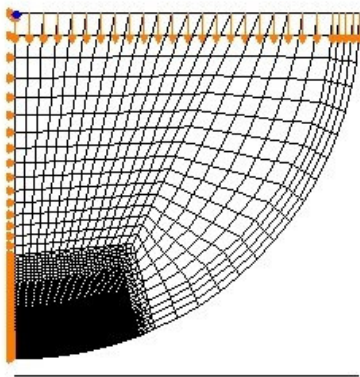


圖 1、格點分佈與邊界條件

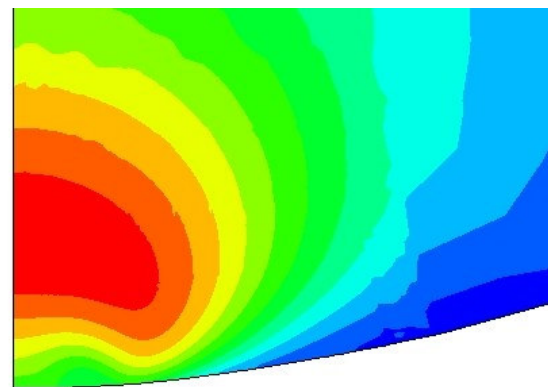


圖 3、應力變化， $\mu = 0.5, D = -0.75$

## 6. 計劃成果自評：

本計畫成果符合預期，找到一個新的研究方向。但由於本計畫核准的日期較晚（94年12月），執行期限較短，因此還有很多 case 要測試。預計本計畫執行期限結束後，將繼續測試更多的 case，整理後再發表。