

**Hauptreferent:**

*Prof. Dr.-Ing. U. Nackenhorst*

**Korreferent:**

*Prof. Dr.-Ing. W. Mathis*

**Doktorant:**

*M. Sc. Dipl.-Ing. (FH) T. Helmich*

**E**lektromechanisch gekoppelte Kontakt-  
modellierung auf Mikroebene

Von der Fakultät für Bauingenieur-  
wesen und Geodäsie der  
Gottfried Wilhelm Leibniz  
Universität Hannover

zur Erlangung des Grades  
eines

*Doktor-Ingenieur*

genehmigte Dissertation  
von

*M. Sc. Dipl.-Ing. (FH) T. Helmich*

Hannover 2007

Tag der Einreichung:  
27.06.2007

Tag der mündl. Prüfung:  
23.08.2007

**Institut für  
Baumechanik  
und Numerische  
Mechanik**

# Inhaltsverzeichnis

<b>Notationsverzeichnis</b>	<b>v</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1 Motivation . . . . .	1
1.2 Gliederung der Arbeit . . . . .	3
1.3 Funktionsweise des Atomkraftmikroskops . . . . .	4
<b>2 Kontinuumsmechanischer Hintergrund</b>	<b>9</b>
2.1 Kinematik . . . . .	9
2.2 Mechanische Spannungen . . . . .	11
2.3 Bilanzgleichungen . . . . .	12
2.3.1 Massenbilanz . . . . .	12
2.3.2 Impulsbilanz . . . . .	12
2.3.3 Drehimpulsbilanz . . . . .	13
2.3.4 Energiebilanz . . . . .	14
2.3.5 Entropiebilanz . . . . .	14
2.4 Konstitutive Gleichungen . . . . .	15
<b>3 Klassische Kontaktbeschreibung</b>	<b>17</b>
3.1 Unilateraler Kontakt . . . . .	17
3.1.1 Normalkontakt . . . . .	18
3.1.2 Tangentialkontakt . . . . .	21
3.2 Bilateraler Kontakt . . . . .	24
3.3 Weitere Behandlung der Kontaktbedingungen . . . . .	25
<b>4 Kräfte auf Mikroebene</b>	<b>27</b>
4.1 Einleitung . . . . .	27
4.1.1 Coulomb Kräfte . . . . .	28
4.1.2 Polare Bindungskräfte . . . . .	28
4.1.3 Kovalente Bindungskräfte . . . . .	28
4.2 van der Waals Potential zwischen Teilchen . . . . .	29
4.2.1 Keesom-Wechselwirkung . . . . .	31

4.2.2	Debye-Wechselwirkung . . . . .	31
4.2.3	Dispersionswechselwirkung . . . . .	32
4.2.4	Verallgemeinertes van der Waals Interaktionspotential . . . . .	32
4.3	van der Waals Potential zwischen Körpern . . . . .	33
4.3.1	Körper-Körper Interaktion . . . . .	33
	Teilchen-Fläche Interaktion . . . . .	34
	Fläche-Fläche Interaktion . . . . .	34
	Kugel-Fläche Interaktion . . . . .	35
	Weitere geometrische Interaktionen . . . . .	36
	Effektive Interaktionsfläche . . . . .	36
4.3.2	Verallgemeinerte Körper-Körper Interaktion . . . . .	37
<b>5</b>	<b>Finite Element Modellierung</b>	<b>41</b>
5.1	Mathematisches Anfangsrandwertproblem . . . . .	41
5.2	Variationsformulierung . . . . .	42
5.3	Lösung des quasistatischen nichtlinearen Problems . . . . .	43
5.3.1	Linearisierung . . . . .	43
5.3.2	Diskretisierung . . . . .	45
5.4	Lösung des transienten nichtlinearen Problems . . . . .	46
5.4.1	Ortsdiskretisierung . . . . .	47
5.4.2	Zeitdiskretisierung . . . . .	47
5.5	Modellierung der Dimensionsadaptivität . . . . .	50
5.5.1	Das Balkenelement . . . . .	51
5.5.2	Das Übergangselement . . . . .	53
5.5.3	Das Volumenelement . . . . .	56
5.5.4	Das Kontaktelement . . . . .	56
<b>6</b>	<b>Kontaktmodellierung auf Mikroebene</b>	<b>57</b>
6.1	Quasistatische Finite Element Modellierung . . . . .	57
6.1.1	Linearisierung . . . . .	59
6.1.2	Diskretisierung . . . . .	60
6.1.3	Assemblierung und Integration . . . . .	61
6.1.4	Reduktion des numerischen Aufwandes . . . . .	63
6.1.5	Numerisches Lösungsverhalten . . . . .	66
6.1.6	Numerische Beispiélé . . . . .	68
	Diskretisierungsabhängigkeit . . . . .	68
	Vertikale Annäherung . . . . .	72
	Messung der Oberflächengeometrie . . . . .	75
6.2	Transiente Finite Element Modellierung . . . . .	80
6.2.1	Jump-to-Contact . . . . .	80

6.2.2	Dissipative Effekte . . . . .	84
<b>7</b>	<b>Elektromechanische Kopplung</b>	<b>87</b>
7.1	Einleitung . . . . .	87
7.2	Grundgleichungen des elektrischen Feldes . . . . .	90
7.3	Schwache Kopplung . . . . .	92
7.4	Projektion der Kräfte und Verschiebungen . . . . .	95
7.5	Numerische Beispiele . . . . .	98
<b>8</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>103</b>
<b>A</b>	<b>Linearisierungen</b>	<b>107</b>
A.1	VAN DER WAALS Kontaktkraft . . . . .	107
<b>B</b>	<b>Software</b>	<b>109</b>
B.1	Parallelisierung mit OpenMP . . . . .	109
B.2	Kopplung mit MpCCI . . . . .	111
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>114</b>
	<b>Index</b>	<b>123</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>125</b>
	<b>Curriculum Vitae</b>	<b>129</b>
	<b>Forschungs- und Seminarberichte, IBNM</b>	<b>130</b>