

研究種目：基盤研究(C)一般

研究期間：平成 19 年度～平成 20 年度

課題番号：19560079

研究課題名（和文） ナノメカニクスによるナノ凝着と接合のメカニズム解明

研究課題名（英文） Analysis of nano-adhesion and joining using nanomechanics

研究代表者 古口 日出男

## 研究成果の概要：

本研究では、異方性弾性体におけるナノメカニクスを構築すると共にナノレベルの凝着、剥離および接合理論を構築し実験的に検証すること、ナノレベルにおける接合体の特異応力場の存在を明らかにすることを目標に研究を行った。異方性体のナノレベルの凝着解析を行うため、半無限異方性弾性体の表面に表面応力および表面弾性係数を考慮したグリーン関数を導出した。表面に原子を置いた際の材料表面の変位場を分子動力学で求め、その分布を表面グリーン関数で得られた変位場と比較した結果、両者はよく一致した。一般に弾性論はナノレベル以上有効であると言われているが、表面の力学的特性を考慮した理論を用いるとごく表面の変位場も分子動力学法に匹敵する精度で計算できることを示した。表面グリーン関数の有効性を検証するため、この関数をナノ接触解析に適用した。このグリーン関数を用いた圧子の押し込み量に対する力の関係は分子動力学による結果とほぼ一致することがわかった。このことは通常のナノインデンテーション試験における圧子の押し込み量-力の関係から得られる材料の弾性特性評価でよく言われるサイズ効果を説明できることを示している。異種材量の接合のメカニズムを探るため、現在ナノレベルの接合体における特異応力場の存在を確認するためにプローブ顕微鏡によるデジタル画像相関法による接合界面端におけるひずみ計測を行っている。一方、二次元および三次元異材接合体の特異応力場の応力解析を行い、接合体の強度評価を行う上で必要な特異応力場の強さを求める解析および実験を行った。今回は二枚の厚さ0.6 $\mu$ mのシリコン板を接着剤で接合した試験片に外力を加える界面の剥離実験を行い、その強度評価を行った。接着剤の厚さを50, 100, 150nmと変えた試験片に対して強度を調べた結果、厚いほど強度は低下した。これは特異応力場の強さと接着層厚さの関係と一致するものである。

## 交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
平成 19 年度	2,700,000	810,000	3,510,000
平成 20 年度	800,000	240,000	1,040,000
年度			
年度			
年度			
総計	3,500,000	1,050,000	4,550,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・機械材料・材料力学

キーワード：連続体力学

## 1. 研究開始当初の背景

ナノテクノロジーの発展に伴い、カーボンナノファイバー、ナノマテリアル、MEMS、量子ドットの研究が盛んに行われ始めていた。そして、ナノサイズ構造物の研究が行われつつあった。ナノサイズ構造物では、体積に対する面積の割合が増大し、表面の物体の力学的特性に対する影響は大きくなる。これまでの弾性解析の結果は応力解析の対象となる物体の大きさに関係なく適用できるものであり、非常に有用性がある。しかし、上述のように表面の影響を考慮した応力解析の必要性もある。当研究者は応力解析に物体のサイズ効果を導入するため表面エネルギー、表面応力を考慮したナノメカニクス連続体力学の研究を行っている。海外では表面に関する研究は古くから行われており、表面応力については1920年台にGibbsにより初めて固体表面の存在を指摘されているにもかかわらず、十数年前まではあまり研究されていなかった。しかし、この十年は活発に研究されるようになってきた。Ibach(1997)、Haiss(2001)、Muller(2004)らにより表面応力に関する幾つかの研究レビューが出版され、非常に多くの研究が行われていることがわかる。しかし、多くはデバイス関係の研究で材料力学、弾性論に表面応力を考慮した解析は非常に少ない。この1、2年で弾性論による解析に表面応力を陽な形で用いた論文が発表され始めた程度である。

## 2. 研究の目的

(1)固体の表面エネルギー・表面応力は測定することが困難な量であり、特に表面エネルギーは、脆性破壊における新表面形成に要したエネルギーとして求めることが出来る。本研究では、表面応力と表面エネルギーを考慮した理論解析で得られた、従来のJRK理論(Johnson、Kendall、Roberts)を包含する新しい凝着理論の式を用いて、実験的に凝着力と物体の接近量の関係を調べることにより、表面エネルギーや表面応力を求めることを目指す。マクロに見た接着・接合もミクロに見ると凝着による力で結合している場合もあると考え、ミクロ領域の接合を凝着の観点からとらえ直し、剥離力の理論的解明を行うことを目標とする。

(2)接合体界面端部に発生する特異応力場の支配領域のサイズ限界を新しい境界条件を用いることにより得られる可能性がある。そこで、表面応力を考慮した接合体の解析手法を導くことを目標とする。これにより、当研究者が提案するナノメカニクス連続体

力学の構築をさらに進める。

## 3. 研究の方法

研究は理論解析に基づく数値解析および実験から成る。

(1)理論解析および数値解析では、凝着理論を異方性材料に拡張することを目指して研究を行った。初め、等方性弾性体に対する凝着解析を境界要素法で行った。この解析ではファン・デル・ワールス力が凝着する二面に作用するものとした。次に、表面応力が存在する異方性半無限三次元弾性体の表面に集中荷重が作用する場合の解をStroh形式で導出し、これをグリーン関数として、様々な形状の圧子との接触解析を行った。現在、この関数を用いて分子間力が表面に作用する解析を行っている。これによる異方性材料の凝着理論の基礎式を導出する。

(2)境界要素法を用いてサブマイクロメートルオーダー寸法の要素を用いた接合体の応力解析を行った。

(3)異方性二次元接合体の界面および表面に表面応力および表面弾性特性を考慮した応力解析の基礎式の導出を行った。

(4)プローブ顕微鏡を用いて凝着力の測定を行い、表面エネルギーを導出した。

## 4. 研究成果

(1)ファン・デル・ワールス力による凝着解析を行った結果を以下に示す。図1が解析モデルで、図2が凝着による表面の変形状態、図3が凝着力 $P$ と凝着半径 $a$ の関係である。この研究より以下のことを示した。

①円柱-平面モデルの凝着・剥離解析から、凝着・剥離挙動を確認することができ、さらにその結果から接触半径および最大付着力を求めることで、他研究者の接触理論と比較し、本解析の有効性を示した。

②表面粗さを考慮した凹凸のある面-平面モデルの凝着・剥離解析から、凹凸のある面を押し下げた場合、原子間距離である200[pm]を保ちながら円柱が凝着し、それに伴い接触半径が大きくなるのが確認できた。また、凹凸のある面と平面にHertzの接触圧力に近い表面力が作用した。さらに、最大付着力、接触半径、表面力、平均変位量を求めることで、凹凸の数と最大付着力の関係は比例関係になり、凹凸の数が多いほど、凹凸のある面を押し下げた場合は凹凸のある面-平面間の距離が大きい位置で凝着し、凹凸のある面を押し上げた場合は剥離しにくいことが分かった。

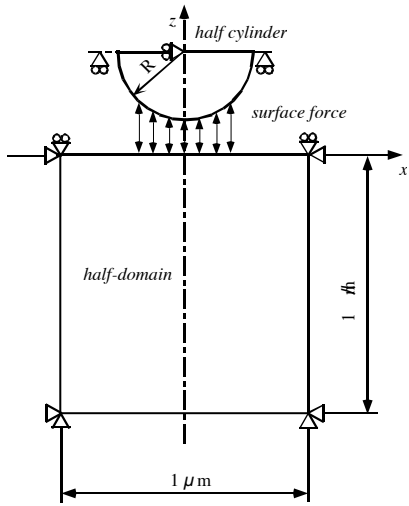


図1 解析モデル

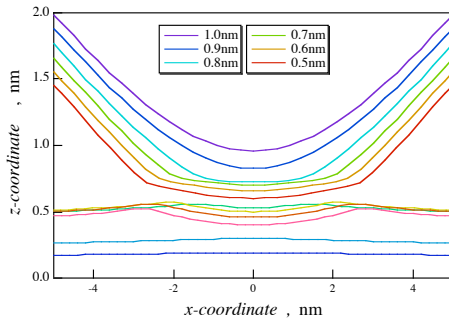


図2 表面間距離毎の変形状態

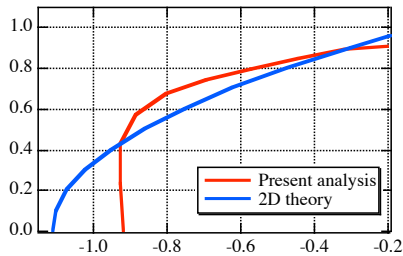


図3 無次元凝着力  $P$  (横軸) に対する無次元凝着半径  $a$  (縦軸) の関係(文献⑥)

(2) 表面応力および表面弾性特性を考慮した表面グリーン関数(文献①)、そのグリーン関数を用いた接触解析の結果を以下に示す。導出した表面グリーン関数を以下に示す。

$$\mathbf{u}(r, \theta_0, x_3) = -\frac{1}{2\pi^2} \text{Im} \int_0^\pi \mathbf{A} \Phi t d\theta$$

ここで、変数、パラメータの詳細の説明は、文献①を参照のこと。この関数により得られた表面に垂直な力が作用する場合の表面の  $z$  方向変位を図4に、分子動力学により表面の原子の上の一つの原子を置いた時に得られ

た表面の  $z$  方向変位の分布を図5に示す。両者は、非常に良く一致しており、表面応力を考慮した表面グリーン関数は表面効果を反映し、分子動力学に匹敵する変位場を連続体で力学の範疇で表せるものと言える。

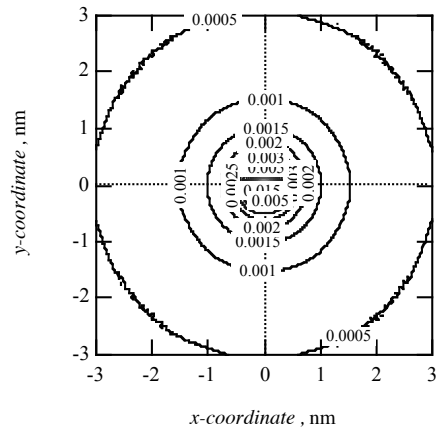


図4 表面グリーン関数による  $z$  方向変位分布

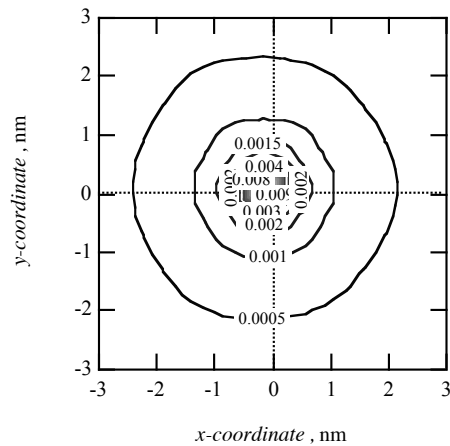


図5 表面に原子1個を置いた際に得られた表面における  $z$  方向変位 (分子動力学)

表面グリーン関数を用いて接触問題を解いた結果、以下のことがわかった。

- ① Au(111)では表面応力および表面弾性定数を考慮すると材料が見かけ上硬くなる。そして、本研究で提案した方法を用いることにより、ナノレベルにおける材料特性の評価を高精度に行えることがわかった。
- ② Lilleodden らの分子動力学法を用いた接触解析と比較した結果、表面応力および表面弾性定数を考慮することにより分子動力学の結果と合ってくるということがわかった。
- ③ 4種類の圧子について、圧子を  $z$  軸周りに回転し、一定荷重に対する圧子押し込み量を調べた。その結果、Elliptic と Knoop 圧子については圧子押し込み量に異方性の影響が現れたが、Vickers と Berckovich には表れなかった。このことより材料異方性の影響を調べ

るには、長さの比率が異なる圧子を用いる方がよいと言える。また、ナノレベルの接触では表面応力および表面弾性定数を考慮することで材料異方性の影響が小さくなることがわかった。

④さらに、平面ひずみ状態に対する表面応力と表面弾性定数を考慮した異方性半無限弾性体の表面グリーン関数を導出した。ここでは半無限体の表面に段差がある体心立方晶の Fe における段差近傍の変位場を弾性論により求め、分子動力学法で求めた変位場と比較し、表面弾性定数を考慮した方が分子動力学法の解析結果に近いことを示した。これにより弾性理論によるナノオーダー解析の可能性を示した。異方性体の表面における力学特性を考慮した解析を行うことは、弾性論の適用範囲を拡大する上で意味がある。さらに結晶界面における界面応力および界面剛性率を考慮した解析を行っていくにより、種々の欠陥と結晶粒界との関係などがナノレベルで解明できると考えられる。

(3) 接合体の解析を行って得られた主な結果を以下に示す。

初めに、中間層を有する三次元異材接合体の熱残留応力の特異応力場に関する結果を示す。

①固有変位ベクトルおよび境界要素法から得た特異応力場の分布を  $\theta=90^\circ$ ,  $\phi=45^\circ$  で無次元化を行い、球面座標上にプロットした。両者を比較した結果、よく合っていることがわかった。

②三次元接合体角部を原点とする球座標系で界面( $\theta=90^\circ$ )と  $\phi$  方向で自由表面との交点は応力特異線上の応力特異性を有している。このことを考慮して応力場の角度依存関数を定義し、三次元接合体の角部における特異応力場を表す必要があることがわかった。

③ $\phi$  方向の特異応力場の強さと  $r$  方向の特異応力場の強さの積により三次元の特異応力場の強さを決定した。

④二次元接合体の特異応力場の式で  $\phi=45^\circ$  における応力分布を、ある程度近似できることがわかった。

つぎに、中間層を有する三次元異材接合体の中間層(Material 2)のヤング率を様々に変え、接合体界面角部における特異応力場の応力分布およびその強さを求め、強さと三次元 Dundurs パラメータの関係性を調べた結果を示す。

①特異応力場の応力を中間層(Material 2)の熱応力で無次元化し、その分布から特異場の強さ  $K_{i\theta\theta}$  を算出した。その結果、特異応力場の強さ  $K_{i\theta\theta}$  および  $K_{2\theta\theta}$  は三次元 Dundurs パラメータ  $\alpha_{3D}$  の増加に伴い増加するのに対し、対数特異性の強さ  $K_{3\theta\theta}$  および  $K_{4\theta\theta}$  は減少することがわかった。

②中間層(Material 2)のヤング率を種々に変えた場合、三次元 Dundurs パラメータ  $\alpha_{3D}$  に対して特異場の強さ  $K_{i\theta\theta}$  を整理すると、中間層(Material 2)のポアソン比および線膨張係数が同じ場合は同一曲線上にプロットが並ぶ。一方、中間層(Material 2)の物性が異なる場合でもポアソン比および線膨張係数を含む適当な定数で整理することにより、特異場の強さの分布を同一曲線で表すことは可能である。

③三次元 Dundurs パラメータ  $\alpha_{3D}$  と特異場の強さ  $K_{i\theta\theta}$  の関係を用いて、本研究で調べた範囲内の任意の材料特性を有する組み合わせに対し、特異場の応力分布を計算することが可能である。

(4) 固体の表面エネルギーの評価

プローブ顕微鏡で金蒸着した面とプローブ短針との間の凝着力を測定し、表面エネルギーを JKR 理論に基づいて評価した。その結果、表面エネルギーの値が測定箇所でき大きく変化した。表面の形状、清浄度によるものと考えられる。これについてはさらに研究を進める必要があると思われる。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計 10 件)

① Hideo KOGUCHI, SURFACE GREEN FUNCTION WITH SURFACE STRESSES AND SURFACE ELASTICITY USING STROH'S FORMALISM, Transaction of ASME, Journal of Applied Mechanics, 75, 104-115, 平成 20 年(2008), 有

② 古口日出男, 浮須和樹, 三次元 FEM 固有方程式によるピエゾ接合体の特異性オーダー解析, 日本機械学会論文集 A 編, 74, 1076-1086, 平成 20 年(2008), 有

③ 古口日出男, 谷口昂, 三次元異材接合体における熱残留応力の特異場の特性, 日本機械学会論文集 A 編, 74, 864-872, 平成 20 年(2008), 有

④ Hideo Koguchi, Takashi Taniguchi, Stress Singularity of Thermal Stresses in Three-Dimensional Bonded Structures with an Interlayer, Key Engineering Materials, 358-387, 573-576, 平成 20 年(2008), 有

⑤ Hideo KOGUCHI, Shinya NAKAMURA, Intensity of Singularity for Residual Thermal Stresses at a Vertex in Three-Dimensional Bonded Joints with an Interlayer (For Various Young's Moduli in the Interlayer), Journal of Computational Science and Technology, 2, 468-477, 平成 20 年(2008), 有

⑥ 古口日出男, 畑田将伸, 二次元境界要素法によるファンデルワールス力を考慮したナノサイズ領域の接触・凝着解析, 計算数理工学論文

集, 7, 185-190, 平成 20 年(2008), 有  
⑦Hideo KOGUCHI and Chonlada LUANGA  
RPA, Two-Dimensional Joint Analysis Under  
Shear Loading Using Enriched Finite Element,  
Journal of Solid Mechanics and Materials E  
ngineering, 2, 319-332, 平成20年(2008), 有  
⑧Hideo Koguchi, Nobuki Meo, An Evaluation  
of Interface Strength at a Vertex in a  
Three-Dimensional Joint Considering Residual  
Thermal Stresses Using the  
Three-Dimensional Boundary Element Method,  
Journal of Computational Science and  
Technology, 2, 130-141, 平成 20 年(2008), 有  
⑨ Prukvilailert, Monchai, Hideo Koguchi,  
Boundary element analysis of the stress field at  
the singularity lines in three-dimensional bonded  
joints under thermal loading, Journal of  
Mechanics of Materials and Structures, 2,  
149-166, 平成 19 年(2007), 有  
⑩古口日出男, 箱崎悟史, 分子動力学法と表面  
応力および表面弾性率を考慮した弾性解析  
による表面に段差を有する異方性半無限体の  
変形解析, 日本機械学会論文集 A 編, 73,  
403-410, 平成 19 年(2007), 有

[学会発表] (計 16 件)

1) 林高雄, 古口日出男, 表面応力および表面  
弾性定数を考慮した半無限異方性弾性体  
の接触解析, 日本機械学会北陸信越支部第 46  
期総会・講演会, 2009 年 3 月 7 日、富山大学  
2) 古口日出男, 中島正人, 外力に対する三  
次元異材接合体角部における特異応力場の  
強さの解析, 日本機械学会北陸信越支部第 46  
期総会・講演会, 2009 年 3 月 7 日、富山大学  
3) 近野直樹, 古口日出男, 三次元三層異材  
接合体の界面角部における熱残留応力の徳  
雄応力場解析 (中間層の厚さの影響)、日本  
機械学会北陸信越支部第 46 期総会・講演会、  
2009 年 3 月 7 日、富山大学  
4) ジョビアノ アントニオ ダ コスタ,  
古口日出男, Influence of Slant Side  
Surface in 3D-Bonded Structures on Stress  
Singularity Field, 日本機械学会北陸信越  
支部第 46 期総会・講演会, 2009 年 3 月 7 日、  
富山大学  
5) 古口日出男, エムディ シャイズル イ  
スラム, 三次元横等方性ピエゾ 2 層材料の特  
異応力解析, 日本機械学会北陸信越支部第 46  
期総会・講演会, 2009 年 3 月 7 日、富山大学  
6) 古口日出男, 林高雄, 表面応力と表面弾  
性定数を考慮した異方性表面グリーン関数  
を用いた接触解析, 第 21 回計算力学講演会、  
2008 年 11 月 2 日、琉球大学  
7) 古口日出男, 近野直樹, 三次元三層異材  
接合体の熱残留応力特異場に対する側面開  
き角の影響、第 21 回計算力学講演会、2008  
年 11 月 2 日、琉球大学

8) 古口日出男, 近野直樹, 3 次元異材接合  
体の特異応力場に対する側面の開き角の影  
響、M&M2008 材料力学カンファレンス、2008  
年 9 月 18 日、立命館大学びわこ・くさつキ  
ャンパス

9) 古口日出男, 林高雄, 表面応力と表面弾  
性定数を考慮した弾性理論による表面近傍  
の変形解析, 日本機械学会 2008 年度年次大  
会、2008 年 8 月 4 日、横浜国立大学

1 0) 古口日出男, 近野直樹, 3 層 3 次元接  
合体の角部における熱残留応力の特性、日本  
機械学会 2008 年度年次大会、2008 年 8 月 4  
日、横浜国立大学

1 1) 古口日出男, 三浦晃一, 分子動力学を  
用いた結晶方位面変化に対する表面・界面の  
力学的特性の解析、第 3 7 回学生卒業研究発  
表講演会講演論文集、2008 年 3 月 7 日、福井  
工業大学

1 2) 古口日出男, 谷口昴, 熱残留応力を考  
慮した三次元異材接合体の界面強度評価、第  
20 回計算力学講演会講演論文集 No. 07-36、  
2007 年 11 月 26 日、同志社大学

1 3) 古口日出男, 林高雄, 櫻井隆幸, 分子  
動力学と弾性論を用いた[111]面の表面近傍  
の変形解析、第 20 回計算力学講演会講演論  
文集 No. 07-36、2007 年 11 月 26 日、同志社  
大学

1 4) 谷口昴, 古口日出男, 三次元接着接合  
体の熱残留応力の特異応力場の強さに対す  
る接着層厚さの影響、M&P 第 15 回機械材料・  
材料加工技術講演会講演論文集、2007 年 11  
月 17 日、長岡技術科学大学

1 5) 三浦晃一, 古口日出男, 結晶方位面  
の変化に対する表面応力、剛性率の依存性、  
2007 年度年次大会講演論文集 Vo. 1、2007 年  
9 月 9 日、関西大学

1 6) 古口日出男, 谷口昴, 三次元境界要素  
法による熱残留応力を考慮した異材接合体  
の界面強度評価、2007 年度年次大会講演論  
文集 Vo. 1、2007 年 9 月 9 日、関西大学

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

古口 日出男 (KOGUCHI HIDEO)  
長岡技術科学大学・工学部・教授  
研究者番号：9 0 1 4 3 6 9 3