

科学研究費助成事業（科学研究費補助金）研究成果報告書

平成24年5月30日現在

機関番号：13102

研究種目：基盤研究(B)

研究期間：2009～2011

課題番号：21360051

研究課題名（和文）ナノメカニックスの新展開

-ナノ領域における古典連続体力学適用の下限界の存在-

研究課題名（英文）NEW ADVANCEMENT OF NANOMECHANICS-EXISTENCE OF LOWER LIMIT OF APPLICATION OF CLASSIC CONTINUUM MECHANICS IN NANOREGION-

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：90143693

研究成果の概要（和文）：本研究は、三次元接合体端部のナノ領域の応力特異場に着目して、古典連続体力学の適用限界と表面応力の特異応力場への影響を明らかにし、ナノメカニックス連続体力学の適用範囲を明らかにしようとするものである。

1. シリコンチップを内蔵する接着接合体のマイクロサイズの特異応力場におけるひずみ分布をデジタル画像相関法により求めることができた。デジタル画像相関法に用いたデータはデジタル顕微鏡により取得した。特異ひずみ場の特異性のオーダーは三次元特異場の固有値解析で得られたものとほぼ一致した。
2. 本研究では分子動力学法により接合体を作成し、外力に対する接合体端部の応力特異場の特性を調べた。その結果、原子レベルの応力分布でも特異性を示すことがわかった。また、当研究者により提案された表面・界面応力を考慮した境界条件を用いて、異方性接合体の特異性のオーダーを求める特性方程式を求めた。一方、界面特性が界面端からの距離の関数であることがわかった。原子レベル応力の特異応力場の特異性のオーダーは、界面端に近づくに伴い、変化することがわかった。また、特性方程式から得られた原子レベルの特異性のオーダーを用いることにより、ナノ特異応力場の応力分布を高精度に表すことができることを示した。これは、当初の研究目的であるナノメカニックスの適用の有用性を示すもので、従来の連続体力学の適用範囲を拡張する成果である。
3. Stroh 形式を用いて、異方性-異方性および異方性と等方性の接合体の基本解を導出し、境界要素法プログラムに導入した。さらに、異方性から等方性に材料を変えた際にも、ごく自然に Stroh 形式の解を導出することが可能であることを示した。

研究成果の概要（英文）：

The present study is to reveal the applicable range of nanomechanics through the classic continuum mechanics and the effect of surface stress on stress singular region in focusing on the stress singular field at a nano region in a three-dimensional joint.

1. Strain distribution in the stress singular field of the joint composing of Silicon and resin could be obtained by means of a digital image correlation method. Data were obtained through a digital microscope. The order of singularity of strain singular fields was agreed with the value obtained by eigenanalysis of 3D joint.
2. In the present study, singular stress fields in a nanoscaled joint under an external force were investigated using molecular dynamic (MD) method. The atomic stress fields had a singularity even if the size of joint was in nanoscale. Characteristic equation for determining the order of stress singularity was derived using a boundary condition with surface/interface mechanical properties. From the result of the MD analysis, interface mechanical properties were a function of the distance from the edge of interface. Then, the order of stress singularity increased with approaching to the edge of interface. The atomic stress distribution near the edge of interface could be well expressed using the order of stress singularity obtained from the characteristic equation. This indicates the validity and usefulness of nanomechanics at the objective of this project and the results which extend the applicability of continuum mechanics.
3. Green's functions for anisotropic-anisotropic materials and isotropic-anisotropic materials were newly derived on the basis of Stroh's formalism and incorporated into the boundary element program. Furthermore, it was shown that the solutions for isotropic-anisotropic materials could be smoothly derived from those for anisotropic-anisotropic materials.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2009年度	7,400,000	2,220,000	9,620,000
2010年度	3,800,000	1,140,000	4,940,000
2011年度	2,000,000	600,000	2,600,000
総計	13,200,000	3,960,000	17,160,000

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

カーボンナノファイバなどの作製に端を発し、ナノサイズの材料から成る構造体に関する研究が多く行われるようになっていた。ナノサイズ構造物では、物体の大きさが小さくなるに伴い、体積に対する面積の割合が増大し、バルクの力学的特性に対する表面の影響が大きくなる。ナノサイズの材料の挙動を調べる上で、材料の表面に固有に存在する表面エネルギー、表面応力、表面弾性率を応力解析に考慮する必要があると考えられ、これらを考慮したナノメカニクス連続体力学の研究が必要となってきた。ナノテクノロジーの発展に伴い、ナノサイズのセンサーなどの構造物を設計する上で、必要となる学問分野が必要であった。本研究に関連する研究は主にナノテクノロジーに関するもので、国内では材料分野ではカーボンナノファイバ、量子ドットの製作、薄膜、金のナノワイヤ、超格子、超高感度のナノセンサなどのデバイス関係の研究がある。また、ナノインデンテーションによる微小領域の力学的特性評価の研究も盛んに行われている。しかし、国内の材料力学、弾性論に関するナノ連続体力学の研究は多くない。一方、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)、Koguchi(2007)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、海外では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3、4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。本研究では異材接合体の接合強度に関する研究で検討されている応力特異場のナノレベルでの存在の有無は未だ明らかにされていない。

2. 研究の目的

本研究の目的は、ナノサイズ領域の特異応力場の特性を解析的および実験的に明らかにすることにより、古典連続体力学の解析領域の下限界を明らかにすることである。特に、実験においてナノスケールで接合端部の特異応力場内のひずみ分布を調べ、ナノスケールで接合体の特異応力場における応力分布を解明し、ナノサイズ領域における応力解析法であるナノメカニクス連続体力学の更なる展開を図る。

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なる。

(1) デジタル画像相関法による特異ひずみ場の特性評価

実験では、Si単結晶を含む微小接合体を作製し、接合端部の微小領域におけるひずみをデジタル相関法で調べ、特異応力場内のひずみ分布を測定する。特異場のひずみ分布を計測するための検討を行った後、特異性のオーダーを調べる。このひずみ分布を求めるために必要な変位データの取得には走査プローブ顕微鏡およびデジタル顕微鏡を用いる。

また、新たに開発したメッシュフリー有限要素法を用いて、実験のシミュレーションを行う。この手法はデジタル相関法で用いられているひずみ解析法を含んでいる。

(2) ナノスケール接合体の特異応力場解析

ナノスケール接合体における接合界面における界面応力および界面弾性係数を分子動力学法により求める。

表面応力を考慮した接合体端部の理論解を導出する。また、分子動力学法による接合体の解析を行う。両者を比較し、ナノレベルの特異応力場の存在の有無を調べる。

(3) 三次境界要素法による異方性異材接合体の解析で用いる異方性-異方性および異方性-等方性接合体の基本解の導出と境界要素解析プログラムへの移植を行う。

古典連続体力学とナノメカニクス連続

体力学の適用範囲を明らかにする。

4. 研究成果

(1) デジタル画像相関法による特異ひずみ場の特性の評価

本研究では、デジタル画像相関法を用いてシリコンと封止樹脂の界面端近傍の特異応力場内のひずみ分布を測定する手法を確立することを目指し、実験と解析の両面から検討を行った。実験の初期はプローブ顕微鏡により表面形状データを取得し、ひずみ分布を計測する実験を行った。その結果、表面粗さの状態により計測できる場合と出来ない場合があることがわかった。その後、レーザー変位計およびデジタル顕微鏡によるひずみ分布計測の検討を行った。電子部品の断面を想定し、これを模した樹脂中にシリコンを埋め込んだ試験片に引張り荷重を加え、変形前後の表面画像にデジタル画像相関法を適用して接合界面端近傍に生じるひずみ場について検討した。また、新たに開発したメッシュフリー有限要素法を用いて実験で用いた試験片の三次元解析を行った。その際に用いた試験片の解析モデルを図1に示す。

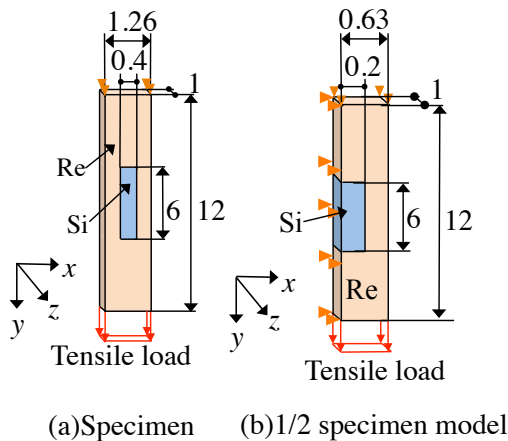


図1 解析に用いた試験片モデル

実験データの精度は3桁であることから、変位データの有効数字の桁数を幾つか変えて、実験によるひずみ分布計測の可否を検討した。図2にその結果を示す。この図は、シリコン(Si)とレジン(Re)の界面端角部を原点とする座標系に関するひずみ分布を示している。プロットは、図のx軸から反時計回りに45°の方向に対するものである。この図から変位データの有効数字の桁が2桁でも計測できることがわかる。

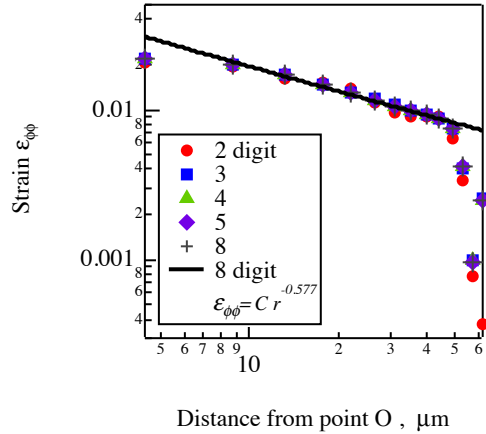


図2 特異応力場近傍のひずみ $\epsilon_{\theta\theta}$ の分布

実験ではデジタル画像相関法で特異応力場内のひずみ分布を計測する際の適切なサブセットサイズを検討した。ひずみ分布を測定する場合、取得した全画像領域150×150pixelに対して10×10pixel、30×30pixel、50×50pixelと変えて調べた結果、30×30pixelのデータを用いた場合、良好な結果を得ることが出来た。この場合、サブセットサイズが小さいと、データにノイズが多く含まれ、解析精度は低下する。図3に30×30pixelの時に得られた変位分布を示す。図4には、この変位分布から得られたひずみ分布を示す。この結果は図1(b)のSiの下の方部近傍のひずみ分布を示している。

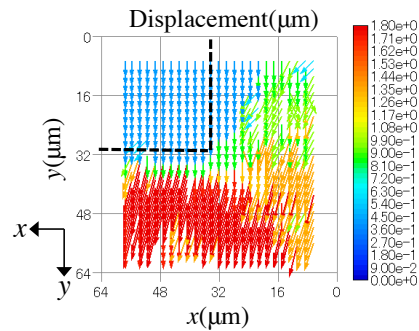


図3 変位分布

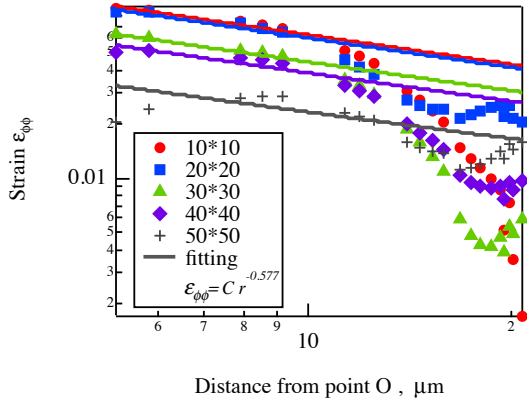


図4 ひずみ分布

以上の結果から、デジタルデータから特異応力場内のひずみ分布を得るためには、全画像サイズの $1/5 \times 1/5$ 程度のサブセットサイズで画像処理を行うことでノイズの低減と測定精度の向上を行うことが可能である。解析および実験で得られた特異ひずみの分布は、特異点からの距離 r の -0.577 乗に比例しており、この指数は三次元異材接合体の特異応力場のそれと一致した。(投稿中)

(2) ナノスケール接合体の特異応力場解析

ナノメータサイズの接合体について、分子動力学を用いて界面端の特異応力場の有無および界面応力および界面弾性係数の導出を行い、ナノメータサイズの応力場の特性を明らかにした。

はじめに、ナノメータ接合体の特異性のオーダーを調べるために Stroh 形式に基づき特性方程式を導出した。その際、界面および表面特性を導入した。界面特性を考慮した境界条件式は、

$$\mathbf{W}_k = \mathbf{s}_{0k} + \frac{d\mathbf{S}_{1k}}{dr} \Omega_k \frac{d\mathbf{u}}{dr} + \mathbf{S}_{2k} \Omega_k \frac{d^2\mathbf{u}}{dr^2} \quad (1)$$

のように書くことができる。ここで、 \mathbf{u} は変位ベクトルであり、

$$\mathbf{s}_{0k} = \begin{Bmatrix} \tau_{11,1}^{k0} \\ 0 \\ \tau_{31,1}^{k0} \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{S}_{1k} = \begin{bmatrix} d_{1111}^{k0} & 0 & d_{1131}^{k0} \\ 0 & 0 & 0 \\ d_{3111}^{k0} & 0 & d_{3131}^{k0} \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{S}_{2k} = \begin{bmatrix} d_{1111}^{k0} & 0 & d_{1131}^{k0} \\ 0 & \tau_{11}^{k0} & 0 \\ d_{3111}^{k0} & 0 & d_{3131}^{k0} \end{bmatrix}, \quad (2)$$

$$\Omega(\theta) = \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

である。この式中の $\tau_{\alpha\beta}^{k0}$, d_{ijkl}^{k0} は図5の k 番目の界面の界面応力および界面弾性特性である。

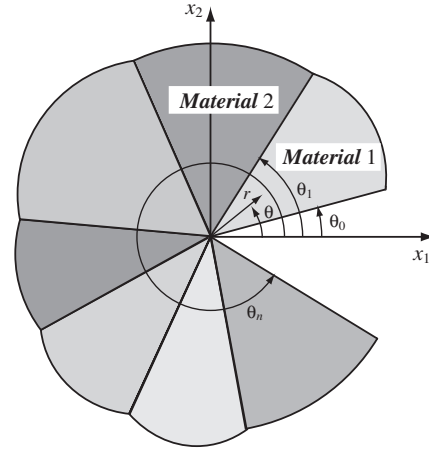


図5 接合体の解析モデル

この式を界面および表面に適用し、図6に示す接合体の特性方程式を導いた。

$$\mathbf{K} = \begin{bmatrix} \mathbf{K}_1 & \mathbf{K}_2 \\ \mathbf{K}_3 & \mathbf{K}_4 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{p}^* \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \mathbf{G}_{1(1)} & \mathbf{G}_{1(0)}^{-1} \begin{bmatrix} \langle p_1^\lambda(\theta_0, \theta_1) \rangle & 0 \\ 0 & \langle \bar{p}_1^\lambda(\theta_0, \theta_1) \rangle \end{bmatrix} \\ - \begin{bmatrix} \mathbf{A}_2 & \bar{\mathbf{A}}_2 \\ \mathbf{B}_2 & \bar{\mathbf{B}}_2 \end{bmatrix} \mathbf{G}_{2(2)}^{-1} \begin{bmatrix} \langle p_2^\lambda(\theta_1, \theta_2) \rangle & 0 \\ 0 & \langle \bar{p}_2^\lambda(\theta_1, \theta_2) \rangle \end{bmatrix} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \mathbf{p}^* \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix}$$

$$= \begin{Bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix} \quad (3)$$

ここで、 $p_j^\lambda(\alpha, \beta) = \hat{p}_{*j}^{1-\lambda}(\alpha) \hat{p}_{*j}^{-1+\lambda}(\beta)$,

$$\mathbf{G}_{k(s)} = \Omega_k \begin{bmatrix} \mathbf{A}_k & \bar{\mathbf{A}}_k \\ \mathbf{B}_k & \bar{\mathbf{B}}_k \end{bmatrix} - \left(\mathbf{H}_{10s} - \frac{\mathbf{H}_{21s}}{\ell} \lambda \right) \quad (4)$$

$$\Omega_k \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ \mathbf{A}_k & \bar{\mathbf{A}}_k \end{bmatrix}$$

である。なお、界面および表面特性は \mathbf{H} マトリックスの中に含まれている。

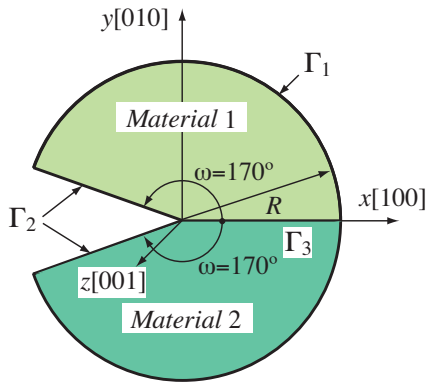


図6 2相体接合体モデル

特異応力場のオーダーは、 $|\mathbf{K}_3|=0$ から得ることができる。

接合体の組み合わせは、Cu(100)とAu(100)であり、界面上の原子応力 σ_{yy} を求め、界面端からの距離に対して調べた。その結果を図7に示す。

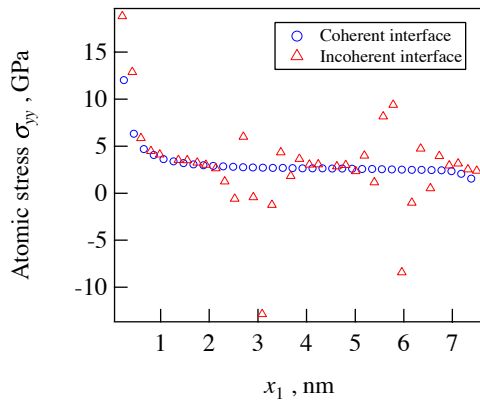


図7 界面上の原子応力分布

図7には整合界面と不整合界面の結果を示してある。

次に、整合界面に対して界面応力と界面弾性係数を調べた。その結果を図8および図9に示す。

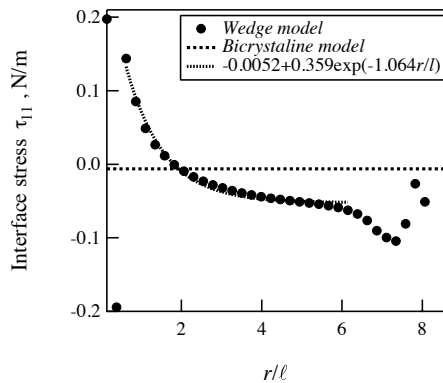


図8 Cu-Au 界面の界面応力 τ_{11}

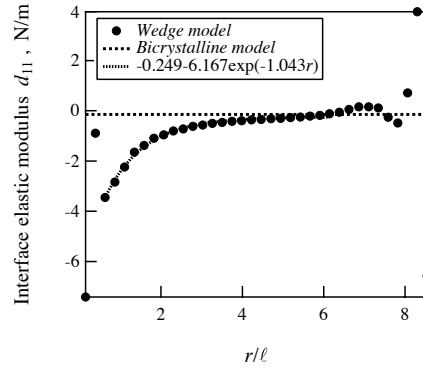


図9 界面弾性係数 d_{1111}

界面応力および界面弾性係数は、界面端からの距離に対して変化している。この関係を式で近似し、式(3)に用いることにより特異性のオーダーを求めることができる。その結果を図10に示す。

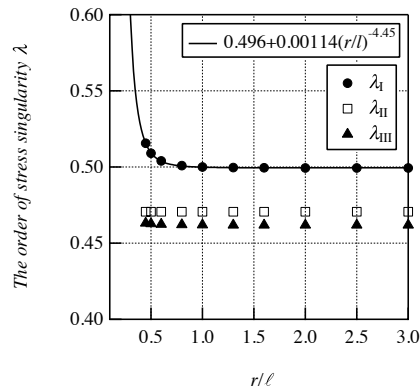


図10 特異性のオーダーの変化

図10のように特異性のオーダーは界面端に近づくに伴い大きくなっていく。すなわち、特異性が強くなっていくことがわかる。この関係を用いて原子応力分布を表すことができる。

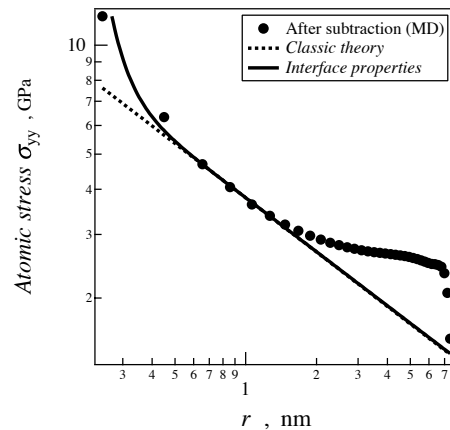


図11 界面上の応力分布

図 11 上の太い実践は界面特性を考慮して得られた結果で、黒丸が原子応力である。このように界面特性を考慮することにより、特異応力場を表すことができる。

ナノメータ接合体の界面端には、特異応力場が発生する。界面特性により接合体の原子構造が変化し、変形に対する抵抗が増加していると考えられる。そのため特異性のオーダーが大きくなると考えられる。(投稿中)

(3) 三次境界要素法による異方性異材接合体の解析で用いる異方性-異方性および異方性-等方性接合体の基本解の導出

Stroh 形式を用いて異方性-異方性弾性体および異方性-等方性弾性体のグリーン関数を導出した。導出したグリーン関数は、Mindlin の半無限弾性体に対するグリーン関数を含んでおり、汎用性が高い。

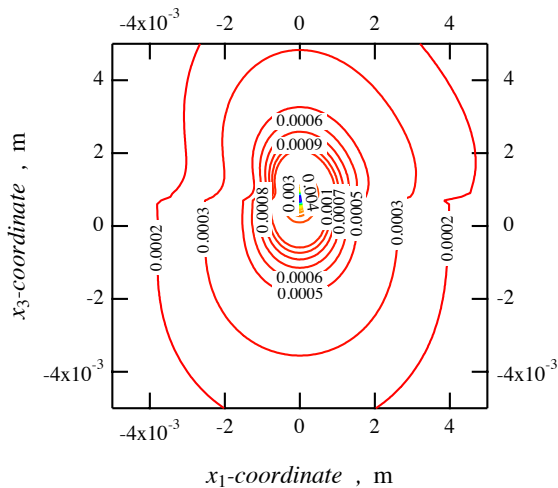


図 12 変位 u_3 の $x_2=0$ 面上の分布(f_3)
 ここでは、集中荷重の作用点を $(x_1, x_2, x_3) = (0, 0, 0.75 \times 10^{-3})$, すなわち $d=0.75 \times 10^{-3}$ [m] とし、集中荷重の大きさを $(f_1, f_2, f_3) = (0, 0, 1)$ あるいは $(1, 0, 0)$ [MN] とした。上の材料を Al、下の材料を等方性の Ni とした。等方性材料の Ni のポアソン比と横弾性係数をそれぞれ 0.306, 83.9[GPa] である。また、計算に用いた Al の異方性の弾性定数は $\{C_{11}, C_{12}, C_{13}, C_{15}, C_{33}, C_{44}, C_{66}\}$ である。一例として、 u_3 の $x_2=0$ 面上の分布を等高線として示す。片側を異方性弾性体とすることにより、等方性体の場合より分布が複雑になっている。実際の材料特性に応じた解析を行うことにより、より信頼性の高い強度評価を行うことができると考える。(文献③)

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 17 件)

① 倉橋貴彦, 石川晃広, 古口日出男, エレメントフリー Galerkin 法による三次元異材接合体の応力解析に基づく接合界面端角部における特異応力場の強さに関する評価 (界面幅および接合材料高さの特異応力場の強さの関係), 日本複合材料学会誌, (In press) 有

② Hideo Koguchi, Kazuhisa Hoshi, Evaluation of Joining Strength of Silicon-Resin Interface at a Vertex in 3D Joint Structures, InterPACK11, 平成 23 年 (2011), 有

③ 古口日出男, Stroh 形式を用いた異方性-等方性弾性体のグリーン関数, 日本機械学会論文集 A 編, 77, 1770-1785, 平成 23 年 (2011), 有

④ 古口日出男, 齋藤裕一, 三次元異材接合体界面角部の特異応力場の評価 (応力 s_{qq} に関する最大強度の評価), 日本機械学会論文集 A 編, 77(780), pp.1256-1268, 平成 23 年 (2011), 有

⑤ Hideo Koguchi and Naoki Nishi, Contact Analysis Using Surface Green's Functions for Isotropic Materials With Surface Stress and Surface Elasticity, IMECE2010-37814, 平成 23 年 (2010), 有

⑥ Hideo Koguchi, Joviano Antonio da Costa, Analysis of the stress singularity field at a vertex in 3D-bonded structures having a slanted side surface, International Journal of Solids and Structures, 47, Issues 22-23, pp.3131-3140, 平成 23 年 (2010), 有

⑦ 古口日出男, 中島正人, 三層三次元異材接合体角部の特異応力場に対する接着層厚さの影響 (外力が作用する場合), 日本機械学会論文集 A 編, 76, 768, pp.1110-1118, 平成 23 年 (2010), 有

⑧ 古口日出男, 表面応力と表面弾性特性を考慮した表面グリーン関数 (Stroh 形式の三次元等方性弾性体への適用), 日本機械学会論文集 A 編, 76(764), pp.531-538, 平成 23 年 (2010), 有

[学会発表] (計 62 件)

1) Takao Hayashi, Hideo Koguchi, Contact analysis for anisotropic elastic materials considering surface stress and surface elasticity, 1st International GIGAKU Conference in Nagaoka (IGCN), 2月3日-5日, 2012, pp.153.

[その他]

<http://mcweb.nagaokaut.ac.jp/~koguchi/>

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: 90143693

(2) 研究分担者

倉橋 貴彦 (KURAHASHI TAKAHIKO)
 長岡技術科学大学・工学部・准教授
 研究者番号: 00467945