

I-8 金属のナノスケール挙動の大変形弾塑性シミュレーション

東北大学 学○ 小橋宏昭 正 山川優樹 正 池田清宏

1. はじめに

現在、土木・建築・自動車・パソコン等、様々な分野の構造設計に於いて大変形弾塑性FEMが広く利用されており、これにより、弾塑性挙動を呈する土や金属を有する構造物に関して、定性的・定量的な実現象の再現が可能となっている。例えば、土の大変形挙動のシミュレーション等では大きな成果が挙げられている¹⁾。本研究では、この大変形弾塑性FEMを用いてナノインデンテーション試験の実験データに基づいた数値シミュレーションを行い、使用状態の半導体材料の物性値、及びナノスケールに於ける大変形弾塑性FEMの適用可能性の評価を行う。このとき、実験、及びFEM解析により得られた荷重-変位関係の比較に力点を置いた。

2. ナノインデンテーション試験

2.1 実験方法

照井ら²⁾により行われた試験の概要を図-1(a)に示す。試験は全てTriboindenter(Hysitron製)により行われ、ダイヤモンド圧子はcube cornerタイプが用いられた。この圧子の基本形状は各先端角度が90°の三角錐になっているが、先端部のみ曲率半径80nmの球状となっている。

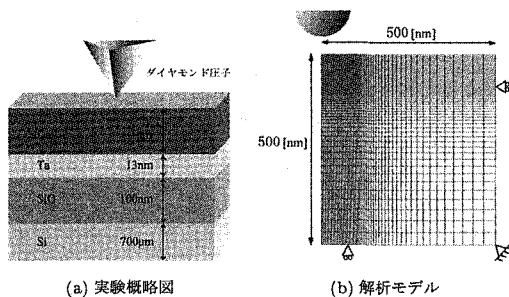


図-1 解析対象と解析モデル

2.2 硬さ、弾性率測定

図-2.2に典型的なナノインデンテーション試験結果を示す。 $P_{\max}$ は最大荷重、 h_c は除荷後の押し込み深さである。 S は最大荷重 $P_{\max}$ における除荷開始時の接線勾配を表している。ナノインデンテーション試験では除荷初期の変形が弾性変形であるとみなすと、接線勾配 S と薄膜の弾性率 E^* は次式の関係がある³⁾。

$$S = \frac{dP_{\max}}{dh_c} = \beta \cdot \frac{2}{\sqrt{\pi}} \cdot E^* \cdot \sqrt{A} \quad (1)$$

A は圧子の投影面積であり、弾性率とポアソン比が既知である溶融シリカに対して様々な荷重でナノインデンテーション試験を行うことで h_c の関数として得ることが可能である。 β は圧子の形状を表す定数であり、今回の実験では $\beta = 1.338$ である。しかし、この時求められる弾性率 E^* は圧子の変形を考慮していないので、さらに次式を用いることで圧子の変形を考慮した薄膜の弾性率 E_f が求められる。

$$E^* = \left[\frac{1 - \nu_f^2}{E_f} + \frac{1 - \nu_{\text{ind}}^2}{E_{\text{ind}}} \right]^{-1} \quad (2)$$

ν_{ind} , E_{ind} はダイヤモンド圧子のポアソン比、弾性率を示しており $\nu_{\text{ind}} = 0.104$, $E_{\text{ind}} = 1050 \text{ GPa}$ である。 ν_f は薄膜のポアソン比でありCu薄膜では $\nu_f = 0.34$ である。尚、ナノインデンテーション試験では除荷初期の弾性変形中は圧子接触面積一定であること、及び圧子のまわりの試料表面が平坦であり、盛り上がりや沈み込みがないことを仮定して弾性率を求めている⁴⁾。

また、ナノインデンテーションにより得られる硬さ H は次式から求められる³⁾。

$$H = \frac{P_{\max}}{A} \quad (3)$$

ここで、硬さ H に0.28を乗じたものが降伏応力 σ_y 相当するということが経験的に知られている。

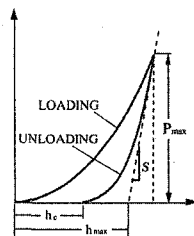


図-2 試験結果例

3. FEMによる

ナノインデンテーション試験のシミュレーション

有限変形等硬化化フォンミーゼスモデルによる弾塑性有限変形解析を行い、Cu薄膜のナノインデンテーション試験をシミュレーションする。数値解析としては、山川らが開発した有限変形弾塑性FEM手法¹⁾を用いて解析を行った。

3.1 材料モデル・材料定数の設定

図-1(b)に示す二次元軸対称モデルに対して解析を行った。要素は四角形一次要素を用いた。材料パラメータに関しては、パルクCu値、及び照井らによって測定されたCuの各結晶方位の物性値²⁾を基にいくつかの材料モデルを決定した。一例を表-1、図-3に示す。塑性硬化関数の構成式は式(4)の通りである。ここで ξ , σ_y , ϵ_{y0} はそれぞれ、塑性相当ひずみ、降伏応力、降伏ひずみである。 n , h_1 は塑性に関するパラメータ

である。

$$\sigma = \sigma_y \left(1 + \frac{\xi}{\varepsilon_{y0}} \right)^n + h_1 \xi \quad (4)$$

表-1 材料定数

	E(GPa)	σ_y (GPa)	ε_{y0}	n	h_1 (MPa)
(100) 方位モデル	123.8	0.468	0.00378	1.05	0.26
バルク Cuモデル	128.9	0.300	0.00233	1.20	0.30

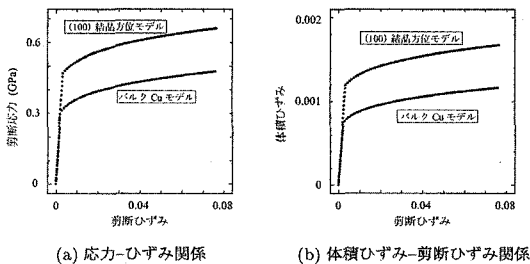


図-3 材料モデル

3.2 解析結果

図-4に解析結果を示す。荷重-変位関係については、実験に於いて pop-in¹ が生じた押し込み深さ 8 nm よりも浅い領域では、(100) 結晶方位モデル・バルク Cu モデル共に実験値と良好な一致を示している。また、pop-in が収まった後の領域については、実験値と (100) 結晶方位モデルとの間に似通った傾向が見られる。

3.3 圧子形状の影響

圧子形状、メッシュ分割、及び材料パラメータが解析結果に与える影響を調べた。圧子形状に関する解析結果を図-5に示す。圧子形状が荷重-変位曲線の立ち上がり方に与える影響は非常に大きく、このことより、ナノインデンテーション試験に於いて圧子形状を正確に把握することの重要性がうかがえる。

4. 結論

弾塑性有限変形解析プログラムを用いた本研究により、ナノインデンテーション試験における荷重-変位関係を良好に近似することができ、バルク Cu 値、及び実験から求められた物性値にある程度の信頼性を確認することができた。これより、大変形解析における弾塑性有限変形解析プログラムの有用性が実証され、且つナノスケールの分野における実挙動への適用可能性の一端を示すことができた。

今後、より高精度な挙動予測の実現のためには、実験と解析をリンクさせた材料物性の測定法の確立、ナノスクラッチ (引っ掻き) 試験の解析による薄膜の剥離強度の評価、Pop-in の再現、及び発生原因の特定のた

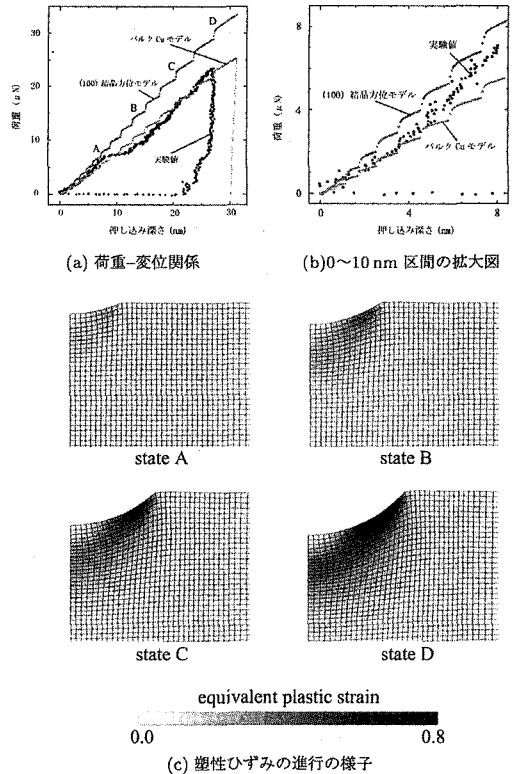


図-4 解析結果

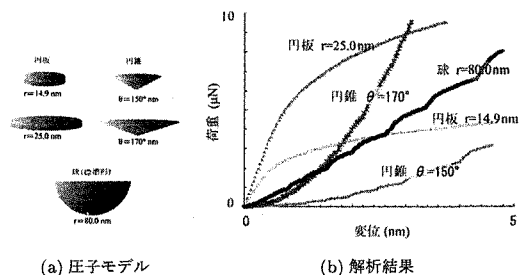


図-5 圧子形状の影響

めの、せん断帯の形成や原子配列の転移を考慮した解析手法の検討等が必要である。

参考文献

- 1) 山川 優樹 他: 圧縮場における弾塑性体の分岐解析とパスジャンプ挙動. 土木学会論文集 No.701/III-58, pp. 73-86, 2002.
- 2) 照井 賢一郎: ナノインデンテーション法による Cu 薄膜の強度評価. 東北大学工学研究科知能デバイス材料学専攻卒業論文, 2005.
- 3) W.C.Oliver and G.M. Pharr: J. Mater. Res., vol. 19, 2004.
- 4) 社団法人日本金属学会: 金属学会会報「まてりあ」, 1996.

¹ ある時点において速に鉛直方向変位が進展する現象。明確な発生機構は判明していない。