

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

CONTACT AND ADHESION ANALYSIS CONSIDERING VAN-DER-WAALS FORCE IN NANO-SIZED REGIONS USING TWO-DIMENSIONAL BEM

古口 日出男¹⁾, 畑田 将伸²⁾

Hideo KOGUCHI and Masanobu HATADA

1) 長岡技術科学大学機械系 (〒940-2188 長岡市上富岡町1603-1, E-mail: koguchi@mech.nagaokaut.ac.jp)

2) ファナック株式会社 (〒401-0597 富士山麓山中湖畔)

With the development of nanotechnology, such as nano machines and MEMS, adhesion between a small-sized structures prevents to achieve a required performance of the machines. The goal of our study is to build a tool for analysis of mechanical behavior in nano-scaled structures. In the present paper, the analysis of BEM considering van der Waals force between a cylinder, flat and uneven planes was carried out, the relationship between the adhesion force and the geometry of surface was examined. In the analysis of the flat plane and the cylinder, adhesion behavior was compared with other researcher's result and both results were agreed with each other. In the analysis of the uneven plane and the cylinder, it was shown that the adhesion force increases with increasing the number of unevenness of the surface.

Key Words : Elasticity, Contact Mechanics, van der Waals force, Adhesion, Nano-Tribology

1. 緒論

近年、マイクロマシン、ナノマシンなどのナノテクノロジーの研究¹⁾が多く行われている。マクロサイズの構造物では無視できても、マイクロ・ナノのサイズになると無視できなくなる力がある。その代表的な力がファンデルワールス力などの分子間力である。接触していなくても物体が接近することで二面間に発生する引力により凝着が起こる。微小マシンでは容易に凝着が発生し、マシンの動作に影響することから、凝着を防止するための工夫が必要となっている。

本研究では境界要素法を用いて表面に分子間力を導入することにより、様々な形状の面における凝着を解析する手法を開発することを目指している。分子間力は物体の二面間の距離の非線形関数で与えられ、吸着力と反発力からなる分子間力は2物体間の距離が原子間隔に近くなると大きく変化する。本研究では二次元境界要素法を用いて、はじめに半円柱と弾性体の凝着解析を行い、その後で表面に凹凸のある面の凝着を解析する。

2. 凝着・剥離現象について

二つの物体間の凝着・剥離現象は、図1に示すように表面粗さなどを考えると、微視的には二つの球面間、球・平面間、半円柱・平面間の凝着・剥離と見ることができる。

二つの球面間に生じる凝着については様々な研究者が理論を提案している。まず、剛体球についてはBradley²⁾が2つの剛体球の半径および表面エネルギーにより凝着力を求める理論

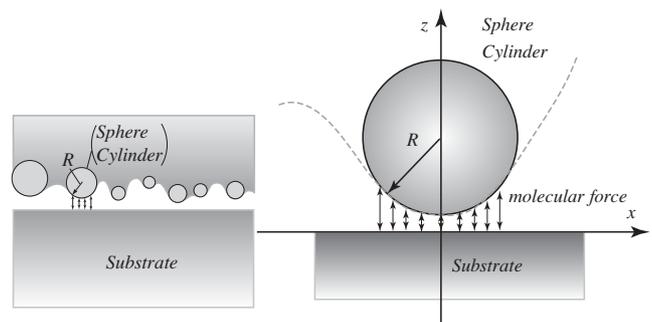
を発表している。また、任意半径の弾性球についてはJohnsonらがJKR理論³⁾を発表した。半径 R_1, R_2 の2つの球体に荷重 F が加えられるとき、球面間の接触半径 a_0 は次のHertzの式で求めることができる。

$$a_0^3 = \frac{3FR}{4K} \quad (1)$$

ここで

$$1/K = (1-\nu_1^2)/E_1 + (1-\nu_2^2)/E_2$$

$$R = R_1 R_2 / (R_1 + R_2)$$



(a) Adhesion in wavy surfaces (b) Adhesion model of waveness

Fig.1 Adhesion with molecular forces

E_1, E_2 : 球1, 球2のヤング率, ν_1, ν_2 : 球1, 球2のポアソン比である.

Johnsonらは, 凝着による表面エネルギーの差 $\Delta\gamma$ を考慮して, Hertzの式を次式のように変形した(図2を参照).

$$a^3 = \frac{3R}{4K} \left(F + 3\Delta\gamma\pi R + \sqrt{6\Delta\gamma\pi R F + (3\Delta\gamma\pi R)^2} \right) \quad (2)$$

ここで, a は凝着領域の半径, $\Delta\gamma = \gamma_1 + \gamma_2 - \gamma_{12}$ で, γ_1, γ_2 は球1および2の表面エネルギー, γ_{12} は凝着時の凝着面のエネルギーである. 式(2)より, 最大引張荷重 F_{max} は $F_{max} = -3\pi R \Delta\gamma / 2$ となり, このとき, 球面間の凝着力が最大となるとしている. もし, F_{max} より大きな引張荷重が加えられると, 剥離が生じる.

一方, 二つの半円柱または半円柱と平面の凝着理論はBaneyら⁽⁴⁾によって導出された. Baneyらの接触モデルを図3に示す. この図は軸が平行に置かれた二本の長い半径 R の半円柱が接触している状態を示している. 図4は接触状態の断面を示している. まず, 二本の半円柱に荷重 F を加えると破線の

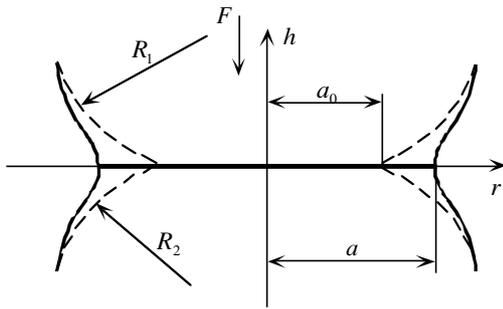


Fig.2 Adhesion of elastic spheres

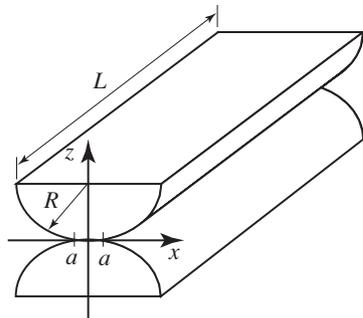


Fig.3 The geometry of cylinders in contact

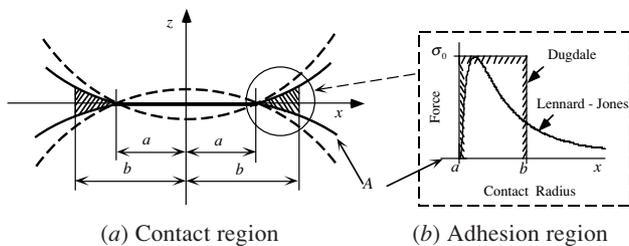


Fig.4 Contact area

形状から実線の形状へと弾性変形する. このとき, Baneyらの凝着理論では, $|x| \leq a$ の範囲でHertzの圧力が生じ, $a \leq |x| \leq b$ の範囲で引力が生じる. ここで, 引力としては後述する表面間の相互作用力(図4参照)を考え, Maugis⁽⁵⁾と同様図4に示すように最大引力 σ_0 が $a \leq |x| \leq b$ で一様に作用し, $|x| \geq b$ では全く作用しないとしている.

本研究においては, 物体表面間の相互作用力としてvan der Waals力(分子間力)を考え, Greenwood⁽⁶⁾と同様にLennard-Jones型ポテンシャルを用いて凝着・剥離現象の解析を行う. この型のポテンシャルを用いた場合, 任意の2点間の距離 h における単位面積当たりの表面力は次式で与えられる.

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

ここで, ε は平衡原子間距離である.

また, 表面に凹凸のある面の凝着については, 近年Johnson⁽⁷⁾やZilbermanら⁽⁸⁾によっても解析が行われている. 本研究では半円柱と弾性体のモデルを拡張して境界要素法で解析を行う.

3. 解析について

3.1 解析方法 本研究では二つの物体が分子間力により凝着する問題を境界要素法を用いて解析する. なお, ナノサイズ領域の解析において解析精度を保つため, 変数を全て無次元化する. 解析に用いた積分方程式を次式に示す.

$$\begin{aligned} & C_{ij} \bar{u}_j(P) \\ &= \int_S \left(\frac{\Lambda}{3\pi(1-\nu)\mu} \left[(3-4\nu) \ln \left(\frac{1}{r} \right) \delta_{ij} + \bar{r}_{,i} \bar{r}_{,j} \right] \bar{n}_j f(Q) \right) \frac{dS(Q)}{\varepsilon} \\ & - \int_S \left[\frac{1}{4\pi(1-\nu)r} \left\{ (1-2\nu) \delta_{ij} + 2\bar{r}_{,i} \bar{r}_{,j} \right\} \frac{\partial \bar{r}}{\partial n} - (1-2\nu) \right. \\ & \left. \times (\bar{r}_{,i} \bar{n}_j - \bar{r}_{,j} \bar{n}_i) \right] \bar{u}_j(P) \frac{dS(Q)}{\varepsilon} \end{aligned} \quad (4)$$

ここで,

$$\bar{u}_j(P) = \frac{u_j(P)}{\varepsilon}, \quad r = \bar{r}\varepsilon, \quad \Lambda = \frac{\Delta\gamma}{\varepsilon}, \quad f = \left(\frac{\varepsilon}{h} \right)^3 \left[1 - \left(\frac{\varepsilon}{h} \right)^6 \right] \quad (5)$$

h : Distance between surfaces of two bodies

基本解には二次元弾性問題のKelvinの解を用いた.

3.2 計算アルゴリズム Lennard-Jones型ポテンシャルエネルギーによるVan der Waals力は $h = \varepsilon$ の近傍で非常に大きく変化する. このような場合, 平衡状態を導出することが非常に困難となる. 本研究では, 解析結果より求められた変位に小さい係数(本解析では 10^{-3})を乗じた変位を解析モデルの節点座標に加え, 境界を移動している. この方法ではVan der Waals力にも同様の係数を掛けた解析になっていると考

えられるため、反復計算毎に得られた表面力を節点反力に加えることにより、最初に表面間に作用していた力に対する反力が得られるまで繰り返し計算を行った。反復計算の計算回数は、およそ乗じた小さい係数の逆数に等しい。

3.3 半円柱-矩形断面を有する弾性体モデルおよび解析条件

図5に半円柱と矩形断面を有する弾性体の凝着解析モデルを示す。半円柱は弾性体である。半円柱と下地上面との間に分子間力が作用する。図6は境界要素モデルの初期状態の要素分割である。半円柱-下地間に作用する分子間力の影響が大きい表面については、非常に細かく節点を構成した。その最小節点間隔は実際の原子間距離と同じ値である $\epsilon=0.2\text{nm}$ としている。解析においては、座標は ϵ で無次元化されているため、式(4)の λ/μ の大きさを変えるだけで、任意サイズの解析モデルに対応できる。ところで、分子動力学法でも凝着の解析が可能である。この場合、凝着面間のポテンシャル関数の決定などで検討課題が多くあるのが現状である。また、連続体力学で得られる変位は、分子動力学で得られる原子の変位場の統計的平均に対応していると考えられる。

境界条件は、下地表面を x, z 方向とも自由とし、その他の3辺は x, z 方向ともに固定した。

次式はMaugisが提案した無次元パラメータ λ である。

$$\lambda = \frac{4\sigma_0}{\left(\frac{\pi^2 K^2 \Delta\gamma}{R}\right)^{1/3}} \quad (6)$$

ここで、 σ_0 は単位面積当たりの最大引力で式(3)より求めることができ、 σ_0 を生じる半円柱-下地上面間の距離は $16\Delta\gamma/(9\sqrt{3}\epsilon)=0.24\text{nm}$ である。本研究では、 $\lambda=1$ の時の解析を行う。ここで、 $\lambda=1$ となる半円柱の半径、半円柱および下地の材料

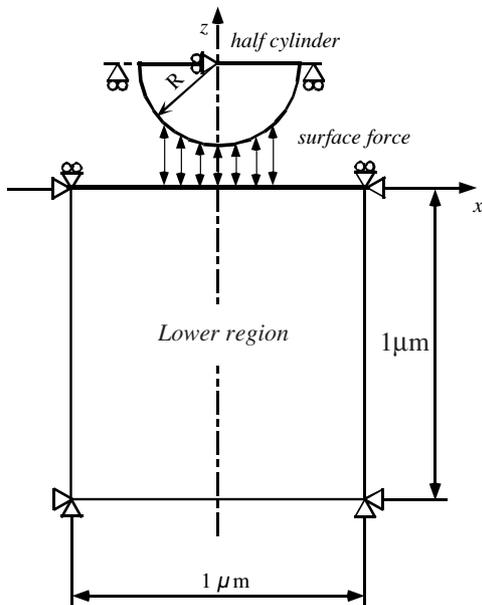


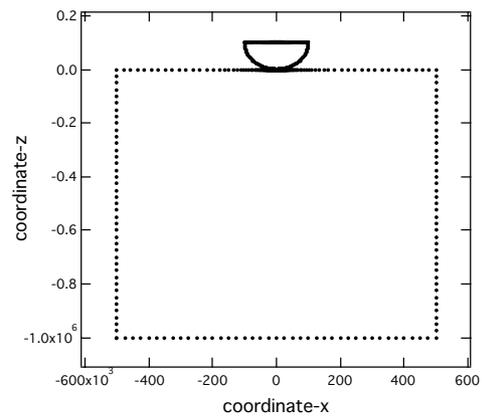
Fig.5 The geometry of cylinder and elastic lower region in contact

定数、境界要素法モデルの設定について表1に示す。

3.4 凹凸のある面-矩形断面モデルおよび解析条件 図7に表面粗さを模擬した凹凸のある面と矩形断面を有する有限弾性体の解析モデルを示す。ここで、凹凸のある面および下地ともに弾性体である。凹凸のある面は $h+\{1+\cos(n\pi x/10)\}$ (unit: nm)で表される。また凹凸の数 n を $n=1$ から $n=5$ まで変えてある。境界条件は前述のモデルと同じである。下地

Table 1 Material properties and model sizes

	cylinder	plane
Young's modulus, GPa	763.0	10^4
Poisson's ratio	0.2	0.1
Minimum mesh length, nm	0.2	0.2
Radius R, nm	100	-



Number of node : 593 (half-cylinder), 481(Lower region)

Fig.6 Mesh division for BEM model

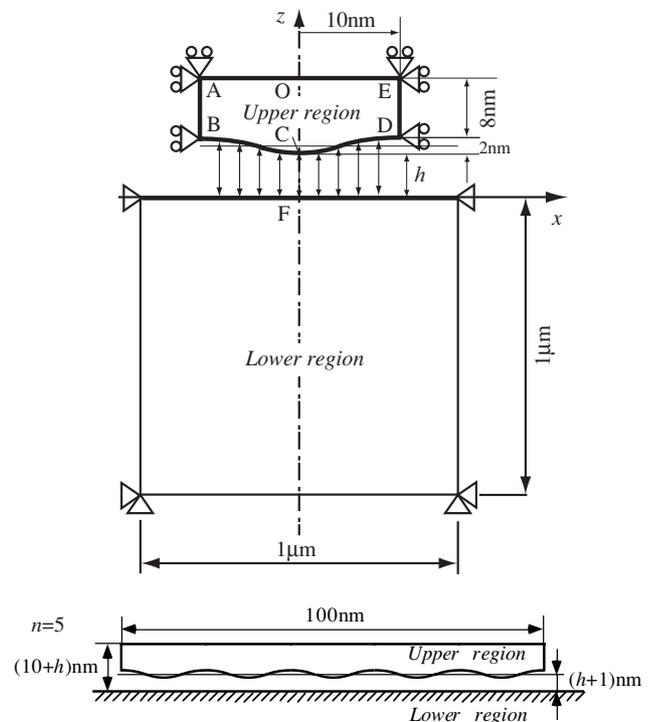


Fig.7 The geometry of uneven and flat surfaces in contact

Table 2 Material constant

	material1	material2
Young's modulus [Pa]	12.3×10^{10}	21.0×10^{10}
Surface ene. $\frac{\text{nm}}{\text{m}^2}$ [J/m ²]	2.5	2.5
Poisson's ratio	0.34	0.29

領域の1辺の長さも先ほどと同様に1 μm である。凹凸のある面モデルについては図7のように変位拘束を行う。ここで、凹凸のある面-矩形断面を有する弾性体モデルの材料定数を表2に示す。材料は凹凸のある領域をCu、下地領域をFeとした。

4. 解析結果

4.1 半円柱-矩形断面を有する弾性体の凝着解析の結果

図8に半円柱-下地上面間の距離 $h=0.38\text{nm}$ から 0.18nm まで $0.02\text{nm}/\text{step}$ ずつ半円柱を下地上面に近づけていった時の半円柱および下地上面の変形の様子を示す。図8で半円柱-下地上面間の距離が大きい位置では半円柱が下地上面に凝着しようと z 方向下向きに変位している。これは、半円柱先端部および下地上面に引力が作用しているためである。一方、半円柱-下地上面間の距離が小さくなるにつれて、半円柱先端は

徐々に平らに変形し、その後平らな部分は徐々に広がっていく。これは、分子間力の斥力によるものである。この平らな部分においては、半円柱先端部および下地上面の先端部は原子間距離を保っている。ここで、半円柱および下地上面においてそれぞれ平面となっている部分が凝着している部分であると考えられる。また先端部に斥力が作用することで、引力の作用している部分は左右に移動する。これにより凝着領域も徐々に左右に広がる。本解析では表面力分布から判断して、最大引力が発生している位置を凝着領域端とした。この方法で求めた凝着領域長さは、図8に示した半円柱先端部の平らに変位している部分の長さと同じであった。

解析の初期に得られた半円柱モデルに作用する単位面積当りの表面力の分布を図9に示す。 $x=0$ の位置において、半円柱-下地上面間の距離が $h=0.3\text{nm}$ から 0.18nm に変化することにつれて、表面力は引力から斥力に変化している。

つぎに、種々の結果を比較するため、表面間に働く力 P および接触半径 a を無次元化した以下のパラメータを用いる。

$$\tilde{P} = \frac{P}{(\pi K \Delta \gamma^2 R)^{1/3}} \quad (7)$$

$$\tilde{a} = \frac{a}{2 \left(\frac{R^2 \Delta \gamma}{\pi K} \right)^{1/3}} \quad (8)$$

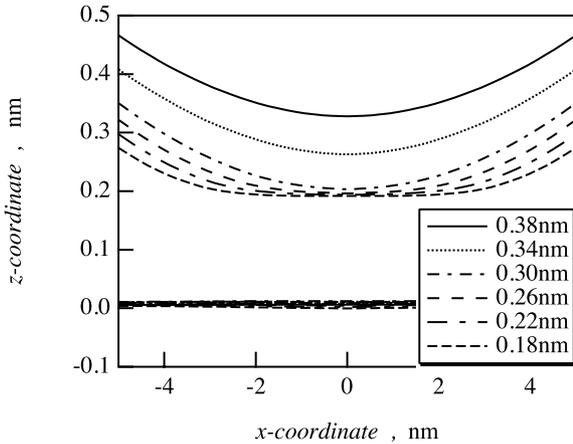


Fig.8 Displacement in the contact area

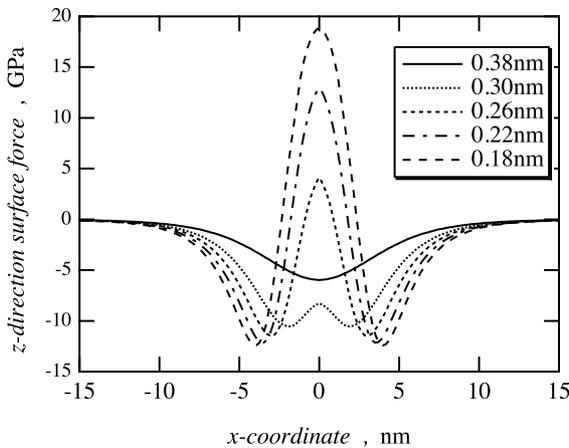


Fig.9 Surface traction in the contact area.

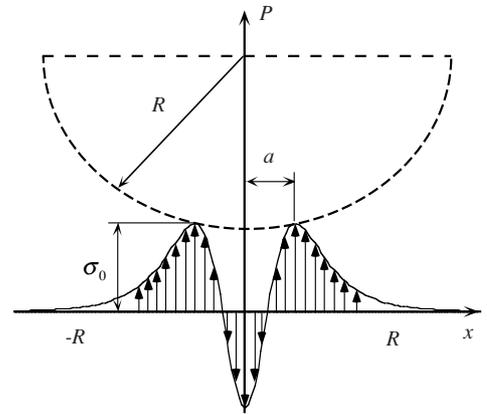


Fig.10 Schematic view of surface traction

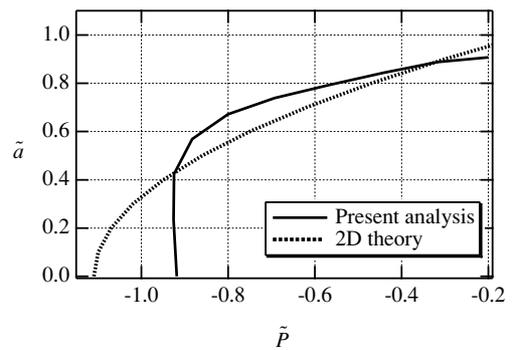


Fig.11 Curves of \tilde{a} vs. \tilde{P} for values of $\lambda=1$ (2D theory: Baney⁽⁴⁾)

式(7)の力 P は半円柱 - 下地上面間に作用する分子間力を $-R \leq x \leq R$ の範囲で積分することで求めた。図10は本解析の最大引力 σ_0 , 合力 P , 接触半径 a の模式図である。図11は式(7) (8)を用いて求めた \tilde{P} と接触半径 \tilde{a} の関係である。この図にはBaneyらによる二次元半円柱 - 半無限体の凝着の理論解析で得られた結果も併せて示した。この図で \tilde{P} の値が小さくなるほど(図の左に行くほど), 半円柱 - 下地上面間に作用する表面力が引力であることを、逆に \tilde{P} の値が大きいくほど表面力が斥力であることを意味している。斥力が大きくなる $-0.35 < \tilde{P}$ において, \tilde{a} はBaneyらの理論解析の方が本解析の計算結果に比べて大きくなっている。Baneyらの解析では、図4に示したように接触域の外部に一定の大きさの引力が作用する領域を設けている。半円柱を押しつける外部荷重が増加するに伴い、二面間が接近し引力の作用する領域も大きくなる。接触領域 \tilde{a} の値もそれにとまない大きくなるためであると考えられる。理論解析の場合は、引力 \tilde{P} が最大になると接触半径 \tilde{a} が0から徐々に増加している。しかし、実験によると、本解析と同様に引力が最大になると同時に凝着領域も大きくなるのが観察されている。

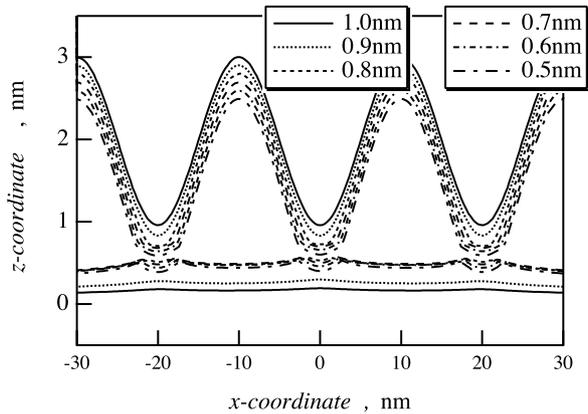


Fig.12 Displacement in the z-direction for $n=3$

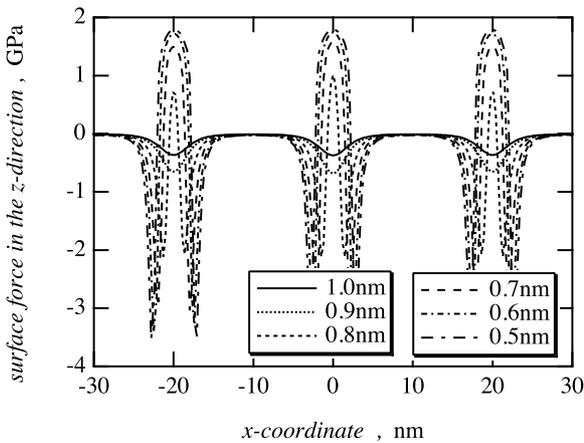


Fig.13 Surface force per unit area in the z-direction for $n=3$

4.2 凹凸のある面 - 平面間の凝着・剥離解析結果 図12は $n=3$ の凹凸のある面 - 下地上面間の距離を $h = 1.0\text{nm}$ から 0.5nm まで $0.1\text{nm}/\text{step}$ ずつ強制変位を与えた時の凹凸のある面および平面モデルの変形の様子である。図13は対応するモデルにおける単位面積当たりの表面力分布である。この図から、凹凸のある面および下地上面間中心部に作用する表面力が引力から斥力へと変わる位置を確認できる。さらに図12より、同じ位置で、凝着領域に対応した変位がそれぞれ確認できる。ここで、凝着領域端の z 座標より凹凸のある面 - 下地上面間の距離が大きい領域では、上下二面が $x=0$ の位置で z 方向に互いに近付き、凝着現象の前兆が発生していることがわかる。

次に凹凸のある面 - 下地上面間の距離 $h=1.2\text{nm}$ から 0.25nm まで $0.05\text{nm}/\text{step}$ ずつ変位を与えた時の凹凸のある面 - 下地上面間の距離に対する z 方向の表面力の合力を図14に、凹凸の数1つ当りに作用する z 方向の表面力の合力を図15に、凹凸のある面の z 方向の平均変位を図16に、最大凝着力と凹凸の数の関係を図17に示す。まず、図14および図16より、 $n=1$

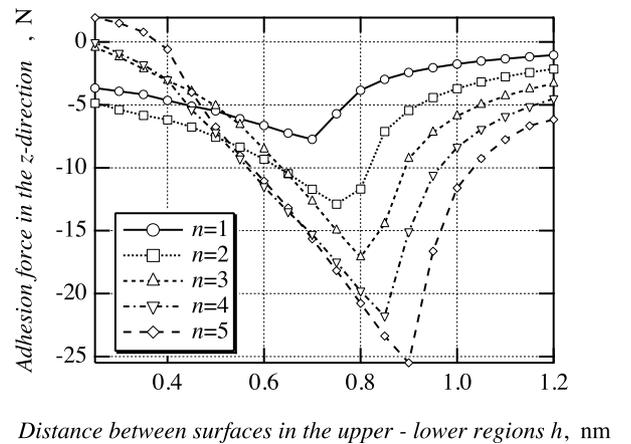


Fig.14 The relationship between the distance of uneven-flat surfaces and the surface force

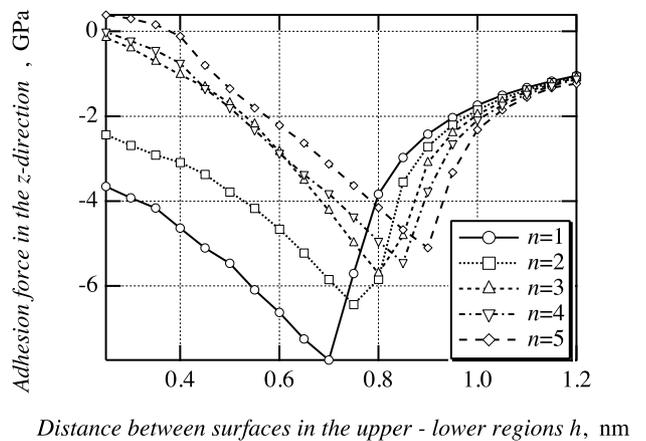


Fig.15 The relationship between the distance of uneven-flat surfaces and the surface force per unit area

から $n=5$ の全てにおいて凝着力のピーク(最大凝着力)が発生している二面間の距離と凝着が発生している二面間の距離が同じであることから、最大凝着力が生じた時に凝着し、その後接触圧力が大きくなると考えられる。図14より凹凸の数 n が多いほど、凹凸のある面 - 下地上面間の距離の大きい位置で、最大凝着力および凝着領域が生じていることがわかる。このことから、凹凸の数 n が多いほど、凝着しやすく、また剥離しにくいと言える。一方で、図15の1個当りの凹凸に作用する引力は、凹凸の数 n が多いほど小さくなっている。これは、凹凸の数が多くなるほど凹面に作用する引力は大きくなるが、それに伴い斥力が凸面に生じ、面が平らになるからである。そのため、凹凸の1個当りで考えた場合、凹凸の数が多いほど、小さい引力で凝着が生じると考えられる。

次に、凹凸の数 n と凹凸のある面に作用する z 方向の引力の合力(最大凝着力 F_{\max}) の関係を図17に示す。図17より凹凸の数 n と最大凝着力 F_{\max} には線形関係があることがわかる。この関係は最小二乗法より $F_{\max} = -4.44n - 3.68$ と表すことができ、凹凸の数が多くなるに伴い、凝着力が大きくなることわかる。

5. 結論

本研究では、マイクロマシン、ナノマシンなどの微小構造物において発生する構造物同士の凝着現象を解明するために、半円柱 - 平面間の凝着を解析対象として、二物体間に van der Waals 力を導入し、2次元境界要素法を用いて凝着解析を行った。以下にその結果を示す。

1. 半円柱 - 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た。その結果から凝着領域および最大凝着力を求めることで、他研究者の凝着理論と比較し、本解析の有効性を確認した。
2. 表面粗さを模擬した凹凸のある面 - 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 0.2nm を保ちながら半円柱が凝着し、それに伴い凝着領域が広がることが確認できた。また、凹凸のある面と平面に

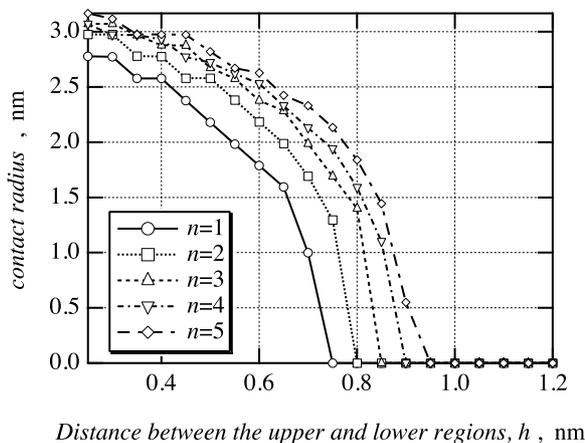


Fig.16 The relationship between the distance of uneven-flat planes and the contact radius.

Hertz の接触圧力に近い表面力が発生した。さらに、最大凝着力、凝着領域を求めた。そして、凹凸の数と最大凝着力の間には線形関係があり、凹凸の数が多いほど、凹凸のある面を押し下げた場合に凹凸のある面 - 平面間の距離が離れていても凝着し易く、その面を押し上げた場合は剥離しにくいことが分かった。

本研究を遂行するに当たり文部科学省科学研究費基盤研究(c)(2)(90143693)および(14550070)の支援を頂いた。ここに謝意を表す。

文献

- (1) Bhushan, B., Handbook of Micro/Nano Tribology ed. Bhushan, B., Micro/Nanotribology and Micro/Nanomechanics of Magnetic Storage Devices and MEMS, CRC Press, (1995), 443-503.
- (2) Bradley, R. S., The cohesive energy between solid surfaces and the surface energy of solids, Phil. Mag., 13(1932), 853-862.
- (3) Johnson, K.L., Kendall, K. and Roberts, A.D., Surface energy and the contact of elastic solids, Proc. R. Soc. London Ser. A, 324(1971), 301-313.
- (4) Baney, J.M., Hui, C.Y., 1997. A cohesive zone model for the adhesion of cylinders. J. Adhes. Sci. Technol. 11, 393-406.
- (5) Maugis, D., 1992. Adhesion of spheres: the JKR -DMT transition using a dugdale model. J. Colloid Interface Sci. 150, 243-269.
- (6) Greenwood, J.A., 1997. Adhesion of elastic spheres. Proc. R. Soc. Lond. A 453, 1277-1297.
- (7) Johnson, K.L., The adhesion of two elastic bodies with slightly wavy surfaces, Int. J. Solids Struct., 32(1995), 423-430.
- (8) Zilberman, S. and Persson, B. N. J., Adhesion between bodies with rough surfaces, Solid State Commun., 123 (2002), 173-177.

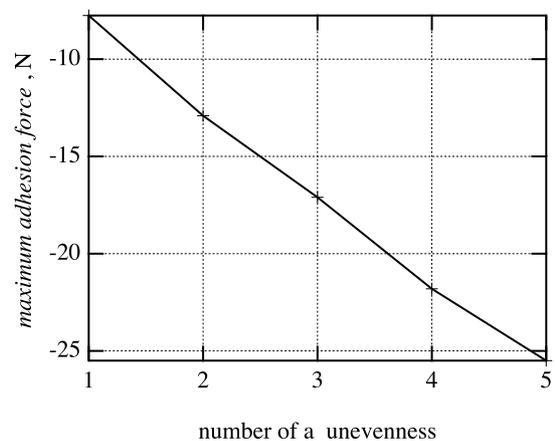


Fig.17 The relationship between the number of unevenness and the maximum surface force