境界要素法を用いた分子間力を考慮した剥離の解析

Analysis of Delamination Considering Intermolecular Force by Boundary Element Method

○ 関 恭平 (長岡技大院)

山本 陽治 (キヤノン株式会社)

正 古口 日出男 (長岡技大)

Kyohei SEKI, Graduate school of Nagaoka
University of Technology

Yoji YAMAMOTO, Canon Inc.

Hideo KOGUCHI, Nagaoka University of
Technology

Key Words: Boundary Element Method, Delamination

1. 緒言

電子デバイスには小型化, 高性能化, 大容量化を目的とし, LSI (Large Scale Integration) がよく用いられる。最新の LSI 内の回路線幅は, 回路の高密度下と小型化や高性能化の実現のため, 数ナノメートルにまで小さくなってきている。機械的接触や熱の影響を受け, 回路配線と基板間に剥離が発生すると不具合の原因となる。この回路配線と基板との剥離を防止するためには, 回路配線と基板間の接着強度を評価する必要がある。本研究では, この回路配線と基板間の剥離現象について, 平面—平面間に生じる表面力による凝着・剥離現象と考え, 二次元境界要素法による解析を行った。表面力として物体間に作用する分子間力を用い, 分子間力は Lennard-Jones 型ポテンシャルから導かれる Van der Waals 力を用いた。

2. 凝着・剥離現象について

2 つの任意の球面間に生じる表面力については多くの研究者が理論を提案している。まず, 剛体球については Bradley らが 2 つの剛体球の半径及び表面エネルギーにより付着力を求める理論を導出している。また, 任意半径の弾性球については Johnson らが JKR 理論を導出した⁽¹⁾。

この JKR 理論で用いられる表面エネルギーを与えるための分子間力 (Lennard-Jones 型) を用いて, Greenwood は球-平面の凝着の数値解析を行った⁽²⁾。Lennard-Jones 型ポテンシャルによる分子間力が作用する場合, 任意の 2 点間の距離 h における単位面積当りの表面力は次式となる。

$$\sigma(h) = \frac{8\Delta\gamma}{3\epsilon} \left[\left(\frac{\epsilon}{h} \right)^3 - \left(\frac{\epsilon}{h} \right)^9 \right] \quad (1)$$

ここで, ϵ は平衡原子間距離, $\Delta\gamma$ は単位面積当りのエネルギーである。

本研究においても, Lennard-Jones 型ポテンシャルによる分子間力を用い, 境界要素法による凝着・剥離の解析を行った。

3. 解析条件

3-1 解析方法 本研究では電子デバイスの回路配線と基板との間に作用する付着力について, 2 物体間の凝着・剥離問題 (図 1) として解析を行った。図 1 に示す領域 1 を銅, 領域 2 を基板としてシリコンとした。解析に用いた材料定数を表 1 に示す。解析手法として境界要素法 (BEM) を用いた。本解析では, 計算誤差を極力小さく抑えるため, 長さ及び力の無次元化を行った境界積分方程式⁽³⁾を用いた。以下に境界積分方程式の無次元化について示す。

Somigliana の境界積分方程式を示す。

$$u_j(P) = \int_S \{U_{ij}(P, Q)t_j(Q) - T_{ij}(P, Q)u_j(Q)\} dS(Q) \quad (2)$$

ここで, P は領域内の点, Q は境界上の点, U_{ij} は変位の基本解, T_{ij} は表面力の基本解である。

式 (1) について, Kelvin の基本解⁽⁴⁾を代入し, 両辺を平衡原子間距離 ϵ で割ると次式となる。

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

ここで,

$$\bar{u}_j(P) = \frac{u_j(P)}{\epsilon}, \quad \bar{r} = \frac{r}{\epsilon}, \quad \Lambda = \frac{\Delta\gamma}{\epsilon} \quad (4)$$

$$f = \left[\left(\frac{\epsilon}{h} \right)^3 - \left(\frac{\epsilon}{h} \right)^9 \right] = \left(\frac{\epsilon}{h} \right)^3 \left[1 - \left(\frac{\epsilon}{h} \right)^6 \right] \quad (5)$$

$\Delta\gamma$ は単位面積当りの表面エネルギーである。

また, 界面に作用する表面力として式 (5) より得られる分子間力を境界条件として与えた。

3-2 解析モデル 図 2 に二次元境界要素モデルの初期状態を示す。計算の際には, 計算誤差を極力小さく抑えるため, モデル寸法と距離を平衡原子間距離 $\epsilon=200\text{pm}$ で割ることにより無次元化している。表面力の影響が大きく, 計算精度を左右すると思われる表面間と角部近傍については細かく節点を配した。領域 2 の表面には表面原子位置に対応して Van der Waals 力の強弱が生じるように $z=0$ を基準として $\pm 10\text{pm}$ の凹凸を設けている。対称性を考慮し, z 軸を対称軸とした 1/2 モデルで解析を行った。領域 1, 2 ともに節点数は 130, 要素数は 65 とした。

解析モデルの初期状態においては, 回路配線と基板間の最短距離を原子間距離 $\epsilon=200\text{pm}$ とした。式 (1) の分子間力はその性質上わずかな距離の変化でも, 非常に大きな表面力が生じることがある。その影響により大変形が生じ, 解析の継続が不可能となる場合がある。したがって本研究では, 解析によって得られた変位量に 5.0×10^{-4} を乗じ, 実際よりも変位量を小さくし, より安定に計算を行えるように反復計算により解を求めた。

この解析では, 領域 1 の上面に z 軸方向に 10pm 刻みで強制変位を与え, 剥離が発生するまで引き上げる。強制変位を与える毎に界面に生じる表面力の平衡状態を求め, 再び強制変位を与えていく。また, 分子間力を求める際には, 相手の平面までの距離だけではなく, 垂線を引いた先の周辺の節点からの距離も用いている。それぞれの距離を用いて求めた分子間力を x, z 成分に分解し, 計算に使用した節点数で割ることで平均化し, 1 節点から受ける分子間力としている。また, 単位面積当りの表面エネルギー $\Delta\gamma=1.0\text{J/m}^2$ とした。

Table 1 Material properties

	region1	region2
Young's modulus [GPa]	123	166
Poisson's ratio	0.34	0.26

Fig.1 Model for analysis

(a) Mesh in model (b) Enlargement of interface
Fig.2 Model for boundary element analysis

4. 解析結果

図3に領域1の界面に作用する表面力と上面に作用する反力の推移を示す。平衡状態を保ち解析が行われ、領域1を初期位置より1570pm引上げたときに剥離が発生したことがわかる。剥離発生前に界面に生じていた付着力は約60N/mだった。

図4に剥離発生前後の平衡状態の変形図を示す。(a)は剥離発生前、(b)は剥離発生後の全体図である。剥離発生まで領域1の引上げ量が増えるにつれて、くびれが発生していることがわかる。また、剥離の発生により平面間の距離が広がっていることがわかる。図5に領域1、図6に領域2の剥離発生前後の界面形状を示す。領域1の引上げに伴い、領域2の表面位置も初期位置 $z=0$ nm から上昇していることがわかる。剥離発生前は角部近傍での変形量が大きく、下に凸の変形となっている。剥離後は領域1の界面位置が大きく上昇しており、領域2の界面位置はほぼ初期位置まで下がっている。このとき、領域1,2ともに初期形状に似た形状となっている。

剥離前後で領域1に作用する x , z 方向の表面力をそれぞれ図7, 8に、領域2に作用する x , z 方向の表面力をそれぞれ図9, 10に示す。 x 方向表面力の値が正のときは外向き、負のときは内向きの力としている。また、領域1では、 z 方

向表面力の値が負のときは吸着力、正のときは反発力とし、領域2では負のときは反発力、正のときは吸着力としている。剥離前は角部で応力集中が発生していることがわかる。剥離後は x , z 方向で表面力がほぼ0となっている。領域1と領域2の剥離前の x 方向表面力の傾向の違いは、領域1,2の表面の凹凸の大きさの違いにより、最大付着力が生じる方向が異なるためと考えられる。

5. 結言

境界要素法による解析結果から、分子間力によって表面が変形していく様子を確認することができた。また、領域1の剥離前後の界面形状と表面力の分布より、角部近傍から反発力が生じ、そこから中心部へ向かい剥離が進行すると考えられる。

文献

- (1) K.L.Johnson, K.Kendall and A.D.Roberts, *Surface energy and the contact of elastic solids*, (1971), Proc. R. Soc. Lond, A.324,pp.301-313.
- (2) J.A.Greenwood, *Adhesion of elastic spheres*, (1997), Proc. R. Soc.Lond, A.453,pp.1277-1297.
- (3) 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 No.2(2008-3), pp.185-190
- (4) 結城良治, 木須博行共著, 境界要素法による弾性解析, 1987, pp.60-61, 培風館.

Fig.3 Reaction force and surface force against displacement in the z-direction

(a) Before delamination (b) After delamination
Fig.4 Deformation of model