435 ニューラルネットワークによる 超微小押込み曲線を用いた多層薄膜材の機械的特性評価

Characterization of Mechanical Properties of Multi-Layered Materials Using Nano-Indentation Curves by Means of Neural Network

○正 結城 宏信 (電 通 大)   正 石川 晴雄 (電 通 大)
多田 真一郎 (電通大院)

Hironobu YUKI, The University of Electro-Communications
1-5-1, Chofugaoka, Chofu-shi, Tokyo 182-8585

Haruo ISHIKAWA, The University of Electro-Communications
Shin-ichirou TADA, Graduate School, The University of Electro-Communications

Key Words: Nano-Indentation, Multi-Layered Material, Mechanical Property, Neural Network,
Finite Element Method

1 はじめに

超微小押込み試験は試料の任意の深さの機械的特性を調べることができる⁽¹⁾⁽²⁾。これまでに2層もしくは3層薄膜材において薄膜の層厚とヤング率の一方が既知であれば、試験で得られる押込み曲線からニューラルネットワークによってもう一方の値が評価できることを示した^{(3)~(5)}。この方法が4層薄膜材にも適用できれば、イオン注入材を近似して評価することが可能になる。本研究は押込み曲線を入力とするニューラルネットワークによって、層厚が既知である4層薄膜材の弾性特性が評価できるかを調べた。また、弾性特性と層厚がともに未知である場合への適用を検討した。

2 4層薄膜材の弾性特性評価

2.1 学習データの作成

ニューラルネットワークの学習データは有限要素法による解析結果から作成した。解析モデルは Fig. 1 に示す2次元軸対称のもので、4節点アイソパラメトリック要素を用い、圧子と試料部分を合わせた要素数を2464、節点数を2649とした。基板(厚さ 9.4 μm)のヤング率は206 GPa、各薄膜(厚さ 0.2 μm)のヤング率は20, 40, 60, 100, 200, 400 GPaを組み合わせた216通りとし、球圧子(半径 3, 10, 20, 30 μm , ヤング率 1000 GPa, ポアソン比 0.1)の押込み深さを押込み荷重 1 mN まで 0.1 mN ごとに構造解析用有限要素法プログラム(MARC)で弾性解析し求めた。なお、試料のポアソン比はすべて0.3とした。

Fig. 1 Analysis model of 4-layered material

2.2 ヤング率の推定

使用したニューラルネットワークは入力層40ユニット、中間層60ユニット、出力層3ユニットから成る3層のもので、荷重 0.1 mN ごとの押込み深さを径の異なる圧子ごとに並べて入力し、各薄膜のヤング率が対応するユニットの出力となるようにした。ただし、入出力値はそれぞれ全学習データの最大値で正規化した。

バックプロパゲーションによって学習を行ったあと、学習データにない組み合わせのヤング率を推定した結果を Fig. 2 (a) に示す。組み合わせによって推定誤差が非常に大きくなっている。そこで、このときの出力値の $\pm 50\%$ の範囲により適当な解があると考え、その範囲のみを学習させた新たなネットワークを用いて再度推定を試みた。結果を Fig. 2 (b) に示す。特定の層に注目すると推定誤差

(a) First network

(b) Second network

Fig. 2 Estimated results of Young's moduli

Fig. 4 Estimated results of thickness and Young's modulus

Fig. 3 Expression of output value for Young's modulus

が Fig. 2 (a) よりやや大きくなるものもあるが、全体としてはどの層に対しても推定誤差が 10 % 未満になり、多層薄膜材のヤング率が適切に評価できるようになったといえよう。

3 2層薄膜材の弾性特性と層厚評価

3.1 ニューラルネットワークの入出力

薄膜層のヤング率と厚さがともに未知な場合も多いので、押し込み曲線から両者を推定することを2層薄膜材を対象に検討した。ニューラルネットワークの入力には出力に対する感度が高くなるよう、薄膜材への押し込み深さと基板のみへの押し込み深さとの差(押し込み深さの変化量)を用いた。また、解を絞り込む範囲を必要以上に広げないため、教師信号を Fig. 3 に示すように与え、範囲の推定時に複数の出力ユニットの値を用いるようにした。

3.2 学習データの作成

ニューラルネットワークの学習データは前章と同様に球圧子による押し込みを有限要素法によって解析し作成した。基板のヤング率は 206 GPa にし、薄膜の厚さを 0.01, 0.075, 0.225, 0.45, 0.5, 0.8, 1, 1.25, 1.5, 2 μm の 10 通り、薄膜のヤング率を 20, 40, 60, 100, 130, 200, 260, 400 GPa の 8 通りとした。

3.3 ヤング率と層厚の推定

推定範囲の絞り込みに使用したニューラルネットワークは入力層 37 ユニット、第 1 中間層 80 ユニット、第 2 中間層 50 ユニット、出力層 7 ユニットから成る 4 層のものである。出力ユニットは 4 ユニットを層厚に、3 ユニットをヤング率に対応させた。ネットワークには前章と同じ球圧子 4 本で得られる押し込み深さの変化量を 0.2 mN から 1 mN になるまで 0.1 mN ごとに計算して学習データごとに正規化した値と最大押し込み深さの変化量を入力として与え、ヤング率と層厚の範囲が出力されるようにした。

Table 1 Estimated ranges of thickness and Young's modulus

Actual value		Estimated range	
t_1 μm	E_1 GPa	$\bar{t}_1$ μm	$\bar{E}_1$ GPa
0.2	110	0.00 ~ 0.50	30 ~ 160
	250	0.00 ~ 0.50	190 ~ 330
	320	0.00 ~ 0.50	260 ~ 400
0.7	110	0.54 ~ 1.00	50 ~ 180
	250	0.48 ~ 0.97	200 ~ 330
	320	0.48 ~ 0.97	220 ~ 370
1.2	110	0.97 ~ 1.48	40 ~ 170
	250	0.97 ~ 1.48	190 ~ 330
	320	0.97 ~ 1.48	220 ~ 370
1.8	110	1.40 ~ 1.90	40 ~ 170
	250	1.45 ~ 1.94	190 ~ 330
	320	1.40 ~ 1.90	230 ~ 370

バックプロパゲーションによって学習を行ったあと、学習に用いていないデータを入力して薄膜のヤング率と層厚の範囲を求めた結果を Table 1 に示す。表から推定範囲が適切に絞り込まれていることがわかる。この範囲のデータだけを学習した新たなネットワーク(入力層 37 ユニット、第 1 中間層 40 ユニット、第 2 中間層 20 ユニット、出力層 2 ユニット)により求めた結果を Fig. 4 に示す。どれも 10 % 未満の誤差で評価できおり、押し込み曲線からヤング率と層厚をあわせて推定することも可能だといえよう。

4 おわりに

超微小押し込み曲線から多層薄膜材の機械的特性をニューラルネットワークを用いて評価することを検討した。層厚が既知の 4 層薄膜材では一つ目のネットワークでヤング率の推定範囲を絞り込み、二つ目のネットワークで値を求めることが有効なことを示した。また、ヤング率と層厚がともに未知な 2 層薄膜材では押し込み深さの変化量を入力に用いることで、同様に両者を正しく推定できることを示した。

参考文献

- (1) M.F.Doerner and W.D.Nix: *J.Mater.Res.*, 1-4, (1986), 601-609.
- (2) G.M.Pharr, W.C.Oliver and F.R.Brotzen: *J.Mater.Res.*, 7-3, (1992), 613-617.
- (3) 今井, 石川, 結城: 機講論, No.98-5, A (1998-11), 243-244.
- (4) 石川, 結城, 今井: 機講論, No.99-16, (1999-10), 341-342.
- (5) 多田, 石川, 結城: 機講論, No.00-1, I (2000-8), 117-118.