球圧子押込みによる薄膜・基板接合体の 応力分布の弾塑性有限要素解析* (薄膜の破壊強度評価を目的として)

香 川 博 之^{*1}, 市 川 昌 弘^{*2}
高 松 徹^{*2}, 桑 野 博 喜^{*3}

Elasto-Plastic Finite-Element Analysis of Stress Distribution in a Film-Substrate System Indented by a Spherical Indenter in Relation to Evaluation of Fracture Strength of Films

Hiroyuki KAGAWA, Masahiro ICHIKAWA,
Tohru TAKAMATSU and Hiroki KUWANO

In electronic devices, magnetic disks and micromechanical systems, thin films are widely used. Improvement of their mechanical reliability requires investigations of methods for evaluating fracture strength of thin films coated on substrates. In order to develop a method for evaluation of fracture strength by means of indentation with a small spherical indenter, an elasto-plastic finite-element stress analysis for the case of an elastic film and a plastic substrate is carried out in this paper. The analysis shows that radial tensile stress σ_r occurs in the film beyond the contact area. An approximate equation for the distribution of σ_r is derived, which is useful for evaluation of the fracture strength.

Key Words: Finite-Element Method, Contact Problem, Numerical Analysis, Stress Distribution, Film, Elasto-Plasticity, Fracture Strength, Indentation, Spherical Indenter

1. 結 言

薄膜は、磁気ディスク装置や電子デバイス、マイクロマシンなどのさまざまな分野に応用されており、薄膜の機械的特性評価が必要不可欠になってきた。著者らは、薄膜を基板にコーティングしたままの状態(薄膜・基板接合体)で薄膜の強度評価を行うことを目指し、薄膜・基板接合体に対して球圧子を押込み、そのとき生じる薄膜のマイクロ破壊現象を利用して薄膜の破壊強度を評価する方法を提案し、検討している。この評価法について検討するためには、球圧子押込みにより生じる薄膜の応力分布を解析する必要があるが、その一環としてこれまでに有限要素法により薄膜・基板接合体に球圧子を押込んだときの弾性解析を行ってきた^{(1)~(3)}。本報では、脆性薄膜を対象にして基板が塑性変形する場合について弾塑性解析を行った。これまでに行われた薄膜・基板接合体の弾塑性応力解析には、円接触圧分布をあらかじめ仮定して基板が塑性変形する場合について解析を行った石川ら⁽⁴⁾の研究や、接

触圧分布をあらかじめ仮定せず剛体円筒圧子の接触問題として薄膜および基板が塑性変形する場合について解析を行った Komvopoulos⁽⁵⁾の研究がある。また、表面を被覆した平行二円筒の接触について解析した白鳥ら⁽⁶⁾の研究がある。しかし、以上の研究は二次元問題として解析を行っており、本研究のような球圧子押込みの場合の応力分布については不明である。球圧子押込みについては、剛体球圧子の場合について解析した北⁽⁷⁾の研究がある。これは、薄膜および基板が塑性変形する場合について解析しており、本研究のような脆性薄膜(薄膜に弾性体を仮定)を対象にしていない。また、北は球圧子押込み時の接触円中心軸上のメディアクラック発生に関係すると考えられる円周方向の応力(接触円中心軸上ではこれは半径方向の応力と同じ)について調べているが、本研究ではリングクラック発生に関係すると考えられる接触表面の応力分布について検討を行った。

2. 解 析 方 法

解析を行うにあたり図1に示すように接触中心を原点にして円筒座標をとった。解析は別報⁽⁸⁾の実験に合わせて、SUS440C ステンレス鋼基板上にイオンビームスパッタでコーティングした SiO₂ 薄膜に SiC 球圧

* 原稿受付 平成5年3月24日。

^{*1} 正員, 電気通信大学大学院 (〒182 調布市調布ヶ丘1-5-1)。

^{*2} 正員, 電気通信大学。

^{*3} NTT 境界領域研究所 (〒180 武蔵野市緑町3-9-11)。

子および鋼球圧子を押込む場合を想定して物性値および寸法を決めて行った。基板については弾塑性体を仮定し、ヤング率 E_s を 210 GPa, ポアソン比 ν_s を 0.30, 降伏応力 σ_{ys} を 1891 MPa, 硬化係数 n_s を 0.49 とした。薄膜については弾性体を仮定し、膜厚 t を $2\mu\text{m}$, ヤング率 E_f を 69 GPa, ポアソン比 ν_f を 0.25 とした。SiC 球圧子については弾性体を仮定し、半径 R を $750\mu\text{m}$, ヤング率 E_b を 420 GPa, ポアソン比 ν_b を 0.18 とした。鋼球圧子については基板と同じ弾塑性体を仮定し、半径 R を $595\mu\text{m}$ (直径 3/64 in.), ヤング率 E_b を 210 GPa, ポアソン比 ν_b を 0.30, 降伏応力 σ_{yb} を 1891 MPa, 硬化係数 n_b を 0.49 とした。

解析は、球圧子押込みによりできる接触円の半径を a とするとき、半径 $r' \geq 20a$, 高さ $z' \geq 20a$ の円筒について行った。その理由は、前報^{(1)~(3)}と同様に半無限体とみなせるようにするためである。要素分割は、計算時間や容量等の制限から 4 節点四角形アイソパラメトリック要素と三角形定ひずみ要素を用い、節点数を 2593, 要素数を 3052 とした。図 2 は SiC 球圧子の場合の解析に用いた要素分割図である。なお、薄膜・基板接合体の接触領域近傍における要素分割には一辺が $0.5\mu\text{m}$ の四角形要素を用いた。また、接触解析を行うため前報⁽¹⁾と同様に定方向 GAP 要素を用いた。この要素は、接触面の z 方向節点力(ここでは圧縮力のみ)を伝達でき、 r 方向には z 方向節点力に摩擦係数を掛けた大きさの節点力を発生することができる。なお、摩擦は球圧子とステンレス鋼基板の材料定数の違いにより生じると考えられるが、材質の異なる 2 種類の球圧子(SiC 球圧子と鋼球圧子)を用いた実験結果⁽⁶⁾には

ほとんど差はなく、摩擦の影響は小さいと考えられることから、本解析では接触部に摩擦力が働かないもの(摩擦係数を零)とした。拘束境界条件として、計算領域円筒の中心軸($r=0$)と側面($r=r'$)の r 方向変位と底面($z=z'$)の z 方向変位を拘束した。また、底面と中心軸および側面の境界($r=0$, $z=z'$ および $r=r'$, $z=z'$)については完全に変位を拘束した。荷重条件については、別報⁽⁶⁾で行った実験範囲にほぼ対応するように、荷重増分を 1.96 N (0.20 kgf) とし 195 回繰返し 382.20 N (39 kgf) まで解析を行った。

解析は、汎用有限要素法解析プログラムの MARC K4 を用い、サンマイクロシステムズ社製のワークステーション SPARC Station 2 により行った。

3. 解析結果

3.1 解析精度の確認 まず、要素分割の妥当性を調べるため、SiC 球圧子の場合の弾塑性解析用に作成した要素分割を用いて膜のない場合(薄膜の材料定数を基板のものに一致させた場合)について弾性解析を行い、理論解⁽⁹⁾と比較することにより精度を検討した。図 3 に接触中心軸上および表面上の応力 σ_r , σ_θ , σ_z , τ_{rz} を比較したものを示す。なお、位置については接触円半径 a_H で、応力値については最大接触圧 p_H (<0) で無次元化して示した。MARC で得られる応力値は各節点における値であり、それは積分点の値を外挿して求められた値である。これより、接触円中心軸上では有限要素解析の結果と理論解が非常によく一致していることがわかる。また、接触円内側では応力分布が多少乱れ、有限要素解析による σ_r および σ_θ が理論解に比べて最大で 10% 程度小さくなっているが、接触円内側を除けば有限要素解析の結果は理論解とよく一致していることがわかる。

次に、弾塑性解析の精度について調べる。弾塑性解

図 1 球圧子押込みと座標

図 2 要素分割 (SiC 球の場合)

析については理論解がないので、膜のない場合で基板に加工硬化しない完全弾塑性体を仮定した Hardy ら⁽¹⁰⁾ の剛体球圧子押込みの有限要素解析結果との比較を行うことにした。なお、膜のない場合についてはこれまでに Hardy らのほかにもいくつかの解析結果^{(11)~(16)} が報告されているが、解析範囲 (P/P^*) がほぼ同じでしかも押込み荷重と接触表面の応力分布との関係について検討していることなどの理由から比較には Hardy らの結果を用いた (P は荷重, P^* は基板が降伏する直前の荷重)。膜のない場合について解析するため、薄膜の物性値 (E_f , ν_f , σ_{yf}) を基板の物性値 (E_s , ν_s , σ_{ys}) と一致させ、加工硬化しないものとして SiC 球圧子押込みについて解析した結果を図 4 に示す。(a) 図、(b) 図、および (c) 図はそれぞれ接触表面における押込み方向応力 σ_z 、半径方向応力 σ_r 、および円周方向応力 σ_θ であり、縦軸および横軸はそれぞれ基板が降伏する直前の最大接触応力 p^* (3 840 MPa) および接触円半径 a^* (32 μm) で無次元化して示した応力値および接触円中心からの距離である。また、図中の各線は球圧子押込み荷重 P がそれぞれ 7.45 N, 19.60 N, 49.00 N, 98.00 N, 196.00 N, 294.00 N (0.76 kgf, 2.00 kgf, 5.00 kgf, 10.00 kgf, 20.00 kgf, 30.00 kgf) の場合の応力分布であり、基板が降伏する直前の荷重 P^* で無次元化すると P/P^* (Hardy らの論文⁽¹⁰⁾ では N/N^* に相当) はそれぞれ 1.00, 2.63, 6.58, 13.15, 26.31, 39.46 となる。なお、応力値は前述の弾性解析と同様に圧縮の最大接触圧(負値)で無次元化したため、負になる場合が引張応力を示している。

p^*/σ_{ys} について比較すると、Hardy らが 1.38 となったのに対して本解析は約 2 となった。これは使用した要素タイプや要素分割、降伏の取扱いが異なる [本解析の場合には 4 節点四角形アイソパラメトリック要

図 3 弾性有限要素解析と理論解の比較

(a) σ_z

(b) σ_r

(c) σ_θ

図 4 接触表面における応力分布(膜のない場合)①降伏直前, ②19.6 N, ③49.0 N, ④98.0 N, ⑤196.0 N, ⑥294.0 N

素により基板の要素分割を行い、各要素の積分点(4点)における相当応力がどれか一つでも降伏応力を越えたときを降伏としているのに対して、Hardy らは三角形定ひずみ要素により要素分割を行い、要素内の相当応力が降伏応力を越えたときを降伏としている] ことなどが影響しているものと考えられる。なお、ヘルツの理論により接触円中心軸上に生じる最大せん断応力の最大値を求め、それがせん断降伏応力に達したときに降伏すると考えれば(すなわちトレスカの降伏条件を用いれば) p^*/σ_{ys} は 1.6 程度になる。

σ_z は(a)図より荷重の増加に伴い接触圧形状が円形から方形に変形し、最大接触圧がほぼ一定値に収束していくのがわかる。 p^* で無次元化した最大接触圧および接触圧分布形状、 a^* で無次元化した接触円半径について Hardy らの結果と比較するとよく一致することがわかった。なお、接触円境界近傍に引張応力(負値)が生じているがこれは計算誤差と考えられる。また、接触円内では応力分布を示す線が滑らかになっていないが、これも計算誤差と考えられる。

σ_r は(b)図より接触円内では荷重の増加に伴い円形から方形に変化することがわかる。接触円境界近傍では引張応力(負値)を生じ、荷重の増加に伴い最大引張応力は増加するが、荷重 P が 196.00 N (20 kgf) を越えたあたりから減少する。また、接触円のさらに外側では荷重の増加に伴い圧縮応力(正值)になり、その値は増加する。Hardy らの結果では、接触円境界近傍に σ_r の引張応力のピークを生じないかあるいは生じていても小さいが、本解析では比較的大きなピークを生じている。この違いのおもな原因は、Hardy らの要素分割が接触円中心から遠ざかるに従って急激に粗くなっており、荷重が大きい場合に接触円外では引張応力を表現できるだけの十分な要素が確保されていないためと考えられる。なお、応力分布を示す線が σ_z と同様に滑らかになっていないが、これは計算誤差と考えられる。

σ_θ は(c)図より接触円内では σ_r と同様の様相を示し、接触円外では荷重の増加に伴い圧縮応力(正值)から引張応力(負値)に変化することがわかる。この接触円外の様相は、引張応力を生じない Hardy らの結果とは異なるが、これも σ_r と同様に Hardy らの要素分割が粗いためと考えられる。

膜のない場合の弾塑性解析には、Hardy らのほかには本研究よりも荷重が2けた程度大きな場合を取扱った村上らの報告⁽¹¹⁾がある。それによると、接触円外では σ_r は圧縮応力になり、 σ_θ は外工硬化の大きい場合には引張応力になっており、村上らの結果は本解析の

図 5 接触表面における応力分布(SiC 球の場合)①降伏直前、②19.6 N、③49.0 N、④98.0 N、⑤196.0 N、⑥294.0 N

延長線上(荷重を十分大きくした場合)にあると考えられる。なお、 σ_θ の分布を示す線も σ_z や σ_r と同様に滑らかになっていないが、これは計算誤差と考えられる。

以上の結果を総合すると、本報の解析は妥当であるものと考えられる。

3・2 結果と考察 まず、SiC 球圧子を薄膜・基板接合体に押込んだ場合の弾塑性解析結果を図5に示す。(a)図、(b)図、および(c)図は図4と同様にそれぞれ接触表面における押込み方向応力 σ_z 、半径方向応力 σ_r 、および円周方向応力 σ_θ であり、縦軸および横軸はそれぞれ基板が降伏する直前の最大接触圧 p^* (3 720 MPa) および接触円半径 a^* (32 μm) で無次元化して示した応力値および接触円中心からの距離である。また、図中の各線は球圧子押込み荷重 P が図4と同様の場合について示した。

σ_z は(a)図より膜がある場合にも膜がなく加工硬化しない場合(図4)と同様に荷重の増加に伴い接触圧形状がだ円形から方形に変化し、最大接触圧がほぼ一定値に収束していくのがわかる。荷重が同じとき膜がなく加工硬化しない場合よりも接触圧は大きくなるが、これは膜の影響ではなく加工硬化の影響によるものと考えられる。また、接触円境界近傍に引張応力(負値)を生じているが、これは膜がなく加工硬化しない場合と同様に計算誤差によるものと考えられる。なお、この引張応力は膜のない場合に比べて小さくなっているが、村上らの報告⁽¹¹⁾によると加工硬化が小さくなると精度が低下するので、本解析の場合にも加工硬化するほうが精度が高くなっているものと思われる。

図6 σ_r の応力分布(SiC球の場合)②19.6 N, ③49.0 N, ④98.0 N, ⑤196.0 N, ⑥294.0 N

σ_r は(b)図より膜のない場合と同様に接触円内では荷重の増加に伴いだ円形から方形に変化することがわかる。接触円外では弾性体と同様に引張応力(負値)を生じ、荷重の増加に伴いその引張応力の最大値は増加する。ここで、 σ_r が図4(膜のない場合)と図5(膜のある場合)とで大幅に異なるのは、弾塑性挙動が異なるためではなく、図4は基板上の応力分布を示し、図5は薄膜上の応力分布を示しているという違いによると考えられる(薄膜のヤング率とポアソン比は基板に比べて小さいので、ひずみが同じだとしても応力は小さくなる)。

σ_θ は(c)図より接触円内では σ_r と同様の様相を示し、接触円外では荷重の増加に伴い圧縮応力(正值)から引張応力(負値)に変化することがわかる。また、 σ_θ が図4と図5で大幅に異なるのも、上述の σ_r の場合と同様の理由と考えられる。

薄膜内部についても同様に応力分布を調べたところ、接触表面の結果(図5)とほぼ一致することがわかった。別報⁽⁹⁾の実験によれば、球圧子押込みにより薄膜にリングクラックが発生するときの荷重 P は98.00 N (10.00 kgf) 以上であるが、この荷重のもとでは a/t は40以上となり、接触半径が膜厚に比べて非常に大きな状態となっている。

球圧子を押し込むとき本解析の範囲では σ_r が接触円外で引張応力になり、リングクラックの発生は主としてこの応力により支配されると考えられる。 σ_θ も引張応力となることがあるが本解析の範囲では σ_r よりも小さい。そこで、次に σ_r についてさらに詳細に検討する。図6に σ_r の分布を示す。図5と異なり、図6では縦軸は各荷重 P から求まるヘルツの最大接触圧 p_H (弾性体の場合の最大接触圧)で、横軸は接触円半径 a で無次元化して示した。これより、図5(b)でも述べたように接触円内では荷重の増加に伴いだ円形から方形に変化し、接触円外では弾性体の場合と同様に引張応力が生じることがわかる。この引張応力は、接触円境界から遠ざかるに従って小さくなり、荷重が大きい場合には圧縮応力に変わる。また、接触円外の応力分布に着目すると、本解析の範囲ではヘルツの最大接触圧 p_H で無次元化すればほぼ一致することがわかる。接触円外側の引張応力の分布を両対数表示すると図7の各点のようになる(p_H で無次元化すると引張応力は負値になるが、図7では絶対値をとって表示した)。これより、接触円境界における最大引張応力に比べ1~2けた程度小さくなるまでほぼ直線で近似できることがわかる。したがって、この直線とみなせる領域の応力分布は、定数 α および β を用いて

図7 σ_r の分布の両対数表示 (SiC 球の場合)

$$\sigma_r = \alpha \cdot \sigma_{r\max} \left(\frac{a}{r} \right)^\beta \quad (1)$$

と近似的に表すことができる。ここで、 $\sigma_{r\max}$ は膜のない弾性体(ここではステンレス鋼基板)に球圧子を押込んだときの接触円境界における σ_r の最大値である。図中の直線は、ほぼ直線とみなせる範囲(接触円境界から18点までの範囲)に接触円境界の応力を通して最小二乗法で直線回帰を行った結果である。式(1)の α および β は、この直線の切片および傾きに相当し、別報⁽⁶⁾の実験でリングクラックが発生した荷重 $P \geq 98$ N に対する解析結果(98.00~382.20 Nの解析結果)の平均をとると、それぞれ約0.65および約8となることからわかる。また、接触円半径 a をヘルツの接触理論より求まる接触円半径 a_H (ここではステンレス鋼基板をSiC球圧子で押込むときの)で無次元化すると図8の実線のように、荷重の増加に伴い接触円半径 a はヘルツの理論で求まる接触円半径 a_H よりしだいに大きくなっていくことがわかる。別報⁽⁶⁾の実験結果よりリングクラック発生荷重の平均値は約178 N (18.2 kgf) となるが、この荷重の近傍では接触円半径 a は a_H の1.18倍程度になる。

次に、鋼球圧子を薄膜・基板接合体に押込んだ場合について弾塑性解析を行った。その結果について検討したところ、鋼球圧子の場合にも各応力 (σ_z , σ_r , σ_θ) の分布形状はSiC球圧子の場合(図5)にほぼ一致し、その大きさもほぼ等しいことがわかった。また、接触円外の σ_r はヘルツの最大接触圧 p_H で無次元化すればほぼ一致することがわかり、 σ_r の応力分布はSiC球圧子の場合と同様に式(1)で近似できた。この場合、 α および β はそれぞれ約0.67および約8となった。また、接触円半径 a をヘルツの弾性解より求まる接触円半径 a_H で無次元化すると図8の破線のように、SiC球圧子の場合に比べ若干小さいが、その差は小

図8 接触円半径

さく、実線と破線はほぼ一致するとみなすことができる。

4. 結 論

本報では、球圧子押込みによる薄膜の破壊強度の評価に必要な応力解析として、薄膜・基板接合体に球圧子を押込んだ場合の弾塑性応力解析(基板が塑性変形する場合)を有限要素法により行った。材料定数および寸法を別報⁽⁶⁾の実験に合わせて解析を行い、薄膜内部の応力分布について検討を行った結果、以下の結論を得た。

(1) 弾性解析^{(1)~(3)}の場合と同様に、弾塑性解析の場合にも接触円境界近傍の薄膜表面に半径方向の引張応力が生じる。

(2) 荷重の増加に伴い円周方向にも引張応力が生じるが、半径方向の引張応力に比べて小さい。

(3) 薄膜の半径方向引張応力 σ_r の分布は本解析の範囲では式(1)で近似できる。

本研究は文部省科学研究費補助金[一般研究(B)]により行われたことを記し、謝意を表する。

文 献

- (1) 香川・市川・高松, 機論, 58-546, A(1992), 223.
- (2) 香川・市川・高松・桑野, 機論, 58-546, A(1992), 230.
- (3) 香川・市川・高松, 機論, No. 910-71, A(1991-11), 164.
- (4) 石川・石井・内田, 機論, 56-532, A(1990), 2548.
- (5) Komvopoulos, K., *Trans. ASME, J. Tribology*, 111 (1989), 430.
- (6) 白鳥・齊藤・橋本, 機論, No. 910-71, A(1991-11), 167.
- (7) 北, 機論, 57-536, A(1991), 752.
- (8) 香川・市川・高松・桑野, 機論, 60-570, A(1994), 396.
- (9) Hamilton, G. M. and Goodman, L. E., *Trans. ASME, J. Appl. Mech.*, 33(1966), 371.

- (10) Hardy, C., Baronet, C. N. and Tordion, G. V., *Int. J. Num. Meth. Eng.*, **3**(1971), 451.
 - (11) 村上・袁, 機論, **57**-533, A(1991), 162.
 - (12) Lee, C. H. and Kobayashi, S., *Int. J. Mech. Sci.*, **14**(1972), 417.
 - (13) Follansbee, P. S. and Sinclair, G. B., *Int. J. Solids Struct.*, **20**(1984), 81.
 - (14) Sinclair, G. B., Follansbee, P. S. and Johnson, K. L., *Int. J. Solids Struct.*, **21**(1985), 865.
 - (15) Johnson, K. L., *Contact Mechanics*, (1985), 178, Cambridge Univ. Press.
 - (16) Hill, F. R. S., Storakers, B. and Zdunek, A. B., *Proc. Roy. Soc. Lond., A*, **423**(1989), 301.
-