球面と平面の Lennard-Jones 表面力による
吸着・接触特性の数値解析*小 野 京 右^{*1}Numerical Analysis of Contact Mechanics Between a Spherical Slider and
a Flat Disk Due to Lennard-Jones Surface ForcesKyosuke ONO^{*2}^{*2} Storage Technology Research Center, Central Research Laboratory, Hitachi Ltd.,
1 Kiriharacho, Fujisawa-shi, Kanagawa, 252-8588 Japan

A numerical method for analyzing the elastic contact mechanics due to Lennard-Jones (LJ) surface forces between a spherical slider and a flat disk is presented by taking account of roughness contact effect. First, neglecting the effect of attractive force at asperity contact, various features of elastic contact of 2-mm radius slider are presented in relation to the distance between mean roughness heights. It is revealed that the contact behaviors at a small mean roughness height distance can not be predicted either by JKR or DMT theory. A simple equation to evaluate LJ adhesion force after contact is presented. Next, contact characteristics of 1- μm radius sphere and disk are presented to examine how LJ attractive force at asperity contact can be evaluated. It is found that the adhesion force can be approximated by JKR or DMT theory if the surface energy can be related to Hamaker constant properly. Then, a simple equation to evaluate LJ attractive force at asperity contact is presented for the roughness contact analysis.

Key Words: Contact Mechanics, Nanotribology, van der Waals Forces, Lennard-Jones Forces, Head/Disk Interface

1. 緒 言

Lennard-Jones(LJ)表面力に基づく吸着・接触現象は、かねてより表面科学の基礎分野で研究されてきたが^{(1)~(3)}、近年、磁気ディスク装置やMEMSのトライボロジー分野で関心が高まっている。特に磁気ディスク記憶装置では、ヘッドと磁気ディスクの浮上すきまを10 nm以下に低減する際に直面した浮上ヘッドスライダの自励振動を解明するため、van der Waals(vdW)力の浮上特性に及ぼす影響が解析された^{(4)~(6)}。一方ではvdW力を考慮した吸着・接触力学の基礎的研究が行われている^{(7)~(9)}。筆者は、浮上すきま5 nmではvdW圧力よりメニスカス圧力の方が2桁以上大きく、浮上圧力より大きくなることから、ヘッドスライダ自励振動は潤滑膜の吸着力と摩擦力に起因するという立場からそのメカニズムを明らかにし⁽¹⁰⁾⁽¹¹⁾、この問題を解決するには、従来の平面・平面インターフェイスではなく、球面・平面インターフェイスとしなければならないことを提唱した⁽¹²⁾。この

設計概念は当初浮上すきまのばらつきを抑圧するために開発された熱膨張突出ヘッドスライダ方式⁽¹³⁾により実現され、現在のヘッド浮上量は5-6 nm程度に低減されている。現状の熱突出面の等価曲率半径は20-30 mm程度であることを考慮すると、メニスカスによる吸着力は最大で $4\pi R\gamma=6-9\text{ mN}$ であり、浮上力の20-30%である。よってスライダは激しく自励振動しないものの、接触時に生じる振動はなおも潤滑剤の吸着力や摩擦力が関係していると予想される。

しかし、今後1 Tb/in²以上の記録密度を実現するには、平均粗さ面間距離で定義される浮上すきまを3 nm以下にする必要があり、粗さ突起の低減と共に潤滑膜厚さ、特に流動層厚さを極力低減する必要があると考えられる。筆者の計算によれば、流動潤滑膜厚さを0.3 nm以下にすればメニスカス架橋長は1 nm以下となり、よってvdW力による固定潤滑膜を含めた固体面の吸着・弾性接触が支配的な現象になると予想される。このため球面と平面が接近・接触したときLJ表面力に基づく吸着・接触現象を表面粗さ効果をも考慮して数値解析する手法の開発が望まれる。

LJ表面力による球面と平面の弾性接触問題の解法には、接触領域外の吸引圧力を無視したJohnson-Kendall-Roberts(JKR)理論⁽¹⁾、接触領域内の吸引圧

* 原稿受付 2008年7月16日。

^{*1} 正員、フェロー、(株)日立製作所中央研究所ストレージテクノロジーリサーチセンター(〒252-8588 藤沢市桐原町1)。
E-mail: ono_kyosuke@nifty.com

力を無視した Derjaguin-Muller-Toporov (DMT) 理論⁽²⁾, 両者の間をつなぐ Maugis 理論⁽³⁾, 粗さ接触へ適用した Shi-Polycarpou 理論⁽⁷⁾ などがあるが, いずれも単純化したモデルに基づく理論である。一方, Attard & Parker⁽¹⁴⁾ や Greenwood⁽¹⁵⁾ は, 弾性変形特性と LJ 表面圧力特性式から数値解析によって球面と平面が接近したときの変形, 吸着力などを解析し, JKR, DMT 理論等と比較した。しかしこれらの解析では接触面は粗さのない理想的な平面と仮定しており, 原子平衡距離より大きな粗さで接触する実際の固体面の接触問題を如何に解くかが課題である。

そこで本研究では, 1 nm 前後の平均粗さ面間距離をもつ球面と平面の LJ 表面力を考慮した粗さ接触問題の解法を確立することを目的とする。紙面の制限のため, まず本報では粗さ突起部の LJ 表面力と変形を無視して, 粗さ平均面間の吸着・変形問題を解くと共に, 単一粗さ突起部の吸着力の正しい評価法を明らかにする。第3章では接触面の平均粗さ面間距離 σ を考慮して, 平均粗さ面間の LJ 表面圧力による変形および弾性接触特性を解く手法を述べる。第4章ではこの解法により筆者ら⁽¹⁶⁾ が動的吸着力を計測した半径 2 mm の球面ガラススライドとアルミ基板磁気ディスク面の弾性接触特性の計算結果を示す。次に第5章では, 粗さ突起接触部の LJ 表面力を評価するために, 曲率半径 1 μm の球面と平面の接触特性を明らかにし, 突起接触部の LJ 表面力を表面エネルギーを用いて予測する方法を示す。

2. 記号・単位

- A : Hamaker 定数 J
- E^* : 接触面の合成ヤング率 Pa
- R : 球面スライドの曲率半径 m
- R_a : 粗さ突起の曲率半径 m
- $O-r\theta z, O-s\varphi z$: 円筒座標系
- P_{LJ} : Lennard-Jones 吸引圧力 Pa
- P_H : Hertz 接触圧力 Pa
- $b(r)$: 球面スライドの表面の位置 m

d : 球面スライドの頂点の z 位置, 初期分離量 m

$h(r)$: スライドとディスクのすきま m

h_0 : スライド頂点とディスクのすきま m

r_b : 解析領域半径 m

r_c : 接触領域半径 m

$w(r)$: ディスクの変形分布 m

$w_G(r)$: 単位力に対する変形分布 m/N

z_0 : 原子間平衡距離 mm

$\Delta\gamma$: 接触面の表面エネルギー変化量 N/m

σ : 平均粗さ面間距離 m

ρ : 粗さ突起密度 m^{-2}

F_{LJ} : Lennard-Jones 吸引力 N

F_{ex} : スライドからディスクへの外力 N

3. 理論解析法

3.1 解析モデルと基礎方程式 図1に球面スライドとディスク面との LJ 表面圧力による変形と接触の解析モデルを示す。球面と平面の変形は軸対称なので, 相互作用力が作用しないディスク平面上に原点を有し, 球面の頂点を通る垂直線を z 軸とする円筒座標系 $O-r\theta z, O-s\varphi z$ を用いる。球面の曲率半径を R , 頂点の z 位置高さを d とする。ディスク面の原点からの作用点および観測点の位置座標を $(s, \varphi), (r, \theta)$ とすると, s 位置の球面とディスクに作用する単位集中力 (z 方向を正にとる) による弾性変形は以下の Green 関数で表される⁽¹⁷⁾。

$$w_G(r, s) = \frac{1}{\pi E^* \sqrt{r^2 + s^2 - 2rs \cos(\theta - \varphi)}} \quad \dots\dots\dots (1)$$

ここで, E^* は接触面の合成ヤング率で, 両面のヤング率を E_1, E_2 , ポアソン比を ν_1, ν_2 とすると, 次式で与えられる。

$$\frac{1}{E^*} = \frac{1 - \nu_1^2}{E_1} + \frac{1 - \nu_2^2}{E_2} \quad \dots\dots\dots (2)$$

以下では, 球面を剛体と考え, 等価ヤング率 E^* をもつディスク面が変形すると考える。平行な2平面のすきま $h(r)$ に作用する LJ 圧力は, Hamaker 定数を A , 原子平衡間隔を z_0 として次式で与えられる⁽⁴⁾。

$$P_{LJ}(h) = \frac{A}{6\pi h^3} \left[1 - \left(\frac{z_0}{h} \right)^6 \right] \quad \dots\dots\dots (3)$$

一方, 球面スライドの z 方向高さ $b(r)$ は,

$$b(r) = d + \frac{r^2}{2R} \quad \dots\dots\dots (4)$$

で与えられる。 d は剛体球面の頂点の z 座標高さで, 弾性変形を解く場合の初期値なので, 初期分離量とよぶ。 $d < 0$ のとき押し込み量を意味する。

Fig. 1 Analytical model

ディスク面の $z=0$ の面からの弾性変形を $w(r)$ とすると、スライダとディスク面のすきま $h(r)$ は

$$h(r) = b(r) - w(r) \quad (5)$$

で与えられる。スライダとディスク面が固体接触していない場合、ディスク面の変形 $w(r)$ は

$$w(r) = \iint P_{LJ}(h(s)) w_G(r, s) ds d\varphi \quad (6)$$

で与えられる。両面が接触しない場合には、式(1)～(6)を離散化し、連立させて数値計算する。 $w(r)$ と $h(r)$ は連成しているので、繰り返し計算により解く。

3.2 接触問題の数値解析法 実際には吸着力により両面が接近すると、 z_0 より大きい表面粗さで接触する。そこで粗さによる両面の平均粗さ高さ面間の距離を σ とすると、次式が成立する。

$$h(r) = b(r) - w(r) \geq \sigma \quad (7)$$

突起接触面における LJ 表面力の影響は、後述するように $\sigma < 1.0 \text{ nm}$ では 2 次的効果と予測されるので本論文では無視する。両面が粗さにより接触すると、接触応力による反力が発生する。この応力は吸着力がない場合は Hertz 圧力で与えられる。吸着力が作用する場合、厳密に Hertz 圧力となるかは必ずしも明確ではないが、ここでは、JKR-DMT 理論のように以下の Hertz 圧力が作用すると仮定する。

$$P_H(r) = p_m \left[1 - \left(\frac{r}{r_c} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad p_m = \frac{2E^* r_c}{\pi R} \quad (8)$$

ここで r_c は接触面半径である。よって接触したときは式(13)を式(6)に加えて、ディスク変形は

$$w(r) = \iint (P_{LJ} - P_H) w_G(r, s) ds d\varphi \quad (9)$$

で与えられる。ここで Hertz 圧力による変形にマイナス符合がついているのは、 $-z$ 方向の圧力だからである。接触問題では、式(1), (3), (4), (7), (8), (9)を満たす解を解く。

まず Green 関数 w_G の円周方向の積分は第 1 種楕円積分に相当するが、母数 $k = 2rs/(r^2 + s^2)$ に関してテーラー展開し、円周方向に項別積分して半径方向座標に関する影響係数を求めた。テーラー展開項数は Hertz 接触問題を解き変形分布が厳密理論解に十分な精度で得られる 2000 項を選んだ。式(6)ないし(9)の半径方向の積分は半径座標を N 個の代表点で表し、物理量を離散値化して計算した。

図 2 に数値計算の flowchart を示す。初期分離量 d の値を与え、 $d > \sigma$ の場合、まず P_{LJ} のみによる変形(6)を解く。次に式(7)のディスク変形の非接触条件を満たすか否かを調べ、不等式を満たすなら非接触問題として繰り返し計算する。式(7)を満たさない場合には、満たさない領域の境界 r_c を求め、 $r \leq r_c$ で等号が成立するように $w = b - \sigma$ とする。ただし初期分離量が $d < \sigma$ の場合は Hertz 理論により $r_c = [R(\sigma - d)]^{1/2}$ とした。次にこの修正されたすきま $h(r)$ と接触半径 r_c を用いて式(9)から変形 $w(r)$ を求める。このプロセスを繰り返した。収束性は、前回と今回の変形分布 w の各点における差の絶対値の総和の、各点の変形分布の絶対値の総和に対する比 Er が ε 以下になることにより判断した。半径方向の分割数 N は Hertz 圧力の変形を求める場合 100 程度で十分であるが、 $N = 300$ とした。最終解は LJ 圧力と Hertz 圧力により接触領域で $w_i = b - \sigma$ が成立するはずである。しかし接触領域の離散性により、接触領域が厳密解より大きければ Hertz 接触圧力が大きくなりすぎて全体が分離し、少なければ厳密解以上に接触領域が広がる恐れがある。これを防ぐために接触領域が狭い領域から逐次厳密解に近似させていくことに配慮し、且つ繰り返し計算における接触半径 r_c の離散値 M の更新とディスク変形 w の更新にそれぞれ個別の緩和係数を用いた。また $\varepsilon = 10^{-6}$ を目標とするが、 10^{-2} 程度でも各力への影響はほとんどないので近似解とした。

収束解における吸着圧力分布 P_{LJ} 、Hertz 接触圧力分布 P_H から、接触外圧力 Q 、LJ 吸引力 F_{LJ} 、Hertz 圧力による弾性接触力 F_H 、ディスクへの外力 F_{ex} を次式で求めた。

接触外圧力

$$Q = (P_{LJ} - P_H) \quad (10)$$

Fig. 2 Flowchart of numerical calculation method

LJ 吸引力

$$F_{LJ} = \sum_{i=1}^N P_{LJ} \dots \dots \dots (11)$$

Hertz 接触力

$$F_H = - \sum_{i=1}^M P_H \dots \dots \dots (12)$$

ディスク面への外力

$$F_{ex} = \sum_{i=1}^N (P_{LJ} - P_H) \dots \dots \dots (13)$$

F_{LJ} , F_{ex} はスライダからディスク面に作用する力だから、スライダへの作用力は $-F_{LJ}$, $-F_{ex}$ である。

4. 数値計算結果

計算に用いたパラメータの値を表 1 に示す。球面スライダの衝突実験に用いた曲率半径 $R=2$ mm のガラススライダと磁気ディスクの材料特性を用いた。Hamaker 定数 A は 10^{-19} J を基準値とした。原子平衡間隔 z_0 の正確な値は分からないが DLC 膜の炭素の文献値が 0.17 nm で, Israelachvili⁽¹⁸⁾, Mate⁽¹⁹⁾ の著書では 0.165 nm が用いられているのでこれを採用した。 σ が 0.3 nm 以上であれば LJ 表面力への反発力の影響はないと考えてよい。解析領域 r_b は, 図 1 で LJ 表面力が作用しない $h_m=10$ nm となるような領域を選んだ。

まず図 3 に, $\sigma=1.0$ nm の場合に, 初期分離量 d を 2 nm から -5 nm まで 0.2 nm 間隔で小さくしていったときの, (a) ディスクの変形分布 w , (b) LJ 吸引圧力 P_{LJ} , (c) Hertz 接触圧力 P_H , (d) LJ 吸引力 ($-F_{LJ}$), スライダ外力 ($-F_{ex}$), Hertz 接触力 F_H と初期分離量 d の関係, (e) スライダ外力 $-F_{ex}$ と接触半径 r_c の関係, および (f) の各分離量において収束解が求められた繰り返し回数 IN (○印), 収束誤差 Er の $-10 \log(Er)$ (*印) の値を示す。この計算では収束の判定条件を $\varepsilon=10^{-6}$ としている。図 (f) から分かるように, 非接触の解は, 繰り返し回数 20 回以下

で $-10 \log(Er)$ は 60 以上なので $Er < 10^{-6}$ となっている。また接触状態の解は, 高々 90 回で $Er < 10^{-6}$ となる解が得られている。 $\sigma=1.0$ nm の場合には, 図 (b) から, 平均面間の LJ 吸着圧力は 5 MPa 程度で, 図 (c) から Hertz 圧力の $1/10$ 程度である。よって図 (a) のディスク変形は Hertz 接触変形に近い。図 (d) から $d=-5$ nm のときの F_{LJ} は 0.25 mN 程度あるが, スライダに作用する吸着外力の最大値 ($-F_{ex}$) は図 (e) から 0.03 mN 以下である。図 (e) に, JKR 理論式 $r_c^3 = 3R\{(-F_{ex}) + 3\pi\Delta\gamma R + [6\pi\Delta\gamma R(-F_{ex}) + (3\pi\Delta\gamma R)^2]^{1/2}\}/4E^*$, および DMT 理論式 $r_c^3 = 3R[(-F_{ex}) + 2\pi\Delta\gamma R]/4E^*$ による接触半径と外力の特性⁽²⁰⁾ をそれぞれ破線と実線で示した。これから分かるように, 本数値解析解は JKR と DMT 理論のほぼ中間の値を示している。しかし $\sigma=1.0$ nm では LJ 表面力は小さく Hertz 接触解に近いので, これらの理論解の差は小さい。なお, 接触領域の間隔が $\sigma \neq z_0$ の場合の JKR, DMT 理論における表面エネルギー $\Delta\gamma$ の計算法は後述する。

図 4 は $\sigma=0.5$ nm の場合の図 3 と同じ諸量で, 図 3 との比較から σ の影響が分かる。まず図 (f) から数値解の収束性は, 非接触解は良いが, 接触問題ではほ

Fig. 3 Calculated results of (a) Disk deformation $w(r)$, (b) LD pressure P_{LJ} , (c) Hertzian contact pressure P_H , (d) LJ force $-F_{LJ}$, external force $-F_{ex}$, and Hertzian contact force F_H versus initial separation d , (e) Contact radius r_c versus external force $-F_{ex}$ and (f) Iteration number IN and numerical error $-\log(Er)$ when d is changed from 2 nm to -5 nm by 0.2 nm ($R=2$ mm, $\sigma=1.0$ nm, $\varepsilon=10^{-6}$)

Table 1 Parameter values used for calculation

Physical parameter	Unit	value
Disk Young's modulus E_1	MPa	163
Slider Young's modulus E_2	MPa	83
Disk Poisson ratio, ν_1		0.3
Slider Poisson ratio, ν_2		0.21
Slider radius, R	mm	2
Hamaker constant, A	J	10^{-19}
Atomic equilibrium distance, z_0	nm	0.165
Asperity height, σ	nm	0.5, 1.0
Analytical region height h_m	nm	10

とんどの場合 $Er=10^{-2}$ 弱となっており、繰り返し回数も制限値の $IN=200$ となっている。 $Er=10^{-2}$ 弱の場合、最終的に接触領域が完全に収束せず圧力誤差が減少しない状況に陥っていた。最悪 $Er=0.005$ 程度となっているが、積分値である力はもちろん、 $w(r)$ 、 P_L など滑らかな分布で、Hertz 圧力領域と接触変形領域がほぼ一致しているので信頼できる解と考えられる。図 4(b) から、接触領域の P_L は 40 MPa 程度と図 3(b) に比べ 10 倍近く大きくなったので、ディスク変形 (a) は接触領域の周辺で初期ディスク面より高くなり接触領域が大きくなる。このため吸着力が大きくなり、 $-F_{ex}$ の最大値は図 (e) から 0.3 mN 程度となる。また吸着力だけによる接触半径は図 (e) より $r_c=3.7 \mu\text{m}$ となり、スライダ外力と接触半径の特性は JKR 理論に似ているが、その値は JKR, DMT 理論値から大きくずれている。JKR 理論では、 $-F_{ex}$ の最小値が pull-off 力である。しかし本解析では d を小さくしていくと、非接触状態で微小に $-F_{ex}$ が負となり、また $d \sim 1 \text{ nm}$ で突然吸着し [図 (d) 参照]、さらに $-F_{ex}$ は減少して極小値をとり以後弾性反力が優勢となり $-F_{ex}$ が増大する。図 4 の解は接近過程であるが、分離過程でもほとんど同じで吸着・分離

のヒステシスは小さかった。

図 5(a), (b) はそれぞれ図 3, 4 の $\sigma=1.0, 0.5 \text{ nm}$ の場合の球面頂点の最終分離量 $h_0=b(0)-w(0)$ と LJ 吸着力 F_{LJ} の関係である。比較のため、剛体の球と平面の間の vdW 力 $F_{vr}(=AR/6h_0^2)$ およびメニスカス力 $F_m=4\pi R\gamma$ ($\gamma=22 \text{ mN/m}$) をも示した。初期分離量 d は 2 nm から -5 nm まで 0.2 nm ずつ変化させているが、弾性変形を考慮した場合の最終分離量 h_0 は、非接触状態では対応する初期分離量 d より少し小さい値となっている。また $h_0=1.0 \text{ nm}$ のときの F_{LJ} と F_{vr} の比較から分かるように、弾性変形のため F_{LJ} は F_{vr} よりやや小さくなっている。ディスク面がスライダに吸着すると $h_0=\sigma$ へ跳躍する。 $d \sim 1.1 \text{ nm}$ で吸着するので、 $\sigma=1.0 \text{ nm}$ のときには跳躍は明瞭には分からないが、 $\sigma=0.5 \text{ nm}$ では $d=1.0 \text{ nm}$ を与えると、 F_{LJ} の収束解は $h_0=\sigma=0.5 \text{ nm}$ へ跳躍して F_{vr} よりかなり大きくなり、 $d=0.6 \text{ nm}$ 以下でメニスカス力より大きくなっている。

ディスクが球面スライダに接触した後の吸着力は、接近量 h_0 における剛体の球と平面の吸引力 F_{vr} と、すきま $h_0(=\sigma)$ の平行平面間の吸引圧力と吸着面積との和で表されると考えられる。 F_{vr} は式 (3) をすきま h が半径座標 s (図 1 参照) の関数であることを考慮して全面積で積分すると得られ、後者は式 (3) に接触面積 πr_c^2 をかけて得られる。よって接触時の吸引力は

$$F_{LJ*} = \frac{AR}{6h_0^2} \left(1 - \frac{z_0^6}{4h_0^6} \right) + \frac{Ar_c^2}{6h_0^3} \left(1 - \frac{z_0^6}{h_0^6} \right) \quad \dots\dots\dots (14)$$

で与えられる。 $z_0/h_0 < 0.5$ の場合反発力項は無視できる。そこで図 4 の計算例において、図 4(e) に示す r_c の数値計算値と $h_0=\sigma$ を式 (14) に代入して計算した $-F_{LJ*}$ を図 4(d) に $\bullet$ 印で示した。図 4(d) から、 $\circ$ 印で示した $-F_{LJ}$ の数値計算値と $\bullet$ 印の $-F_{LJ*}$ はよく一致していることがわかる。

$R=1\text{--}2 \text{ mm}$ の球面で $\sigma=0.4$ 以下になると接触時の F_{LJ} が急激に増大し、接近過程と分離過程でヒステ

Fig. 4 Calculated results of (a) Disk deformation $w(r)$, (b) LD pressure P_{LD} , (c) Hertzian contact pressure P_H , (d) LJ force $-F_{LJ}$, external force $-F_{ex}$, and Hertzian contact force F_H versus initial separation d , (e) Contact radius r_c versus external force $-F_{ex}$ and (f) Iteration number IN and numerical error $-\log(Er)$ when d is changed from 2 nm to -5 nm by 0.2 nm ($R=2 \text{ mm}$, $\sigma=0.5 \text{ nm}$, $\epsilon=10^{-6}$)

Fig. 5 F_{LJ} , F_{vr} and F_m vs. h_0 for (a) $\sigma=1.0 \text{ nm}$ and (b) $\sigma=0.5 \text{ nm}$

レシスが生じるようになるが、この現象は別途論ずることとし、次章では粗さ突起接触部の吸着・接触解を示し、突起接触部の LJ 表面力を考慮する解析法を考察する。

5. 突起接触部の LJ 吸着力の解法

5.1 曲率半径 $R=1\ \mu\text{m}$ の球面と平面の LJ 吸引力

上記の解析では粗さ接触時の LJ 表面力は無視していたが、後述のように平均粗さ高さ面距離 σ が $1.0\ \text{nm}$ 程度以上では突起接触部の LJ 表面力を考慮する必要がある。突起接触も図 1 のような球面と平面の接触モデルで表現できる。粗さ突起面に粗さがなければ原子平衡距離 z_0 で接触していると考えられるが、粗さにはフラクタル性があるから突起面も微小な粗さ高さ σ で接触していると考えられる。そこで、磁気ディスク面やシリコン基板面のように粗さの rms 値が $0.5\ \text{nm}$ 以下の面を対象にすると、突起半径が $R=1\ \mu\text{m}$ 前後であるから、 $R=1\ \mu\text{m}$ の場合に突起頂点近傍面の

粗さ高さ σ が $z_0 \leq \sigma$ の範囲のとき、その吸着力がどのように表現できるかを調べる。

図 6 は $R=1\ \mu\text{m}$ で、 $\sigma=0.2, 0.18, 0.165\ \text{nm}$ の場合について、初期分離量を $d=0.6\ \text{nm}$ から $-0.5\ \text{nm}$ まで $0.1\ \text{nm}$ ずつ減少させていったときの、(a) ディスク変形 w 、(b) LJ 圧力 P_{LJ} 、(c) スライダへの LJ 吸引力 F_{LJ} と最終分離量 h_0 に対する関係、(d) 接触半径 r_c とスライダ作用力 $-F_{ex}$ の関係、および (e) $-F_{LJ}$ と $-F_{ex}$ の初期分離量 d に対する関係である。各図において σ の相違は図中の凡例で示している。まず、図 (a) のディスク変形の σ に対する変化は小さいが、図 (b) の接触領域の P_{LJ} の最大値は $\sigma=0.20\ \text{nm}$ (実線) で数百 MPa に増大し、 $\sigma=0.18\ \text{nm}$ (破線) では接触領域の LJ 圧力は接触領域周辺の圧力より小さくなり、 $\sigma=z_0=0.165\ \text{nm}$ (点線) では零となっている。これは式 (3) の反発圧力の効果から十分理解できる。図 (c) の実線は、式 (14) の右辺第 1 項 $AR[1-(z_0/h_0)^6/4]/6h_0^2$ で与えられる剛体の球面・平面間の LJ 吸引力を F_{LJr} で表し、これを描いた曲線である。極大値は $h_0=z_0$ のとき $F_{LJr}=AR/8z_0^2$ となり、この値を破線で示している。数値解 F_{LJ} は非接触状態では $F_{LJr}=AR[1-(z_0/h_0)^6/4]/6h_0^2$ の曲線にそって変化するが、 $h_0=\sigma(>z_0)$ で接触すると、 d の減少とともに接触面積が増大するので F_{LJ} 曲線より増加する。しかし $\sigma=0.165\ \text{nm}$ のときには d を減少させても接触域内の吸着力と反発力が打ち消しあうので F_{LJ} は常に最大値 $AR/8z_0^2$ の値をとる。図 (d) の接触半径特性は、 $\sigma=z_0=0.165\ \text{nm}$ のとき DMT 理論解に近く、 $\sigma>z_0$ のとき JKR 理論に近い。この理由は $\sigma=0.165\ \text{nm}$ のときは接触域内の吸着力が零となるので DMT モデルに近づき、それ以外では接触域内の吸着力が極めて大きいので、JKR モデルに近くなるためである。

接触してからの $-F_{LJ}$ と $-F_{ex}$ の d に対する変化は図 (e) に示すが、 $-F_{ex}$ は σ の影響が小さく、また $\sigma=z_0=0.165\ \text{nm}$ のときは $-F_{LJ}$ が d に対してほぼ一定となっている。図 (e) には、接触面積の計算値を用いて、接触面の LJ 吸引力をも考慮した式 (14) の F_{LJ}^* を点で示した。これから分かるように、接触後の F_{LJ} は式 (14) で近似的に表すことができ、特に $h_0=\sigma=z_0$ のときの F_{LJ} は接触面積の効果を無視した剛体の球・平面間の吸引力 F_{LJr} で計算できることが明らかになった。

ところで従来、球面・平面接触時の吸引力は平行平面の表面エネルギーから求める方法が Derjaguin 近似として知られており、接触により 2 面がもつ表面エネルギーの減少量を $\Delta\gamma$ とすれば、半径 R の球と平

Fig. 6 Contact characteristics of $1\text{-}\mu\text{m}$ radius sphere and disk for $\sigma=0.2, 0.18$ and $0.165\ \text{nm}$

面間の接触時の吸引力 F_a は

$$F_a = 2\pi R \Delta\gamma \quad (\Delta\gamma = \gamma_1 + \gamma_2 - \gamma_{12}) \dots\dots\dots (15)$$

で与えられる。ここで γ_1, γ_2 は接触面 1, 2 の表面エネルギー, γ_{12} は接触したときの面間の表面エネルギーである。この吸引力は式(14)の第1項の剛体面の LJ 力のみによる吸着力 F_{LJ} に等しいと考えられる。よって表面エネルギーの変化量 $\Delta\gamma$ と Hamaker 定数との一般的な関係式として次式が得られる。

$$\Delta\gamma = \frac{A}{12\pi\sigma^2} \left(1 - \frac{z_0^6}{4\sigma^6}\right) \dots\dots\dots (16)$$

ここで σ は粗さ突起面の微小なスケールの平均粗さ高さ間距離に相当する。 σ が z_0 よりわずかに大きい場合には括弧内の第1項は無視できて、文献(18), (19)のように $\Delta\gamma = A/(12\pi\sigma^2)$ となるが、粗さ突起面の粗さが小さく、 $\sigma \leq z_0$ の場合には、図 6(c), (e) から式(16)において $\sigma = z_0$ とおいた式 $\Delta\gamma = A/(16\pi z_0^2)$ を用いる必要がある。図 3, 4, 6 に図示した JKR, DMT 理論解は式(16)を用いて計算した結果である。液体の接触角から表面エネルギーを求める場合は $\sigma = z_0$ の条件が成立し、よって $\Delta\gamma = A/(16\pi\sigma^2)$ を用いるのが適切であろう。しかし固体接触によって求める場合は、微小な粗さの影響をうけ、粗さ間隙を考慮した式(16)を用いる必要がある。また液体の接触角から測定した表面エネルギーを用いた式(15)による吸着力の評価では、 $\sigma > z_0$ の粗さをもつ球と平面の吸着力は正しく評価できないと考えられる。

5.2 粗さ突起接触部の LJ 表面力の評価法 3~

4 章では、粗さ突起接触部の LJ 表面力を無視して、接触面の粗さ平均高さ面間の LJ 表面力のみを論じてきたが、ここで粗さ突起接触部の LJ 表面力の評価法を論じ、どのような場合に突起接触部の LJ 表面力を無視できるかについて考察する。

スライダ面とディスク面の等価的な突起密度を ρ 、突起頂点の曲率半径を R_a とし、前節から粗さ突起面の粗さを z_0 以下と仮定すると、突起接触部の LJ 吸引力は $\Delta\gamma = A/(16\pi z_0^2)$ の関係を用いて表面エネルギーで表現することができる。式(15)より突起接触部の吸着圧力 P_a は突起と平面との接近量の大きさによらず次式で与えられる。

$$P_a = 2\pi R \Delta\gamma \rho p \dots\dots\dots (17)$$

ここで p は接触している突起の確率である。詳細は省略するが、ガウス分布の突起高さをもつ面の粗さ接触において、突起接触部の LJ 吸引力が 2 面の相互作用力 F_{ex} の吸引力に最大に現れるときの接触確率は約 $p=0.25$ であった。よって全粗さ突起が接触するときの突起部の LJ 表面圧力 P_a と式(3)の $h_0=\sigma$

のときの値が

$$2\pi R_a \Delta\gamma \rho \leq \frac{A}{6\pi\sigma^3} \left[1 - \left(\frac{z_0}{\sigma}\right)^6\right] \dots\dots\dots (18)$$

であれば平均粗さ面間の吸引力が支配的である。上式において、 $(z_0/\sigma)^6 \ll 1$ なのでこれを無視し、一方粗さ突起面の微小スケールの粗さ高さを $\sigma \leq z_0$ とすると、式(16)において $\sigma = z_0$ とおいた式 $\Delta\gamma = A/(16\pi\sigma^2)$ を用いることができるので式(18)は次式となる。

$$\sigma \leq \left(\frac{4}{3} \frac{z_0^2}{\pi R_a \rho}\right)^{1/3} \dots\dots\dots (19)$$

今、 $R_a=1\mu\text{m}$ とすると、 $\rho=10, 100\mu\text{m}^{-2}$ のとき、それぞれ $\sigma \leq 1.05\text{nm}$, $\sigma \leq 0.49\text{nm}$ となる。よって、接触面の平均粗さ高さ距離がほぼ 1nm 以下から平均粗さ高さ面間の LJ 表面力が支配的になり、3, 4 章の解析が合理的といえることができる。

式(17)は、粗さ接触面の見かけの単位面積当たり P_a の吸着力が生じることを意味している。よって 3 章で述べた接触面の平均粗さ面間の LJ 表面力の計算アルゴリズムにおいて、吸着接触した領域にこの吸着圧力 P_a を加えれば突起接触部の LJ 表面力の影響を考慮できる。ただし、式(17)の接触確率 p は荷重なし初期分離量によって異なるので厳密には Greenwood-Williamson モデル等により粗さ突起高さの変形を同時に解く必要がある。これらの議論およびガラススライダと磁気ディスクの吸着力特性に及ぼす LJ 表面力の影響評価は続報で行う。

6. 結 論

表面粗さによる平均高さ面間のすきまが 1nm 以下の球面スライダとディスク面との吸着・接触問題を Lennard-Jones(LJ)表面圧力による局所的な弾性変形を考慮して解く境界要素法に基づく数値解析法を開発した。そして、Hamaker 定数が 10^{-19}J のとき、半径 2mm のガラス球面スライダと磁気ディスク面の吸着・接触特性を解析した。特に平均粗さ高さ面距離が 0.5nm 程度に小さくなると、接触と分離の状態に跳躍が生じ、また吸着領域が顕著に増大し、JKR, DMT 理論では予測できない結果が得られることを明らかにした。また粗さ突起に相当する半径 $1\mu\text{m}$ のガラス球面が磁気ディスク面に接触する際の接触特性を、平均粗さ高さが原子平衡距離の近傍で変化する場合適について計算し、その特徴から、接触領域が大きくなるときの LJ 吸着力をもかなり正確に予測できる簡易式を提案した。また従来必ずしも明確ではなかった。表面エネルギーと Hamaker 定数との一般的な関係式を明らかにした。そしてこの関係式から求めた表

面エネルギーを用いると、半径 $1\text{ }\mu\text{m}$ の突起球面と平面の吸着力は、粗さ突起が原子平衡距離で接触しているときには DMT 理論で近似でき、平均粗さ高さが原子平衡距離より大きくなると JKR 理論で近似できることを示した。

文 献

- (1) Johnson, K. L., Kendall, K. and Roberts, A. D., Surface Energy and the Contact of Elastic Solids, *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, Vol. 324 (1971), pp. 301-313.
- (2) Derjaguin, B. V., Muller, V. M. and Toporov, Y. P., Effect of Contact Deformations on the Adhesion of Particles, *J. Colloid Interface Sci.*, Vol. 53 (1975), pp. 314-326.
- (3) Maugis, D., Adhesion of spheres: The JKR-DMT transition using a Dugdale model, *J. Colloid Interface Sci.*, Vol. 150, No. 1 (1992), pp. 243-269.
- (4) Ambekar, A. R., Gupta, V. and Boggy, D. B., Experimental and Numerical Investigation of Dynamic Instability in Head Disk Interface at Proximity, *ASME J. Tribol.*, Vol. 127, No. 3 (2005), pp. 530-536.
- (5) Lee, S.-C. and Polycarpou, A. A., Adhesion Forces for Sub-10 nm Flying-Height Magnetic Storage Head Disk Interfaces, *ASME J. Tribol.*, Vol. 126, No. 2 (2004), pp. 334-341.
- (6) Matsuoka, H., Ohkubo, S. and Fukui, S., Corrected expression of van der Waals pressure for multilayered system with application to analysis of static characteristics of flying head sliders with an ultrasmall spacing, *Microsys. Technol.*, Vol. 11 (2005), pp. 824-829.
- (7) Shi, X. and Polycarpou, A., An Elastic-Plastic Hybrid Adhesion Model for Contacting Rough Surfaces in the Presence of Molecularly Thin Lubricant, *J. Colloid Interface Sci.*, Vol. 290 (2005), pp. 514-525.
- (8) Adames, G. G. and Muftu, S., Improvements to a Scale-Dependent Model for Adhesion and Friction, *Journal of Physics D: Applied Physics*, Vol. 38, No. 9 (2005), pp. 1402-1409.
- (9) Zheng, J. and Streater, J. L., A Generalized Formulation for the Contact Between Elastic Spheres: Applicability to Both Wet and Dry Conditions, *ASME J. Tribol.*, Vol. 129, No. 2 (2007), pp. 274-282.
- (10) Ono, K. and Yamane, M., Improved Analysis of Unstable Bouncing Vibration and Stabilizing Design of Flying Head Slider in Near-Contact Region, *ASME J. Tribol.*, Vol. 129, No. 1 (2007), pp. 65-74.
- (11) Ono, K. and Masami, Y., Analysis of Contact Characteristics of Small Rough Surfaces Taking Bulk Deformation and Meniscus Force into Consideration, *ASME J. Tribol.*, Vol. 129, No. 3 (2007), pp. 453-460.
- (12) Ono, K., *Flying head slider*, P 2005-31007 (2006).
- (13) Kurita, M., Shiramatsu, T., Miyake, M., Kato, A., Soga, M., Tanaka, H., Saegusa, S. and Suk, M., Active Flying-Height Control Slider Using MEMS Thermal Actuator, *Microsystem Technologies*, Vol. 12, No. 4 (2006), pp. 369-375.
- (14) Attard, P. and Parker, J. L., Deformation and adhesion of elastic bodies in contact, *Physical Review A*, Vol. 46, No. 12 (1992), pp. 7959-7971.
- (15) Greenwood, J. A., Adhesion of Elastic Spheres, *Proc. R. Soc. Lond., A*, Vol. 453 (1997), pp. 1277-1297.
- (16) Ono, K. and Nakagawa, K., Experimental Study of Collision Motion, Contact Force and Adhesion Force of Hemispherical Sliders with Stationary Magnetic Disks, *JSME International J., Ser. C*, Vol. 49, No. 4 (2006), pp. 1159-1170.
- (17) Bhushan, B., Contact mechanics of rough surfaces in Tribology: multiple asperity contact, *Tribology Letters*, Vol. 4 (1998), pp. 1-35.
- (18) Israelachvili, J. N., *Intermolecular and Surface Forces*, 2nd ed., (1992), Academic Press; Translated by Kondo, T. and Ooshima, H., (1996), p. 196, Asakura.
- (19) Mate, C. M., *Tribology on the Small Scale*, (2008), p. 153, Oxford Univ. Press.
- (20) Shi, X. and Zhao, Y.-P., Comparison of Various Adhesion Contact Theories and the Influence of Dimensionless Load Parameter, *J. Adhesion Sci., Technol.*, Vol. 18, No. 1 (2004), pp. 55-68.