628 表面応力を考慮した半無限弾性体の応力解析 (マイクロからナノ連続体力学へのアプローチ) Stress Analysis for An Infinite Half Domain Considering Surface Stresses (An approach from micro- to nano-continuum mechanics)

○正 古口 日出男 (長岡技術科学大学)

Hideo KOGUCHI, Nagoka University of Technology, Kamitomioka 1603-1, Nagaoka, Niigata

Key Words : Elasticity, Anisotropy, Stress Concentration, Stress Corrosion Cracking, Dislocation

1. 緒 論

原子を積層して薄膜を生成したり結晶を構築する場合、表面に多段のステップが形成される。近年研究され始めているナノ構造材料では、表面を完全に覆うことができない程度の原子を薄膜形成と同様に置いた場合、表面状態に依存する自己組織的パターンが生成される。そのような場合、表面に対する応力解析が必要となってくる。当研究者は以前に、表面エネルギーに起因する表面応力を考慮した境界条件を導出した。本報告では、直交異方性半無限弾性体の表面の半分の領域における表面応力が変化した場合、表面応力の変化から誘起される変位の結果と分子動力学法により求めた結果を比較する。

2. 解析モデルおよび境界条件

本研究では一部の用いた解析モデルをFig.1に示す。このモデルのx軸の右側の表面の表面エネルギーが変化するものとする。また、外力は作用しないとす。さらに、解析の簡単のため、2次元平面ひずみ問題として扱う。すなわち、変位(u, v, w)はx, zのみの関数であるとする。

境界条件は以下のように書くことができる。

a) 表面の接平面内の境界条件

$$\tau_{\alpha\beta} - \sigma_{\alpha} v_i = 0 \quad (1)$$

b) 表面の法線方向に関する境界条件

$$\tau_{\mu\beta} \kappa_{\mu\beta} - \sigma_{ij} v_i v_j = 0 \quad (2)$$

ここで、 $\tau_{\alpha\beta}$ は表面応力、 σ_{ij} はバルク応力、 $\kappa_{\mu\beta}$ は曲率テンソル、 v_i は表面の法線ベクトルである。また、ギリシャ文字の添字($\alpha, \beta=1, 2$)は曲面座標系に対する座標を、アルファベット文字($i, j, k=1, 2, 3$)は直交座標系に対する座標を表す。

表面の曲率は次式のように表すことができる。

$$\kappa_{xx} = -\frac{\partial^2 w_0}{\partial x^2}, \quad \kappa_{yy} = 0 \quad (3)$$

ここで、 w_0 は表面における変位のz軸方向成分である。また、表面応力は表面エネルギー Γ と次の関係がある。

$$\tau_{\alpha\beta} = \Gamma \delta_{\alpha\beta} + \frac{\partial \Gamma}{\partial \epsilon_{\alpha\beta}} \quad (4)$$

ここで、 $\delta_{\alpha\beta}$ はKroneckerのデルタ、 $\epsilon_{\alpha\beta}$ は表面のひずみである。なお、表面応力の異方性はここでは省略する。

本解析では表面エネルギーが階段状に変化した場合を考える。その結果、表面応力は次式のように表される。

$$\tau_{xx} = \tau_{xx}^0 + \tau_{xx}^A H(x) \quad (5)$$

Fig.1 Model for analysis and coordinates system

ここで、 $H(x)$ はHevisideのステップ関数、 τ_{xx}^0 はそれぞれ材料の表面エネルギーに起因する表面応力の項である。

また、表面の法線ベクトルは(v_1, v_2, v_3)=(0, 0, 1)のように書くことができる。

式(3)と(5)を式(1), (2)に代入すると、最終的に次の境界条件を得ることができる。

z=0 上で

$$-\frac{\partial^2 w_0}{\partial x^2} (\tau_{xx}^0 + \tau_{xx}^A H(x)) - \sigma_{zz} = 0 \quad (6)$$

$$\tau_{xz}^A \delta(x) - \sigma_{xz} = 0 \quad (7)$$

$$\sigma_{yz} = 0 \quad (8)$$

3. 解析方法

3.1 材料及び基礎式 orthotropic材料は、最大8個の独立な弾性定数を有している。その構成方程式を式(9)に示す。

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{23} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{55} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} & 0 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{xy} \end{Bmatrix} \quad (9)$$

物体力を考慮しない力の平衡方程式を次式に示す。

$$\sigma_{ij,j} = 0 \quad (10)$$

式(9)を式(10)に代入することにより、次の(u, v, w)に対する偏微分方程式を導くことができる。

$$\begin{cases} c_{11} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + c_{13} \frac{\partial^2 w}{\partial z \partial x} + c_{55} \left(\frac{\partial^2 u}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z \partial x} \right) = 0 \\ c_{66} \frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + c_{44} \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} = 0 \\ c_{13} \frac{\partial^2 u}{\partial z \partial x} + c_{55} \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z \partial x} \right) + c_{33} \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} = 0 \end{cases} \quad (11)$$

今、変位場を表す関数 $u(u(x, z), v(x, z), w(x, z))$ を次式のようにフーリエ変換された関数で表す。

$$\begin{aligned} u &= \frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^2 \int_{-\infty}^{\infty} A_j(s) e^{-(i s x + \lambda_j |s| z)} ds \\ v &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A_0(s) e^{-(i s x + \lambda_0 |s| z)} ds \\ w &= \frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^2 R_j \int_{-\infty}^{\infty} A_j(s) \operatorname{sgn}(s) e^{-(i s x + \lambda_j |s| z)} ds \end{aligned} \quad (12)$$

ここで、 $A_0(s)$ および $A_j(s)$ は未知係数である。また、 R_j および λ_j は次式で与えられる。

$$R_j = \frac{i \lambda_j (c_{13} + c_{55})}{c_{55} - c_{33} \lambda_j^2} \quad (13)$$

$$c_{55}c_{33}\lambda^4 + (c_{13}^2 - c_{11}c_{33} + 2c_{13}c_{55})\lambda^2 + c_{11}c_{55} = 0 \quad (14)$$

3.2 未知関数 A_i の決定 A_1, A_2 および A_0 を境界条件により決定する。式(12)を式(6), (7), (8)に代入すると、次式が得られる。

$$C_{ae} \sum_{j=1}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \bar{A}_j R_j \bar{s} |\bar{s}| e^{-i\bar{s}\bar{x}} d\bar{s} - \sum_{j=1}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \bar{A}_j \bar{s} (ic_{13} + \lambda_j R_j) e^{-i\bar{s}\bar{x}} d\bar{s} = 0 \quad (15)$$

$$C_{ae}^{\Delta} \delta(\bar{x}) - \frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^2 \int_{-\infty}^{\infty} \bar{A}_j |\bar{s}| c_{35} (\lambda_j + iR_j) e^{-i\bar{s}\bar{x}} d\bar{s} = 0 \quad (16)$$

$$\frac{c_{44}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{A}_0(\bar{s}) |\bar{s}| e^{-i\bar{s}\bar{x}} d\bar{s} = 0 \quad (17)$$

ここで、総ての変数は弾性定数 c_{33} および適当な長さの次元を持ったパラメータ a で無次元化されている。

$$C_{ae} = C_{ae}^0 + C_{ae}^{\Delta} H(x) \quad (18)$$

ここで、 $C_{ae}^0 = \tau_{xx}/c_{33}a$, $C_{ae}^{\Delta} = \tau_{xx}^{\Delta}/c_{33}a$ である。式(15)から式(17)を解くことにより、 $\bar{A}_i$ を求めることができる。

$$\bar{A}_i(\bar{u}) = \frac{C_{ae}^{\Delta}}{c_{55}} \left\{ \frac{\bar{A}_{i1}}{|\bar{u}|} + \frac{\bar{A}_{i2} C_{ae}^0}{C_{ae}^0 |\bar{u}| - g_0} + \frac{\bar{A}_{i3} (C_{ae}^0 + C_{ae}^{\Delta})}{(C_{ae}^0 + C_{ae}^{\Delta}) |\bar{u}| - g_0} \right\} \quad (19)$$

$$g_0 = \frac{(ic_{13} + \lambda_1 R_1)(\lambda_2 + iR_2) - (ic_{13} + \lambda_2 R_2)(\lambda_1 + iR_1)}{R_1(\lambda_2 + iR_2) - R_2(\lambda_1 + iR_1)} \quad (20)$$

ここで、 $\bar{A}_{i1}, \bar{A}_{i2}, \bar{A}_{i3}$ は省略。

3.3 変位場の式 最終的に次式のように z 方向変位の式を導くことができる。

$$\bar{w} = \frac{i}{2\pi} \frac{C_{ae}^{\Delta}}{c_{55}} \sum_{j=1}^2 \left[2R_j \bar{A}_{j1} \theta_j + R_j \sum_{l=2}^3 \bar{A}_{jl} \right] \times \left\{ e^{-s_j \lambda_j \bar{z}} E_1(-s_j \xi_j) - e^{s_j \lambda_j \bar{z}} E_1(-s_j \bar{\xi}_j) \right\} \quad (21)$$

ここで、 $s_2 = g_0/C_{ae}^0$, $s_3 = g_0/(C_{ae}^0 + C_{ae}^{\Delta})$, $r_{ij} = s_j \sqrt{(\lambda_j \bar{z})^2 + \bar{x}^2}$,

$\theta_j = \tan^{-1}(\bar{x}/\lambda_j \bar{z})$, $E_1(z) = \int_1^{\infty} e^{-zt}/t dt$, $\xi_j = \lambda_j \bar{z} + i\bar{x}$ である。

4. 分子動力学による変形解析

表面応力を変化させる方法としては、物質の表面に異原子を付着するか、一部分の原子層厚さを変えることが考えられる。ここでは第二の考え方にしたがって表面にステップがあるモデルを考える。解析に用いた材料はMoである。解析モデルを図2に示す。解析方法はFSポテンシャルを用いた分子動力学法である。FSポテンシャルを次式に示す。

$$U_{tot} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_{\beta(\neq \alpha)} V(r_{\alpha\beta}) - A \sum_{\alpha} F(\rho^{\alpha}) \quad (22)$$

Fig.2 A model for analysis

ここで、

$$F(r) = \begin{cases} (r-d)^2 + \frac{\beta}{d}(r-d)^3 & \dots (r \leq d) \\ 0 & \dots (r > d) \end{cases} \quad (23)$$

$$V(r) = \begin{cases} (r-d)^2 (c_0 + c_1 r + c_2 r^2) & \dots (r \leq c) \\ 0 & \dots (r > c) \end{cases} \quad (24)$$

$d=3.915720\text{\AA}$, $\beta=1.8$, $A=1.453418\text{eV}$, $c=2.9\text{\AA}$, $c_0=29.1429813$, $c_1=-23.3975027$, $c_2=4.7578297$ である。

分子動力学法による表面応力はステップが無い x - y 方向に無限で z 軸に垂直な表面をもつ領域に対して、次式を用いて求めた。

$$\tau_{ij} = A_c^{-1} \sum_{\alpha} \partial u_{\alpha} / \partial \epsilon_{ij} \quad (25)$$

ここで、 u_{α} は表面の単位ユニットセルのエネルギー、 A_c はその表面積である。

この計算では緩和過程 15,000step のうち、開始直後から 1,000step までに系の温度を 1.0K に上げ、その後 5,000step まで温度を保持し、その後 10,000step までに温度を 0K まで下げて、0K に保持した。緩和後の原子位置を図3に示す。ステップの下にある原子が z 方向に変位していることがわかる。そこで、ステップが無い表面における表面応力 2.2J/m, ステップ下の表面応力 0.01 として、式(21)を用いて表面の変位を求めた。図4にその表面変位を図3のステップ近傍の原子の位置に重ね合わせて示す。この図からステップの層数が増えると表面変位は大きくなるが、1層程度の場合、理論とよくあっていることがわかる。

5. 結 論

表面応力を考慮した理論を用いることによりナノスケールの変形解析が可能であることを示した。

Fig.3 Coordinates of atom before and after relaxzation

Fig.4 Deformation near the step after relaxzation