界面エネルギーを考慮した2相横等方性弾性体中の 転位ループの解*

古 口 日 出 男^{*1}

Fundamental Solution for a Prismatic Dislocation Loop in a Two-Phase Transversely Isotropic Elastic Material Considering Interfacial Energy

Hideo KOGUCHI

Intrinsic mechanical stresses exist in a general interface because of interface atomic structure changes relative to the bulk. This paper presents fundamental solutions using the interrelationships between the surface stresses and the bulk stress deduced in the previous paper. The interfacial stresses have a close relationship with the interfacial energy and the geometry (mean curvature) of an interface. In the present paper, fundamental solutions for a prismatic dislocation loop with radius a in a transversely isotropic material are derived using the three-dimensional theory of elasticity. Furthermore, solutions for a two-phase transversely isotropic material are deduced, and potential functions for arbitrary shape loop are derived from the solution. The difference in the stress distribution between cases in which the interface energy is considered those in which it is not was investigated using the solution. All of the stress components which consider the interface energy are larger than those which do. Finally, we discussed the relationship of a dislocation loop with a dislocation produced by locally changing free energy.

Key Words: Elasticity, Boundary Condition, Residual Stress, Surface Stress, Dislocation

1. 緒 論

近年、工業技術の発展とともに超薄膜やマイクロ・ナノマシン等に代表される超微小な構造を有する電子部品やインテリジェントな機械が製作されようとしている。そして、これらの微小構造物は所定の機能を持たせるために性質の異なる材料を接合して作られることが多くある。これらの構造物に付与される機能は転位などの微小な欠陥の有無に大きく影響されることが知られている。そのため転位発生メカニズム⁽¹⁾および薄膜中に発生する転位発生臨界膜厚などの研究が行われてきた^{(2),(3)}。転位は、表面・界面上あるいはその近傍に発生するため、これまでもそれらを考慮した応力解析が行われている⁽⁴⁾。Dundursら^{(5),(6)}は、2相等方性弾性体中に一つのプリズマティック転位ループがある場合の解を求め、接合界面との干渉効果について調べた。しかし、これまで界面・表面エネルギーに起因する界面・

表面応力を考慮した解析は行われていない。そこで、本研究でははじめに一般的な2相横等方性材料の界面近傍に転位ループが存在している場合の解を求める。その際、著者が提案した界面応力を考慮した境界条件を用いる⁽⁷⁾。そして、転位の応力場に対する界面エネルギーの影響について調べる。さらに、材料中の自由エネルギーが局所的に変化した場合の解を誘導し、その解が転位ループの解と極めて類似していることを示す。

2. 解 析 方 法

2-1 横等方性弾性体の基礎式 本研究で解析する2相横等方性弾性体のモデル図を図1に示す。この図のように転位ループは、横等方性弾性体Iの $z=z_0$ にあり、半径 a 、バーガースベクトル $\mathbf{b}=(0,0,b)$ を持っているものとする。軸対称な横等方性弾性体の変位および応力は、次式にポテンシャル関数を代入することにより求めることができる^{(8),(9)}。

$$u_r = \sum_{i=1}^2 \frac{\partial \phi_i}{\partial r}, \quad u_\theta = \sum_{i=1}^2 \frac{1}{r} \frac{\partial \phi_i}{\partial \theta}, \quad w_z = \sum_{i=1}^2 k_i \frac{\partial \phi_i}{\partial z} \dots (1)$$

* 原稿受付 1996年9月19日。

*¹ 正員、長岡技術科学大学工学部(☎940-21 長岡市上富岡町1603-1)。

$$\sigma_{rr} = -C_{44} \sum_{i=1}^2 (1+k_i) \left\{ \beta_i \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \phi_i}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \phi_i}{\partial \theta^2} \right) + \frac{\partial^2 \phi_i}{\partial z^2} \right\} \quad (2)$$

$$\sigma_{\theta\theta} = -C_{44} \sum_{i=1}^2 (1+k_i) \left\{ \beta_i \frac{\partial^2 \phi_i}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 \phi_i}{\partial z^2} \right\} \quad (3)$$

$$\sigma_{zz} = C_{44} \sum_{i=1}^2 \frac{(1+k_i)}{v_i^2} \frac{\partial^2 \phi_i}{\partial z^2} \quad (4)$$

$$\sigma_{rz} = C_{44} \sum_{i=1}^2 (1+k_i) \frac{\partial^2 \phi_i}{\partial r \partial z} \quad (5)$$

ここで、横等方性弾性体の弾性定数は次のように表される。

$$\begin{aligned} C_{iklm} = & (C_{11} - 6C_{66})\delta_{ik}\delta_{lm} + C_{66}(\delta_{lm}\delta_{km} + \delta_{im}\delta_{kl}) \\ & + (C_{11} + C_{33} - 2C_{13} - 4C_{44})\delta_{i3}\delta_{k3}\delta_{l3}\delta_{m3} \\ & + (C_{13} - C_{11} + 2C_{66})(\delta_{i3}\delta_{k3}\delta_{lm} + \delta_{ik}\delta_{l3}\delta_{m3}) \\ & + (C_{44} - C_{66})(\delta_{im}\delta_{k3}\delta_{l3} + \delta_{i3}\delta_{kl}\delta_{m3} + \delta_{il}\delta_{k3}\delta_{m3} + \delta_{i3}\delta_{l3}\delta_{km}) \end{aligned} \quad (6)$$

なお、 δ_{ij} はクロネッカーのデルタである。また、

$$\frac{k(C_{13} + C_{44}) + C_{44}}{C_{11}} = \frac{kC_{33}}{kC_{44} + (C_{13} + C_{44})} = \nu \quad (7)$$

$$\beta_i = \frac{C_{11} - C_{12}}{C_{44}(1+k_i)} \quad (8)$$

さらに、 v_i は式(7)から求められる次式の根である。

$$C_{33}C_{44}v^4 + (C_{13}(2C_{44} + C_{13}) - C_{11}C_{33})v^2 + C_{11}C_{44} = 0 \quad (9)$$

すなわち、

$$\begin{aligned} v_{1,2} = & \sqrt{\frac{(\sqrt{C_{11}C_{33}} - C_{13})(\sqrt{C_{11}C_{33}} + C_{13} + 2C_{44})}{4C_{33}C_{44}}} \\ & \pm \sqrt{\frac{(\sqrt{C_{11}C_{33}} + C_{13})(\sqrt{C_{11}C_{33}} - C_{13} - 2C_{44})}{4C_{33}C_{44}}} \end{aligned} \quad (10)$$

本研究では、横等方性弾性体の弾性定数の関係が $v_1=v_2=v_s$ となる場合の解も誘導する。また、関数 ϕ は次

Fig.1 Model for analysis with a prismatic dislocation loop and coordinate system

式を満足する調和関数である。

$$\left(\nabla_i^2 + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2} \right) \phi_i = 0, \quad \nabla_i^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \quad (11)$$

ここで、 $z_i = v_i z$ である。

2.2 境界条件 つぎに、バーガースベクトルが $b=(0,0,b_z)$ 、半径 a のプリズマティック転位のループの境界条件を示す。

変位について

$$\lim_{z \rightarrow z_0 \pm 0} [w_i(r, z)] = \begin{cases} \pm \frac{1}{2} b_z, & \text{for } 0 \leq r \leq a \\ 0, & \text{for } r \geq a \end{cases} \quad (12)$$

応力について

$$\sigma_{rz}(r)|_{z=z_0+0} = \sigma_{rz}(r)|_{z=z_0-0} \quad (13)$$

前報⁽⁷⁾で誘導した界面における応力の平衡方程式を以下に示す。

界面の接平面内に対して

$$\tau_{r\beta}^{\alpha\beta} + (\sigma_{rj}^{\alpha} - \sigma_{rj}^{\alpha\alpha})v_j = 0 \quad (14)$$

界面に垂直な方向に対して

$$\tau_{r\beta}^{\alpha\beta} \kappa_{\mu\beta} + (\sigma_{rj}^{\alpha} - \sigma_{rj}^{\alpha\alpha})v_j v_j = 0 \quad (15)$$

ここで、式(14)の第1項目の α, β は添字の変数に関する共変微分、 $\tau_{r\beta}^{\alpha\beta}$: 表面応力、 σ_{rj}^{α} : バルクの応力(下添え字は領域の番号に対応する)、 v_j : 表面(界面)の法線ベクトル、 $\kappa_{\mu\beta}$: 表面(界面)の曲率である。また、 α, β などのギリシャ文字は1,2(表面内に対応)を、 i, j などのアルファベットは1,2,3の値をとる。

一般に、材料の界面にはバルクとの原子配列の違いから過剰エネルギーが生じるために界面応力が存在する。したがって、図1の $z=0$ の界面に表面エネルギー γ に対する表面応力が存在する^{(10),(11)}。

表面応力 $\tau^{\alpha\beta}$ は表面エネルギー γ を用いて次式のように表せる。

$$\begin{cases} \tau^{rr} = \gamma + \frac{\partial \gamma}{\partial \epsilon_{rr}} \\ \tau^{\theta\theta} = \frac{1}{r^2} \left(\gamma + \frac{\partial \gamma}{\partial \epsilon_{\theta\theta}} \right) \\ \tau^{r\theta} = 0 \end{cases} \quad (16)$$

ここで、 ϵ_{rr} 、 $\epsilon_{\theta\theta}$ は界面におけるひずみである。また、簡単のため、界面エネルギーは界面内で一様で、ひずみの影響は受けないものとする。

界面の曲率は界面の変位 w を用いて次式のように与えられる。

$$\kappa_{rr} = -\frac{\partial^2 w}{\partial r^2} \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial w}{\partial r} \right)^2}} \quad (17)$$

$$\kappa_{\theta\theta} = -r \frac{\partial w}{\partial r} \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{\partial w}{\partial r}\right)^2}} \quad \dots\dots\dots(18)$$

ここで、上記の式を簡単化して、式(15)に代入すると、以下の接合界面の境界条件が得られる。

$$u_r(r, 0)|_I = u_r(r, 0)|_II \quad \dots\dots\dots(19)$$

$$w_r(r, 0)|_I = w_r(r, 0)|_II \quad \dots\dots\dots(20)$$

$$\sigma_{rr}(r, 0)|_I = \sigma_{rr}(r, 0)|_II + \frac{\gamma}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial w}{\partial r} \right) \bigg|_II \quad \dots\dots\dots(21)$$

$$\tau_{rz}(r, 0)|_I = \tau_{rz}(r, 0)|_II \quad \dots\dots\dots(22)$$

2.3 無限横等方性弾性体中の転位ループの解

はじめに、無限体の横等方性弾性体中にプリズマティック転位ループが1つある場合の解を求める。

$v_1 \uparrow v_2$ の場合

$$\phi_i = \frac{ab_i}{2} \int_0^\infty A_i(\lambda) J_0(\lambda r) J_1(\lambda a) e^{-\lambda|z_i - z_{0i}|} d\lambda \quad \dots\dots\dots(23)$$

ここで、 $z_{0i} = v_i z_0$ である。

式(12)と(13)の境界条件より、未知関数 $A_i(\lambda)$ は次式のように求められる。

$$A_1 v_1 = -\frac{1}{\lambda} \frac{1+k_2}{k_2-k_1}, \quad A_2 v_2 = \frac{1}{\lambda} \frac{1+k_1}{k_2-k_1} \quad \dots\dots\dots(24)$$

この解は Yu と Sanday⁽¹²⁾ らによって得られた無限横等方性弾性体中のプリズマティック転位の解に一致している。

$v_1 = v_2 = v_i$ の場合、式(23)および式(24)で $v_1 - v_2 = \varepsilon$ として、 ε に関して微小量展開を行い、 $\varepsilon \rightarrow 0$ とすると、次式のポテンシャル関数が得られる。

$$\phi = \frac{ab_i}{2} \int_0^\infty \frac{1}{\lambda} [M - \lambda N |z - z_0|] e^{-\lambda|v_i z - z_0|} J_0(\lambda r) J_1(\lambda a) d\lambda \quad \dots\dots\dots(25)$$

ここで、

$$M = \frac{C_{11} - C_{13} v_i^2}{2C_{11} v_i}, \quad N = \frac{C_{11} + C_{13} v_i^2}{2C_{11}} \quad \dots\dots\dots(26)$$

3. 2相横等方性弾性体の解析

および計算結果

前述した転位ループの解に界面に関する鏡像の位置に同じ大きさの転位ループを考え、その解を重ね合わせる。この鏡像に関するポテンシャル関数は転位の境界条件を満足するものである。2相横等方性弾性体中の同様な解は、Dundurs ら⁽⁵⁾⁽⁶⁾ により求められているので、本論文ではつぎの3つの場合の解析を行う。Case1: 領域I (横等方性体) - 領域II (横等方性体)。Case2: 領域I (横等方性体) - 領域II (等方性体)。Case3: 領域I (等方性体) - 領域II (横等方性体)。すべてのCaseで転位ループ

は領域Iにあるものとする。

3.1 Case1 の解析 領域IおよびIIにおけるポテンシャル関数を次式のようにおく。

$$\phi_{II} = \frac{ab_i}{2} \int_0^\infty A_i(\lambda) J_0(\lambda r) J_1(\lambda a) e^{-\lambda|z_i - z_{0i}|} d\lambda + \frac{ab_i}{2} \int_0^\infty B_i(\lambda) J_0(\lambda r) J_1(\lambda a) e^{-\lambda|z_i + z_{0i}|} d\lambda \quad \dots\dots\dots(27)$$

$$\phi_{III} = \frac{ab_i}{2} \int_0^\infty C_i(\lambda) J_0(\lambda r) J_1(\lambda a) e^{-\lambda|v_i z - v_i z_0|} d\lambda \quad \dots\dots\dots(28)$$

ここで、 $A_i(\lambda)$ は式(24)で与えられ、 $B_i(\lambda)$ 、 $C_i(\lambda)$ は未知関数である。

これらの式を式(19)～(22)に代入すると、次式が得られる。

$$\sum_{i=1}^2 A_i e^{-\lambda z_{0i}} + \sum_{i=1}^2 B_i e^{-\lambda z_{0i}} = \sum_{i=1}^2 C_i e^{-\lambda z_{0i}} \quad \dots\dots\dots(29)$$

$$\sum_{i=1}^2 A_i k_i v_i e^{-\lambda z_{0i}} - \sum_{i=1}^2 B_i k_i v_i e^{-\lambda z_{0i}} = \sum_{i=1}^2 C_i k_i v_i e^{-\lambda z_{0i}} \quad \dots\dots\dots(30)$$

$$C_{44} \sum_{i=1}^2 (1+k_i) [A_i e^{-\lambda z_{0i}} + B_i e^{-\lambda z_{0i}}] = C_{44} \sum_{i=1}^2 (1+k_i) C_i e^{-\lambda z_{0i}} + \gamma \sum_{i=1}^2 C_i k_i v_i \lambda^2 e^{-\lambda z_{0i}} \quad \dots\dots\dots(31)$$

$$C_{44} \sum_{i=1}^2 (1+k_i) v_i [-A_i e^{-\lambda z_{0i}} + B_i e^{-\lambda z_{0i}}] = C_{44} \sum_{i=1}^2 (1+k_i) v_i C_i e^{-\lambda z_{0i}} \quad \dots\dots\dots(32)$$

この式を変形して、未知関数を A_i で表す。なお、材料定数に γ が付いているものは、領域IIに関するものであることを表している。

$$C_1 = \frac{1}{\Delta} \{ A_1 c_{11} + A_2 c_{12} e^{-\lambda(z_{02} - z_{01})} \} \quad \dots\dots\dots(33)$$

$$C_2 = \frac{1}{\Delta} \{ A_1 c_{21} e^{-\lambda(z_{01} - z_{02})} + A_2 c_{22} \} \quad \dots\dots\dots(34)$$

$$B_1 = -\frac{A_1}{v_2 - v_1} B_{11} - \frac{A_2 e^{-\lambda(z_{02} - z_{01})}}{v_2 - v_1} B_{12} \quad \dots\dots\dots(35)$$

$$B_2 = \frac{A_1 e^{-\lambda(z_{01} - z_{02})}}{v_2 - v_1} B_{21} + \frac{A_2}{v_2 - v_1} B_{22}$$

ここで、

$$\Delta = \{ (v_2 - v_1) f_1 - (k_2 - k_1) d_{11} \} \{ (v_2 - v_1) g_2 - (k_1 v_1 - k_2 v_2) d_{21} \} - \{ (v_2 - v_1) f_2 - (k_2 - k_1) d_{21} \} \{ (v_2 - v_1) g_1 - (k_1 v_1 - k_2 v_2) d_{11} \} \quad \dots\dots\dots(36)$$

$$\Gamma = C_{44}/C_{44}, \quad g_i = k_i v_i - k_i v_i \quad \dots\dots\dots(37)$$

$$d_{ij} = \Gamma v_i - v_j + k_i v_i (\Gamma - 1) \quad \dots\dots\dots(38)$$

$$f_i = \Gamma(1+k_i) + 1 - k_i + \gamma k_i v_i / C_{44} \quad \dots\dots\dots(39)$$

$$B_{11} = 1 + v_2 + (c_{11} d_{12} + c_{21} d_{22}) / \Delta \quad \dots\dots\dots(40)$$

$$B_{12} = 1 + v_2 + (c_{12} d_{12} + c_{22} d_{22}) / \Delta \quad \dots\dots\dots(41)$$

$$B_{21} = 1 + v_1 + (c_{11} d_{11} + c_{21} d_{21}) / \Delta \quad \dots\dots\dots(42)$$

$$B_{22} = 1 + v_1 + (c_{12} d_{11} + c_{22} d_{21}) / \Delta \quad \dots\dots\dots(43)$$

$$c_{11} = (v_2 - v_1) [2k_1 v_1 \{ (k_2 - k_1) d_{21} - f_2 (v_2 - v_1) \} + \{ g_2 (k_2 - k_1) - (k_1 v_1 - k_2 v_2) f_2 \} (1 + v_1)] \quad \dots\dots\dots(44)$$

$$c_{12} = (v_2 - v_1) \left[2k_1 v_1 (k_2 - k_1) d_{21} - (k_1 v_1 - k_2 v_2) (1 + v_1) f_2 \right. \\ \left. + (k_2 - k_1) (1 + v_2) g_2 - (k_1 v_1 + k_2 v_2) (v_2 - v_1) f_2 \right] \quad (45)$$

$$c_{21} = (v_2 - v_1) \left[2k_1 v_1 \{ (v_2 - v_1) f_1 - (k_2 - k_1) d_{11} \} \right. \\ \left. + \{ (k_1 v_1 - k_2 v_2) f_1 - (k_2 - k_1) g_1 \} (1 + v_1) \right] \quad (46)$$

$$c_{22} = (v_2 - v_1) \left[-2k_2 v_2 (k_2 - k_1) d_{11} + (k_1 v_1 - k_2 v_2) (1 + v_1) f_1 \right. \\ \left. - (k_2 - k_1) (1 + v_2) g_1 - (k_1 v_1 + k_2 v_2) (v_2 - v_1) f_1 \right] \quad (47)$$

以上の解析から、応力関数は以下のように表すことができる。

$$\phi_I = \frac{ab_i}{2(k_2 - k_1)} \int_0^\infty \left[\left(\frac{1 + k_2}{v_1} e^{-\lambda|z_1 - z_{01}|} - \frac{1 + k_1}{v_2} e^{-\lambda|z_2 - z_{02}|} \right) \right. \\ \left. + \left\{ \frac{1 + k_2}{v_1(v_2 - v_1)} (-B_{11} e^{-\lambda(z_1 + z_{01})} + B_{21} e^{-\lambda(z_2 + z_{02})}) \right\} \right] \frac{J_0(\lambda r) J_1(\lambda a)}{\lambda} d\lambda \\ + \frac{1 + k_1}{v_2(v_2 - v_1)} (B_{12} e^{-\lambda(z_1 + z_{02})} - B_{22} e^{-\lambda(z_2 + z_{02})}) \left. \right] \frac{J_0(\lambda r) J_1(\lambda a)}{\lambda} d\lambda \quad (48)$$

$$\phi_{II} = \frac{ab_i}{2(k_2 - k_1)} \int_0^\infty \left[\frac{1 + k_2}{\Delta v_1} \left\{ c_{11} e^{-\lambda|v_1 z - v_1 z_{01}|} + c_{21} e^{-\lambda|v_2 z - v_1 z_{01}|} \right\} \right. \\ \left. - \frac{1 + k_1}{\Delta v_2} \left\{ c_{12} e^{-\lambda|v_1 z - v_2 z_{01}|} + c_{22} e^{-\lambda|v_2 z - v_2 z_{01}|} \right\} \right] \frac{J_0(\lambda r) J_1(\lambda a)}{\lambda} d\lambda \quad (49)$$

3.2 Case2の解析 2相横等方性体に対する問題のポテンシャル関数は前述のように導出された。しかし、Case2のように横等方性弾性体が等方性弾性体に接合している場合の解を導出する場合、この関数の極限をとるより、あらためて解を導出したほうが容易である。そこで、領域Iおよび領域IIにおけるポテンシャル関数を以下のようにおく。

$$\phi_{II} = \frac{ab_i}{2} \int_0^\infty A(\lambda) J_0(\lambda r) J_1(\lambda a) e^{-\lambda|z_1 - z_{01}|} d\lambda \\ + \frac{ab_i}{2} \int_0^\infty B(\lambda) J_0(\lambda r) J_1(\lambda a) e^{-\lambda|z_2 + z_{02}|} d\lambda \quad (50)$$

$$\phi_{II} = \frac{ab_i}{2} \int_0^\infty \{ C(\lambda) + z D(\lambda) \} J_0(\lambda r) J_1(\lambda a) e^{-\lambda v_i |z - z_{0i}|} d\lambda \quad (51)$$

これらの式を式(1)～(5)に代入し、式(19)～(22)の境界条件を適用すると、次式が得られる。なお、領域IIの計算においては、 $k'_i=1$ とする。

$$\bar{B}_1 + \bar{B}_2 - \bar{C} = \bar{A}_1 + \bar{A}_2 \quad (52)$$

$$\lambda(\kappa_1 v_1 \bar{B}_1 + \kappa_2 v_2 \bar{B}_2) + \bar{D} + \lambda v_i \bar{C} = \lambda(\kappa_1 v_1 \bar{A}_1 + \kappa_2 v_2 \bar{A}_2) \quad (53)$$

$$\lambda \left\{ \frac{\gamma \lambda}{C_{44}} \kappa_1 v_1 - (1 + \kappa_1) \right\} \bar{B}_1 + \lambda \left\{ \frac{\gamma \lambda}{C_{44}} \kappa_2 v_2 - (1 + \kappa_2) \right\} \bar{B}_2 \\ + \frac{2\Gamma}{v_i} (\lambda v_i \bar{C} + 2\bar{D}) = \lambda \left\{ \frac{\gamma \lambda}{C_{44}} \kappa_1 v_1 + (1 + \kappa_1) \right\} \bar{A}_1$$

$$+ \lambda \left\{ \frac{\gamma \lambda}{C_{44}} \kappa_2 v_2 + (1 + \kappa_2) \right\} \bar{A}_2 \quad (54)$$

$$(1 + \kappa_1) v_1 \lambda \bar{B}_1 + (1 + \kappa_2) v_2 \lambda \bar{B}_2 - 2\Gamma(\lambda v_i \bar{C} + \bar{D}) = \\ (1 + \kappa_1) v_1 \lambda \bar{A}_1 + (1 + \kappa_2) v_2 \lambda \bar{A}_2 \quad (55)$$

ここで、 $\bar{A}_i = A_i e^{-\lambda v_i z_{0i}}$, $\bar{B}_i = B_i e^{-\lambda v_i z_{0i}}$, $\bar{C} = C e^{-\lambda v_i z_{0i}}$, $\bar{D} = D e^{-\lambda v_i z_{0i}}$ である。

$$B_1 = \frac{1}{\Delta_B} \left\{ A_1 b_{11} + A_2 e^{-\lambda(v_2 - v_1)z_{01}} b_{12} \right\} \quad (56)$$

$$B_2 = \frac{1}{\Delta_B} \left\{ A_1 e^{-\lambda(v_1 - v_2)z_{01}} b_{21} + A_2 b_{22} \right\} \quad (57)$$

$$\Delta_B = \sum_{i=1}^2 (-1)^{i+1} \left\{ \frac{\gamma \lambda}{C_{44}} \kappa_i v_i - (1 + \kappa_i) - 2\Gamma \left(1 + \frac{2\kappa_i v_i}{v_i} \right) \right\} \\ \times \left\{ (1 + \kappa_{3-i}) v_{3-i} + 2\Gamma \kappa_{3-i} v_{3-i} \right\} \quad (58)$$

$$b_{ij} = (-1)^{i+1} \left\{ (1 + \kappa_j) + \frac{\gamma \lambda}{C_{44}} \kappa_j v_j - 2\Gamma \left(\frac{2\kappa_j v_j}{v_j} - 1 \right) \right\} \\ \times \left\{ (1 + \kappa_{3-i}) v_{3-i} + 2\Gamma v_{3-i} \kappa_{3-i} \right\} - \left\{ (1 + \kappa_j) v_j + 2\Gamma \kappa_j v_j \right\} \\ \times \left\{ \frac{\gamma \lambda}{C_{44}} \kappa_{3-i} v_{3-i} - (1 + \kappa_{3-i}) - 2\Gamma \left(\frac{2\kappa_{3-i} v_{3-i}}{v_i} + 1 \right) \right\} \quad (59)$$

$$C = \frac{1}{\Delta_B} \sum_{i=1}^2 A_i e^{-\lambda(v_i - v_i)z_{0i}} \tilde{c}_i \quad (60)$$

$$D = \lambda \sum_{i=1}^2 A_i e^{-\lambda(v_i - v_i)z_{0i}} \left[\kappa_i v_i - v_i - \frac{1}{\Delta_B} \sum_{j=1}^2 (\kappa_j v_j + v_j) b_{ji} \right] \quad (61)$$

$$\tilde{c}_i = \left\{ 1 + \kappa_i + \frac{\gamma \lambda}{C_{44}} \kappa_i v_i - 2\Gamma \left(\frac{2\kappa_i v_i}{v_i} - 1 \right) \right\} \\ \times \sum_{m=1}^2 \left\{ (1 + \kappa_m) v_m + 2\Gamma \kappa_m v_m \right\} + \left\{ (1 + \kappa_i) v_i + 2\Gamma \kappa_i v_i \right\} \\ \times \left\{ \sum_{m=1}^2 \left(\frac{\gamma \lambda}{C_{44}} \kappa_m v_m - (1 + \kappa_m) - \frac{4\Gamma \kappa_m v_m}{v_i} \right) - 4\Gamma \right\} \quad (62)$$

3.3 Case3の解析 Case3は転位ループが存在している等方性弾性体が半無限の横等方性弾性体と接合している場合である。前述したように2相横等方性弾性体の関数の極限をとって求めるより、あらためて解を導出したほうが容易である。そこで、領域Iおよび領域IIにおけるポテンシャル関数をつぎのようにおく。

領域Iについて

$$\phi_I = \frac{ab_i}{2} \int_0^\infty \frac{1}{\lambda} \left[M - \lambda N |z - z_0| \right] e^{-\lambda v_i |z - z_0|} J_0(\lambda r) J_1(\lambda a) d\lambda \\ + \frac{ab_i}{2} \int_0^\infty \frac{1}{\lambda} \left[E + z F \right] e^{-\lambda v_i |z - z_0|} J_0(\lambda r) J_1(\lambda a) d\lambda \quad (63)$$

領域IIについて

$$\phi_{II} = \frac{ab_2}{2} \int_0^\infty C_i(\lambda) e^{-\lambda v_i |z-z_0|} J_0(\lambda r) J_1(\lambda a) d\lambda \quad (64)$$

ここで、 M, N は式(26)で与えられる。 E, F, C_1, C_2 を境界条件より決定する。 $k_i=1$ とおいた式(1)～(5)に式(63)および(64)を代入し、式(19)～(22)の境界条件を適用すると、次式が得られる。

$$-\bar{M} + \bar{N}\lambda z_0 - \bar{E} = -\lambda(\bar{C}_1 + \bar{C}_2) \quad (65)$$

$$\bar{N}(1 - \lambda v_i z_0) + \bar{M} v_i - v_i E + \frac{\bar{F}}{\lambda} = v_i \kappa_1 \bar{C}_1 + v_i \kappa_2 \bar{C}_2 \quad (66)$$

$$2C_{44} \left\{ \left(\frac{2\bar{N}}{v_i} + \bar{M} \right) \lambda - \bar{N}\lambda^2 z_0 + \lambda \bar{E} - \frac{2\bar{F}}{v_i} \right\} = \{ C_{44}(1 + \kappa_1) - \gamma v_i \kappa_1 \} \lambda^2 \bar{C}_1 + \{ C_{44}(1 + \kappa_2) - \gamma v_i \kappa_2 \} \lambda^2 \bar{C}_2 \quad (67)$$

$$2C_{44} \left\{ -\bar{N}(1 - \lambda v_i z_0) - \bar{M} v_i + v_i \bar{E} - \frac{\bar{F}}{\lambda} \right\} = -C_{44} \{ (1 + \kappa_1) v_i \bar{C}_1 + (1 + \kappa_2) v_i \bar{C}_2 \} \quad (68)$$

ここで、 $\bar{M} = M e^{-\lambda v_i z_0}$, $\bar{N} = N e^{-\lambda v_i z_0}$, $\bar{E} = E e^{-\lambda v_i z_0}$, $\bar{F} = F e^{-\lambda v_i z_0}$, $\bar{C}_i = C_i e^{-\lambda v_i z_0}$ である。

上記の式から、次式が得られる。

$$v_1 \bar{C}_1 = -v_2 \bar{C}_2 W \quad (69)$$

ここで、

$$W = \frac{2\kappa_2 - \Gamma(1 + \kappa_2)}{2\kappa_1 - \Gamma(1 + \kappa_1)} \quad (70)$$

これらの関係を式(66)および(67)に代入して、 $\bar{C}_1, \bar{C}_2, \bar{E}, \bar{F}$ を求めると、次式が得られる。

$$\bar{C}_i = (-1)^{i+1} \frac{4v_{3-i}}{\lambda \Delta_c} \{ \bar{N}(v_i \lambda z_0 - 1) - \bar{M} v_i \} \quad (71)$$

$$\bar{E} = -\bar{M} + \bar{N}\lambda z_0 - \frac{4(v_1 - v_2 W)}{\Delta_c} \{ \bar{N}(v_i \lambda z_0 - 1) - \bar{M} v_i \} \quad (72)$$

$$\begin{aligned} \bar{F} = \lambda \left\{ \bar{N}(v_i \lambda z_0 - 1) - \bar{M} v_i \right\} \left\{ 1 - \frac{4v_1 v_2}{\Delta_c} (\kappa_2 - \kappa_1 W) \right\} \\ - v_i \left\{ -\bar{M} + \bar{N}\lambda z_0 - \frac{4(v_1 - v_2 W)}{\Delta_c} \{ \bar{N}(v_i \lambda z_0 - 1) - \bar{M} v_i \} \right\} \end{aligned} \quad (73)$$

ここで、

$$\Gamma = \frac{C_{44}}{C_{44}} \quad (74)$$

$$\Delta_c = 2v_1 v_2 (\kappa_2 - \kappa_1 W) + v_i v_j \{ (1 + U_2) - W(1 + U_1) \} \quad (75)$$

である。

3.4 任意形状の転位ループに対するポテンシャル関数 これまでは、円形状の転位ループに対する解を導出した。界面応力を考慮すると、各Caseにおけるポテンシャル関数の分母に積分変数 λ が残り、積分を

閉じた形で表すことが出来ない。これに対し、界面応力を考慮しない場合、ポテンシャル関数はさらに変形することができ、その結果次式のように任意形状の転位ループに対するポテンシャル関数が得られる。

1) Case1 に対するポテンシャル関数：

$$\begin{aligned} \phi_I = \oint \frac{b_i dS}{4\pi(k_2 - k_1)} \left[\frac{1 + k_2}{v_1} \frac{1}{R_1^*} - \frac{1 + k_1}{v_2} \frac{1}{R_2^*} \right. \\ \left. + \frac{1}{(v_2 - v_1)} \left\{ \frac{1 + k_2}{v_1} \left(-\frac{B_{11}^*}{R_{11}} + \frac{B_{21}^*}{R_{21}} \right) + \frac{1 + k_1}{v_2} \left(\frac{B_{12}^*}{R_{12}} - \frac{B_{22}^*}{R_{22}} \right) \right\} \right] \end{aligned} \quad (76)$$

$$\phi_{II} = \oint \frac{b_i dS}{4\pi(k_2 - k_1)} \left[\frac{1 + k_2}{\Delta^* v_1} \left\{ \frac{c_{11}^*}{\hat{R}_{11}} + \frac{c_{21}^*}{\hat{R}_{21}} \right\} - \frac{1 + k_1}{\Delta^* v_2} \left\{ \frac{c_{12}^*}{\hat{R}_{12}} + \frac{c_{22}^*}{\hat{R}_{22}} \right\} \right] \quad (77)$$

ここで、

$$R_i^* = \sqrt{(x - \hat{x})^2 + (y - \hat{y})^2 + v_i^2 (z - z_0)^2} \quad (78)$$

$$R_{ij} = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (v_i z + v_j z_0)^2} \quad (79)$$

$$\hat{R}_{ij} = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (v_i z - v_j z_0)^2} \quad (80)$$

ここで、 c_{ij}^*, Δ^* は表面応力の項を除いた式を表す。

2) Case2 に対するポテンシャル関数：

$$\begin{aligned} \phi_I = \oint \frac{b_i dS}{4\pi(\kappa_1 - \kappa_2)} \left[-\frac{1 + \kappa_2}{v_1} \left\{ \frac{1}{R_1^*} + \frac{1}{\Delta_B^*} \left(\frac{b_{11}^*}{R_{11}} + \frac{b_{21}^*}{R_{21}} \right) \right\} \right. \\ \left. + \frac{1 + \kappa_1}{v_2} \left\{ \frac{1}{R_2^*} + \frac{1}{\Delta_B^*} \left(\frac{b_{12}^*}{R_{12}} + \frac{b_{22}^*}{R_{22}} \right) \right\} \right] \end{aligned} \quad (81)$$

$$\begin{aligned} \phi_{II} = \oint \frac{b_i dS}{4\pi(\kappa_1 - \kappa_2)} \left[-\frac{1 + \kappa_2}{v_1} \left\{ \frac{\hat{c}_1^*}{\Delta_B^*} + \frac{z h_1}{v_i} \frac{\partial}{\partial z} \right\} \frac{1}{\hat{R}_1^*} \right. \\ \left. + \frac{1 + \kappa_2}{v_1} \left\{ \frac{\hat{c}_2^*}{\Delta_B^*} + \frac{z h_2}{v_s} \frac{\partial}{\partial z} \right\} \frac{1}{\hat{R}_2^*} \right] \end{aligned} \quad (82)$$

ここで、

$$\hat{R}_i^* = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (v_i z - v_j z_0)^2} \quad (83)$$

$$h_i = \kappa_i v_i - v_s - \frac{1}{\Delta_B^*} \sum_{j=1}^2 (\kappa_j v_j + v_s) b_{ji}^* \quad (84)$$

3) Case3 に対するポテンシャル関数：

$$\phi_I = \oint \frac{b_i dS}{4\pi} \left\{ L_1 \left(\frac{1}{R_1} \right) + L_2 \left(\frac{1}{R_2} \right) \right\} \quad (85)$$

$$\begin{aligned} \phi_{II} = \oint \frac{b_i dS}{\Delta_c^*} \left[-v_2 \left\{ (N + M v_s) + \frac{N v_s z_0}{v_1} \frac{\partial}{\partial z} \right\} \frac{1}{\hat{R}_1^*} \right. \\ \left. + v_1 \left\{ (N + M v_s) + \frac{N v_s z_0}{v_2} \frac{\partial}{\partial z} \right\} \frac{1}{\hat{R}_2^*} \right] \end{aligned} \quad (86)$$

ここで、

$$R_i = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + v_i^2 (z - z_0)^2} \quad (87)$$

$$R_2 = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + v_s^2 (z + z_0)^2} \quad (88)$$

$$L_i = M - \frac{N(z - z_0)}{v_i} \frac{\partial}{\partial z} \quad (89)$$

$$\begin{aligned}
L_2 = & - \left\{ M + \frac{4(N + Mv_s)}{\Delta_c} (v_1 - v_2 W) \right\} - \frac{1}{v_s} [Mv_s z \\
& + Nz_0 + \frac{Mv_s + N}{\Delta_c} \{ 2zv_1 v_2 (\kappa_1 W - \kappa_2) \} \\
& + v_s z (v_1 U_2^* - v_2 U_1^* W) + v_s (v_1 - v_2 W) (4Nz_0 - 3z)] \frac{\partial}{\partial z} \\
& + \frac{Nz_0}{v_s} \left[-1 + \frac{1}{\Delta_c} \{ -2v_1 v_2 (\kappa_2 - \kappa_1 W) \right. \\
& \left. + v_s (v_1 U_2^* - v_2 U_1^* W) - 3v_s (v_1 - v_2 W) \} \right] \frac{\partial^2}{\partial z^2} \\
& \dots\dots\dots(90)
\end{aligned}$$

3.5 自由エネルギーが区分的に変化した場合の解析 いま、原子配列の変化により無限横等方性弾性体中のある領域 ($z=z_0$ の位置で半径 a の内側) の自由エネルギー γ が次式で与えられるように $\Delta\gamma$ 変化したとする。

$$\gamma = \Delta\gamma \delta(z - z_0) H(a - r) \dots\dots\dots(91)$$

表面応力にひずみの影響を考えないとすると、式(16)より

$$\tau'' = \Delta\gamma \delta(z - z_0) H(a - r) \dots\dots\dots(92)$$

式(14)から

$$\sigma^{r+} - \sigma^{r-} + \tau_r'' = 0 \dots\dots\dots(93)$$

ここで、座標の添字 r は1方向、 θ は2方向に対応している。これに式(92)を代入すると、

$$\sigma^{r+} - \sigma^{r-} - \Delta\gamma \delta(z - z_0) \delta(a - r) = 0 \dots\dots\dots(94)$$

いま、ポテンシャル関数を

$$\phi_i = \int_0^\infty T_i(\lambda) e^{-\lambda|z-z_0|} J_0(\lambda r) d\lambda \dots\dots\dots(95)$$

とおき、 σ^r を求め、式(93)に代入すると、

$$\sum_{i=1}^2 (1 + \kappa_i) v_i T_i(\lambda) = \frac{\Delta\gamma}{2\lambda} a J_1(\lambda a) \dots\dots\dots(96)$$

が得られる。また、式(15)の関係から

$$\sigma^{rz} \pm \frac{\Omega}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial w_z^*}{\partial r} \right) = 0 \quad (z = \pm z_0) \dots\dots\dots(97)$$

上式に式(95)の関数を代入すると、 $z=z_0$ の面で応力 σ^r は釣り合っている、すなわち $\sigma^{r+} - \sigma^{r-} = 0$ となっていることがわかる。さらに、式(95)を式(1)に代入して、変位 w_i を求めると次式が得られる。

$$w_i^* = - \int_0^\infty \sum_{i=1}^2 T_i(\lambda) \lambda \kappa_i v_i \operatorname{sgn}(z - z_0) J_0(\lambda r) e^{-\lambda v_i |z - z_0|} d\lambda \dots\dots\dots(98)$$

いま、 $z = \pm z_0$ で $w_i^+ - w_i^- = \zeta$ とする。この関係と式(96)を同時に満足する関係は、以下の式で与えられる。

$$T_i v_i = (-1)^i \frac{\Delta\gamma}{2C_{44}} \frac{2 + \kappa_{3-i}}{\kappa_2 - \kappa_1} \frac{a}{\lambda} J_1(\lambda a) \dots\dots\dots(99)$$

と求められる。この式を式(24)と比較すると、

$$\zeta = \frac{\Delta\gamma}{C_{44}} (= b_i) \dots\dots\dots(100)$$

が得られる。厳密には σ^r に関する式(96)がブリズマティック転位ループの関係式と異なるが、局所的なエネルギーの変化により z 軸方向のブリズマティック状の転位が形成される。自由エネルギーの変化により発生する場合には、転位ループ先端に非常に大きいせん断応力の発生することから、 $r=a$ の位置の原子を z 方向にせん断応力で滑らせて、転位を作ったと考えることができる。また、式(100)は転位のバーガスベクトルと自由エネルギーの関係を表しているとも言える。ちなみに、自由エネルギーの変化が $\Delta\gamma=0.5\text{J/m}^2$ とすると Ti 中では $1.06 \times 10^{-11}\text{m}$ の b_i を生じる。ここで、Ti の弾性定数として $C_{44}=46.7\text{GPa}$ とした。

また、2.3 および 3.5 の解析結果を用い Case1 の場合について無次元応力 $\sigma^r / C_{44} / (b_i / a)$ を求め、その分布を図2および3に示す。なお、 $z_0/a=0.15$ とした。表1は計算に用いた値である。図2は2.3の結果を用いて、界面エネルギー($\gamma=2\text{J/m}^2$)の有無による違いを示したものである。また、図3は3.5の結果を用いたものである。図2の(a)と(b)を比較すると両者の応力分布は比較的類似していることがわかるが、 $r=a$ 近傍の値が表面応力を考慮した方が大きいことが、図の応力レンジからわかる。この計算では長さに関する量を転位ループ半径で無次元化している。ちなみに、ここでは a を 1nm と想定している。図3は界面エネルギーを考慮した結果である。図2の結果と同様に界面エネルギーを考慮した方がループ端部で大きい応力が発生する。逆に、界面エネルギーを考慮すると転位の発生により大きい応力が必要となるといえる。薄膜には転位発生に臨界膜厚がある^{(2),(3)}、本研究からも膜が薄くなると転位発生により大きい応力が必要となることが推察される。図4は界面($z=0$)における $\sigma^r / C_{44} / (b_i / a)$ の分布である。転位ループ先端近傍に引張り・圧縮の大きい応力集中があり、界面の剥離などの問題を引き起こす可能性があることを示唆している。

4. 結 言

本研究では、2相横等方性弾性体中に円形転位ループがある場合の解析解を求め、より一般的な任意形状の

Table 1 Material properties used in calculation

Modulus of Region I [GPa]		Modulus of Region II [GPa]	
C_{11}	162.0	C'_{11}	59.2
C_{13}	69.0	C'_{13}	21.4
C_{44}	46.7	C'_{44}	16.4
C_{33}	181.0	C'_{33}	61.4

転位ループに対する解を導いた。また、界面エネルギーがある場合には、任意形状の転位ループに対する解は求めることはできない。接合面に界面エネルギーを導入すると、転位ループ先端に考慮しない場合より大きい応力場が発生することがわかった。また、原子配列などの変化により自由エネルギーが局所的に変化した場合、ブリズマティック転位に似た解を求めることができる。自由エネルギーの変化量に対する材料中の変位を表す関係を示した。

文 献

- (1) Eaglesham, D. J., Kvam, E. P., Maher, D. M., Humphreys, C. J. and Bean, J. C., *Phil. Mag.*, **59**-5(1989), 1059-1073.
- (2) Sharan, S. and Narayan, J., *J. Appl. Phys.*, **66**-6(1989), 2376-2380.
- (3) Beltz, G. E. and Freund, L. B., *Phil. Mag.*, **69**-1(1994), 183-202.
- (4) Wolfer, W. G. and Drugan, W. J., *Phil. Mag.*, **57**-6(1988), 923-937.
- (5) Salamon, N. J. and Dundurs, J., *J. Elast.*, **1**-2(1971), 153-164.
- (6) Dundurs, J. and Salamon, N. J., *Phys. Stat. Sol. (b)*, **50**(1972), 125-133.
- (7) 古口, 機論, **58**-555, A(1992), 2132-2137.
- (8) 原, ほか3名, 機論, **54**-501(1988), 983-989.
- (9) Pan, Y.-C. and Chou, T.-W., *J. Appl. Mech., ASME*, **46**-3(1979), 551-555.
- (10) Ackland, G. J. and Finnis, M. W., *Phil. Mag. A*, **54**-2(1986), 301-315.
- (11) Khachaturyan, A. G. and Morris, J. W., *Phil. Mag.*, **56**-4(1987), 517.
- (12) Yu, H.Y. and Sanday, S. C., *Phil. Mag. A*, **70**-5(1994), 725-738.

 Fig.2 Distribution of stress σ^z for prismatic loop

 Fig.4 Distribution of stress σ^z along r/a ($z_0=0.15$)

 Fig.3 Distribution of stress σ^z for free energy variation in case considering interface stress ($\gamma=2.0\text{J/m}^2$)