分子動力学法と弾性解析による表面に段差を有する
異方性弾性体の段差近傍の変位場の解析*古口 日出男^{*1}, 青木 崇浩^{*2}Deformation Analysis for a Half-elastic Domain Using
Molecular Dynamic and the Theory of ElasticityHideo KOGUCHI^{*3} and Takahiro AOKI^{*3} Department of Mechanical Engineering, Nagaoka University of Technology,
1603-1 Kamitomioka, Nagaoka-shi, Niigata, 940-2188 Japan

Molecular dynamic simulation and anisotropic elastic theory are employed to determine the elastic fields of surface steps and vicinal surfaces. The displacement field near a step of Fe is determined using atomistic simulation and FS potentials. We derive an anisotropic form for elastic field associated with a surface line force dipole using a two-dimensional surface Green function for a cubic elastic half-space considering surface stresses. The displacements considering surface stresses are less than those no considering near the step. When surface stress varies in a step manner, the displacement in the normal direction of the surface occurs. We considered that surface stress would vary between the surface beneath the step and the surface. The displacement produced by adding the displacement due to the surface dipole force to the displacement due to the variation of surface stress is shown to be in excellent agreement with the simulation.

Key Words: Elasticity, Micromechanics, Size Effect, Anisotropy, Surface Stress, Molecular Dynamics

1. 緒 言

現在, ナノテクノロジーに関する研究が活発に行われている。電子部品や機械部品には, ナノメートル厚さの薄膜などが使われている。薄膜を形成する際, 材料表面に微小な段差が生じることが多くある。表面に形成された段差は, 異原子や不純物との相互作用により, 薄膜の成長や表面原子の再配置, 結晶欠陥の発生に影響を与える。ナノメートルサイズの構造物においては, マクロでは無視できる一原子層厚さの段差でもその変形および応力分布に影響を与える⁽¹⁾⁽²⁾。また, 材料表面における異原子の自己パターン形成の研究においても段差近傍のひずみエネルギーがパターンの安定成長に影響することが指摘されている。

段差を有する半無限体の弾性場について, Merchenko と Parshin⁽³⁾ は, 平坦な面に力を分布することにより表した。彼らは, 表面に作用する力は二つあり, 一つは表面に沿う方向のダイポール, もう一つは段差の高さと表面応力の積を大きさとする表面に

垂直な方向のダイポールとした。このようにして半無限体表面に原子単層の段差がある場合の段差近傍の変位場を, 段差がない半無限体表面のダイポールに対する変位場で表した。また, Alerhand ら⁽⁴⁾ は半無限 Si 表面原子の再配置において自律的に縞状のパターンが組織化される場合の安定問題を調べた。その際, 彼らは段差のない表面上に力を作用させることにより段差近傍の変位場を求め, ひずみエネルギーを表した。その後, Stewart ら⁽⁵⁾ は半無限体表面に原子単層の段差がある場合の段差近傍の変位場に等方性体におけるダイポールの解を用いて表し, Si(111)面の変位とひずみエネルギーを求めた。また, Shilkrot と Srolovitz⁽⁶⁾ は半無限体の表面に段差が周期的に多数存在している場合の段差間の相互干渉エネルギーをダイポールの式を用いて表し, 分子動力学法(MD法)によりダイポールの強さを求めた。また, Kouris ら⁽⁷⁾⁻⁽⁹⁾ は, 表面に付着した原子と表面の関係を連続体力学と MD 法および格子力学を用いて調べている。そこでは, 付着原子をダイポールとしてモデル化している。これらの解析に用いられているグリーン関数あるいはダイポールの関数はこれまでの半無限弾性体で導出される関係式を用いている。ところで, 物体表面には表面エネルギーおよび表面応力が存在している

* 原稿受付 2004 年 5 月 24 日。

^{*1} 正員, 長岡技術科学大学工学部(〒940-2188 長岡市上富岡町 1603-1)。^{*2} 長岡技術科学大学大学院機械システム工学科。

E-mail: koguchi@mech.nagaokaut.ac.jp

が、表面応力を考慮したグリーン関数およびダイポールの式はいまだ導出されていない。

本研究では、始めに表面応力を考慮したグリーン関数を導出する。次に表面応力および表面力をMDを用いて求める。その後、表面に段差を有する弾性体について、MDと弾性論から得られる段差近傍の変形を比較する。そして、表面近傍の変位場に対する表面応力の影響を明らかにする。これらの解析を通して、連続体力学によるナノメータサイズ構造体の応力解析の可能性を示す。

2. 段差のある半無限体の変形解析

2・1 境界条件 表面応力を考慮した境界条件⁽¹⁰⁾を以下に示す。

(1) 表面の接平面上の境界条件

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

(2) 表面の法線方向の境界条件

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

ここで、 $\tau_{\alpha\beta}$ ：表面応力、 σ_{ij} ：バルクの応力、 v_i ：表面の法線ベクトル、 $\kappa_{\mu\beta}$ ：表面の曲率である。また、 α, β, μ のギリシャ文字は1,2(表面内に対応)を、 i, j のアルファベットは1,2,3の値をとる。

式(1)および式(2)は、作用力ベクトル T_k を用いて、それぞれ次式のようにも書くことができる。

$$\tau_{\alpha\beta,\beta} - T_\alpha = 0 \quad (3)$$

$$\tau_{\mu\beta}\kappa_{\mu\beta} v_j - T_j = 0 \quad (4)$$

2・2 段差のある半無限体の境界条件 半無限体の表面に段差がある場合、Merchenko と Parshin⁽⁹⁾

(a) Anisotropic half-domain with a step

(b) A dipole force without moment

(c) A dipole force with moment

Fig. 1 Schematic view of forces acting on anisotropic half-domain with a step

が考えたように図1に示すように段差のある位置にモーメントを持つダイポールと持たないダイポールがあるとする。ダイポールの強さはモーメントを有する場合 Tb 、モーメントを有しない場合には実験あるいはMD法などにより決める必要がある。ダイポールに対する変位場は次式のように書くことができる⁽⁶⁾。

$$u(x, z) = g(x, z) \mathbf{D} \quad (5)$$

ここで、 $\mathbf{u}$ は変位ベクトル、 $\mathbf{D}$ はダイポールベクトル、 g はグリーン関数 $\mathbf{G}(x, z)$ から得られる関数である。

$$g(x, z) = -\frac{\partial}{\partial x} \mathbf{G}(x, z) \quad (6)$$

以上のことから、グリーン関数を導出するための境界条件を以下に示す。表面応力は図2に示すように半無限体表面で一様であるとする。図1を参照して、図3に示すように y 軸 $(x, y, z) = (0, y, 0)$ に沿って一様に x 軸方向および z 軸方向に外力が作用している場合を考える。その場合の境界条件は式(1)、(2)より次式で与えられる。

(1) $z=0$ 面の $|x| \leq c$ に f_x が作用する場合

$$\sigma_{zx} = f_x \{H(c+x) - H(c-x)\} \quad (7)$$

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

$$\tau_{xx} \frac{\partial^2 w_0}{\partial x^2} - \sigma_{zz} = 0 \quad (9)$$

(2) $z=0$ 面の $|x| \leq c$ に f_z が作用する場合

$$\sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0 \quad (10)$$

Fig. 2 Model for analysis and coordinates

Fig. 3 Model for analysis and coordinates

$$\tau_{xx} \frac{\partial^2 w_0}{\partial x^2} - \sigma_{zz} = -f_x \{H(c+x) - H(c-x)\} \quad \dots\dots\dots (11)$$

ここで、 w_0 は表面の変位、 $\partial^2 w_0 / \partial x^2$ は表面の曲率である。また、 $H(x)$ はヘビサイドのステップ関数で、 $H(x) = 1 (x \geq 0)$ 、 $0 (x < 0)$ である。

2・3 表面応力を考慮したグリーン関数およびダイポールによる変位場の導出

2・3・1 基礎式の導出 本研究で解析する材料は、立方晶系の材料である。立方晶の [001] 面が z 軸に垂直な表面であるとする。構成方程式は以下のとおりである。

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{yz} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{xy} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{13} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{23} & 0 & 0 & 0 \\ c_{13} & c_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{66} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \partial u / \partial x \\ \partial w / \partial z \\ \partial v / \partial z \\ \partial u / \partial z + \partial w / \partial x \\ \partial v / \partial x \end{Bmatrix} \quad \dots\dots\dots (12)$$

また、平衡方程式を次式に示す。

$$\sigma_{ij,j} = 0 \quad \dots\dots\dots (13)$$

変形は x - z 平面内のみで y 軸に沿って一様となることから、変位 u, v, w を次式のようにおく。

$$\begin{cases} u(x, z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A(s) e^{-\lambda|s|z - isx} ds \\ v(x, z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A_0(s) e^{-\lambda|s|z - isx} ds \\ w(x, z) = \frac{R}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A(s) \operatorname{sgn}(s) e^{-\lambda|s|z - isx} ds \end{cases} \quad \dots\dots\dots (14)$$

この変位を式(12)に代入し応力を求めると、次式のようになる。

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A(s) s (ic_{11} + c_{13} R \lambda) e^{-\lambda|s|z - isx} ds \\ \sigma_{yy} &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A(s) s (ic_{12} + c_{23} R \lambda) e^{-\lambda|s|z - isx} ds \\ \sigma_{zz} &= -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A(s) s (ic_{13} + c_{33} R \lambda) e^{-\lambda|s|z - isx} ds \\ \sigma_{yz} &= -\frac{c_{44}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A_0(s) |s| \lambda e^{-\lambda|s|z - isx} ds \\ \sigma_{xz} &= -\frac{c_{55}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A(s) |s| (\lambda + iR) e^{-\lambda|s|z - isx} ds \\ \sigma_{xy} &= -\frac{c_{44}}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A_0(s) s e^{-\lambda|s|z - isx} ds \end{aligned} \quad \dots\dots\dots (15)$$

式(15)を平衡方程式に代入すると、次式が得られる。

$$\begin{cases} (c_{11} - c_{55} \lambda^2) - i\lambda(c_{13} + c_{55})R = 0 \\ i\lambda(c_{13} + c_{55}) + (c_{33} \lambda^2 - c_{55})R = 0 \end{cases} \quad \dots\dots\dots (16)$$

式(15)より R は次式のように求められる。

$$R = -\frac{i(c_{11} - c_{55} \lambda^2)}{\lambda(c_{13} + c_{55})} \quad \dots\dots\dots (17)$$

ここで、 λ は次式の根の内、 $\operatorname{Re}(\lambda) < 0$ のものを用いる。

$$c_{33} c_{55} \lambda^4 + (c_{13}^2 + 2c_{13} c_{55} - c_{11} c_{33}) \lambda^2 + c_{11} c_{55} = 0 \quad \dots\dots\dots (18)$$

その結果、変位場の式は次式のようになる。

$$\begin{cases} u(x, z) = \frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^2 \int_{-\infty}^{\infty} A_j(s) e^{-\lambda_j|s|z - isx} ds \\ w(x, z) = \frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^2 R_j \int_{-\infty}^{\infty} A_j(s) \operatorname{sgn}(s) e^{-\lambda_j|s|z - isx} ds \end{cases} \quad \dots\dots\dots (19)$$

2・3・2 x 方向に集中荷重が作用する場合 始めに、 f_x が作用している場合を考える。式(12)に式(19)を適用し、式(7)～(9)の境界条件に代入すると次式が得られる。

$$\begin{aligned} -\frac{c_{55}}{2\pi} \sum_{j=1}^2 \int_{-\infty}^{\infty} A_j(s) |s| (\lambda_j + iR_j) e^{-isx} ds \\ = f_x \{H(c+x) - H(c-x)\} \quad \dots\dots\dots (20) \end{aligned}$$

$$A_0(s) = 0 \quad \dots\dots\dots (21)$$

$$\sum_{j=1}^2 A_j(s) (-\tau_{xx} |s| R_j + ic_{13} + c_{33} \lambda_j R_j) = 0 \quad \dots\dots\dots (22)$$

式(20)および式(22)を式の変形上、次式のように書く。

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} (A_1 \omega_{21} + A_2 \omega_{22}) |s| e^{-isx} ds \\ = -\frac{f_x}{c_{55}} \{H(c+x) - H(c-x)\} \quad \dots\dots\dots (23) \end{aligned}$$

$$A_1 (-\tau_{xx} R_1 |s| + \omega_{31}) + A_2 (-\tau_{xx} R_2 |s| + \omega_{32}) = 0 \quad \dots\dots\dots (24)$$

ここで、 $\omega_{2j} = \lambda_j + iR_j$ 、 $\omega_{3j} = ic_{13} + c_{33} \lambda_j R_j$ である。

式(24)より A_2 を A_1 で表し、式(23)に代入してフーリエ逆変換を行うと次式が得られる。

$$\begin{aligned} A_1 |s| \frac{\omega_{21} (-\tau_{xx} R_1 |s| + \omega_{32}) - \omega_{22} (-\tau_{xx} R_2 |s| + \omega_{31})}{-\tau_{xx} R_2 |s| + \omega_{32}} \\ = -\frac{f_x}{c_{55}} \frac{2 \sin cs}{s} \quad \dots\dots\dots (25) \end{aligned}$$

この式および式(24)より A_1 および A_2 が次式のよう求められる。

$$A_1 = \frac{1}{c_{55}} \frac{2f_x \sin cs}{s} \frac{1}{|s|} \frac{-\tau_{xx} R_2 |s| + \omega_{32}}{\tau_{xx} b_1^* |s| + b_2} \quad \dots\dots\dots (26)$$

$$A_2 = -\frac{1}{c_{55}} \frac{2f_x \sin cs}{s} \frac{1}{|s|} \frac{-\tau_{xx} R_1 |s| + \omega_{31}}{\tau_{xx} b_1^* |s| + b_2} \quad \dots\dots\dots (27)$$

ここで、

$$b_1^* = \lambda_1 R_2 - \lambda_2 R_1, \quad b_2 = \omega_{22} \omega_{31} - \omega_{21} \omega_{32} \quad \dots\dots\dots (28)$$

いま、領域 $|x| \leq c$ に一様に作用している外力の合力

を F_x とすると $f_x = F_x/(2c)$ となる。式(26)および式(27)の外力項における c を零にする。すなわち、

$$\lim_{c \rightarrow 0} (2f_x \sin cs/s) = \lim_{c \rightarrow 0} (F_x \sin cs/cs) = F_x$$

として、大きさ F_x の集中荷重に対する関係式を誘導する⁽¹¹⁾。その後、式(19)に係数 A_1 および A_2 を代入して、変数を無次元化し、整理すると次式のようになる。

$$\begin{aligned} \bar{u} &= \frac{1}{2\pi a} \frac{F_x}{c_{55}} \sum_{j=1}^2 (-1)^j \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{d_{j1}}{|\bar{s}|} + \frac{d_{j2}}{|\bar{s}| + \tau_0} \right] \\ &\quad \times e^{-\lambda_j |\bar{s}| \bar{x} - i \bar{s} \bar{x}} d\bar{s} \\ \bar{w} &= \frac{1}{2\pi a} \frac{F_x}{c_{55}} \sum_{j=1}^2 (-1)^j R_j \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{sgn}(\bar{s}) \left[\frac{d_{j1}}{|\bar{s}|} \right. \\ &\quad \left. + \frac{d_{j2}}{|\bar{s}| + \tau_0} \right] e^{-\lambda_j |\bar{s}| \bar{x} - i \bar{s} \bar{x}} d\bar{s} \quad \dots\dots\dots (29) \end{aligned}$$

ここで、 a をスケール因子(領析領域の代表寸法)とし、

$$\begin{aligned} \bar{u} &= \frac{u}{a}, \quad \bar{w} = \frac{w}{a}, \quad \bar{x} = \frac{x}{a}, \quad \bar{z} = \frac{z}{a}, \quad \bar{s} = sa \\ \tau_0 &= \frac{b_2^*}{b_1^* C_{ae}}, \quad b_2^* = \omega_{22} \omega_{31}^* - \omega_{21} \omega_{32}^*, \\ \omega_{3j}^* &= i c_{13} + \lambda_j R_j, \quad c_{13} = \frac{C_{13}}{C_{33}} \\ C_{ae} &= \frac{\tau_{xx}}{c_{33} a}, \quad d_{j1} = \frac{\omega_{22}^*}{b_2^*} \\ d_{j2} &= - \left(\frac{R_{3-j}}{b_1^*} + \frac{\omega_{22}^*}{b_2^*} \right) \quad \dots\dots\dots (30) \end{aligned}$$

式(29)を積分すると次式が得られる。

$$\begin{aligned} \bar{u}(\bar{x}, \bar{z}) &= \frac{1}{2\pi a} \frac{F_x}{c_{55}} \sum_{j=1}^2 (-1)^j \\ &\quad \times [d_{j1} \{-2\gamma - \log(\bar{x}^2 + (\lambda_j \bar{z})^2)\} + d_{j2} \psi_p(a_j)] \\ &\quad \dots\dots\dots (31) \\ \bar{w}(\bar{x}, \bar{z}) &= \frac{1}{2\pi a} \frac{F_x}{c_{55}} \sum_{j=1}^2 (-1)^j R_j \\ &\quad \times \left[-2i d_{j1} \arctan \frac{\bar{x}}{\lambda_j \bar{z}} + d_{j2} \psi_m(a_j) \right] \quad \dots\dots\dots (32) \end{aligned}$$

ここで、

$$\begin{aligned} \psi_p(a_j) &= e^{a_j} E_1(a_j) + e^{\bar{a}_j} E_1(\bar{a}_j) \\ \psi_m(a_j) &= e^{a_j} E_1(a_j) - e^{\bar{a}_j} E_1(\bar{a}_j) \\ a_j &= \tau_0(\lambda_j \bar{z} + i \bar{x}), \quad \bar{a}_j = \tau_0(\lambda_j \bar{z} - i \bar{x}) \\ E_1(x) &: \text{不完全ガンマ関数} \end{aligned}$$

である。

次に、ダイポールに対する変位場を導出する。式(6)に従って式(29)を x で微分し、その式を積分すると次式が得られる。

$$\begin{aligned} \bar{u}_{,x} &= \frac{i}{2\pi a} \frac{F_x}{c_{55}} \sum_{j=1}^2 (-1)^j \left[-\frac{R_{3-j}}{b_1^*} \frac{2i\bar{x}}{\bar{x}^2 + (\lambda_j \bar{z})^2} \right. \\ &\quad \left. + d_{j2} \tau_0 \psi_m(a_j) \right] \quad \dots\dots\dots (33) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{w}_{,x} &= \frac{i}{2\pi a} \frac{F_x}{c_{55}} \sum_{j=1}^2 (-1)^j R_j \\ &\quad \times \left[\frac{R_{3-j}}{b_1^*} \frac{2\lambda_j \bar{z}}{\bar{x}^2 + (\lambda_j \bar{z})^2} + d_{j2} \tau_0 \psi_p(a_j) \right] \quad \dots\dots\dots (34) \end{aligned}$$

2・3・3 z 方向に集中荷重が作用する場合 次に、表面に f_z が作用する場合を考える。この場合に対する未知関数 A_0, A_1, A_2 を A_0^*, A_1^*, A_2^* で表す。式(19)を式(12)に代入し、式(10)および式(11)を求めると次式が得られる。

$$A_0^* = 0 \quad \dots\dots\dots (35)$$

$$A_1^* \omega_{21} + A_2^* \omega_{22} = 0 \quad \dots\dots\dots (36)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \sum_{j=1}^2 \int_{-\infty}^{\infty} A_j^*(s) s (-\tau_{xx} R_j |s| + c_{13} i \\ + c_{33} R_j \lambda_j) e^{-i s x} ds \\ = -f_z \{H(c+x) - H(c-x)\} \quad \dots\dots\dots (37) \end{aligned}$$

式(36)より A_2^* を求め、式(37)に代入すると次式が得られる。

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} A_1^*(s) s \frac{\tau_{xx} |s| b_1^* + b_2}{\omega_{21}} e^{-i s x} ds \\ = -f_z \{H(c+x) - H(c-x)\} \quad \dots\dots\dots (38) \end{aligned}$$

この式をフーリエ逆変換して $A_1^*(s)$ を求め、式(36)から $A_2^*(s)$ を求めると次式が得られる。

$$A_1^*(s) = -\frac{2f_z \sin cs}{s} \frac{\omega_{22}}{s(\tau_{xx} |s| b_1^* + b_2)} \quad \dots\dots\dots (39)$$

$$A_2^*(s) = \frac{2f_z \sin cs}{s} \frac{\omega_{21}}{s(\tau_{xx} |s| b_1^* + b_2)} \quad \dots\dots\dots (40)$$

前述した方法と同様に外力の作用範囲 c の極限をとり、集中荷重に対する未知関数を求め、その式を式(19)に代入する。さらに前述した式と同様に無次元すると、次式が得られる。

$$\begin{aligned} \bar{u} &= \frac{-1}{2\pi a} \frac{F_z}{c_{33}} \sum_{j=1}^2 (-1)^{3-j} \frac{\omega_{22}^*}{b_2^*} \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{1}{\bar{s}} - \frac{\operatorname{sgn}(\bar{s})}{|\bar{s}| + \tau_0} \right\} e^{-\lambda_j |\bar{s}| \bar{x} - i \bar{s} \bar{x}} d\bar{s} \\ \bar{w} &= \frac{-1}{2\pi a} \frac{F_z}{c_{33}} \sum_{j=1}^2 (-1)^{3-j} \frac{R_j \omega_{22}^*}{b_2^*} \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{1}{|\bar{s}|} - \frac{1}{|\bar{s}| + \tau_0} \right\} e^{-\lambda_j |\bar{s}| \bar{x} - i \bar{s} \bar{x}} d\bar{s} \quad \dots\dots\dots (41) \end{aligned}$$

式(41)を積分すると次式が得られる。

$$\begin{aligned} \bar{u} &= \frac{1}{2\pi a} \frac{F_z}{c_{33}} \sum_{j=1}^2 (-1)^{3-j} \frac{\omega_{22}^*}{b_2^*} \\ &\quad \times \left\{ 2i \arctan \frac{\bar{x}}{\lambda_j \bar{z}} + \psi_m(a_j) \right\} \quad \dots\dots\dots (42) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \bar{w} &= \frac{1}{2\pi a} \frac{F_z}{c_{33}} \sum_{j=1}^2 (-1)^{3-j} \frac{R_j \omega_{22}^*}{b_2^*} \\ &\quad \times [2\gamma + \log\{\bar{x}^2 + (\lambda_j \bar{z})^2\} + \psi_p(a_j)] \quad \dots\dots\dots (43) \end{aligned}$$

次に、ダイポールに対する変位場を求めると次式のように表される。

$$\bar{u}_{,\bar{x}} = \frac{i}{2\pi a} \frac{F_z}{C_{33}} \sum_{j=1}^2 (-1)^{3-j} \frac{\omega_{2(3-j)}}{b_2^*} \tau_0 \psi_p(\alpha_j) \quad \dots\dots\dots (44)$$

$$\bar{w}_{,\bar{x}} = \frac{i}{2\pi a} \frac{F_z}{C_{33}} \sum_{j=1}^2 (-1)^{3-j} \frac{R_j \omega_{2(3-j)}}{b_2^*} \tau_0 \psi_m(\alpha_j) \quad \dots\dots\dots (45)$$

最終的にダイポール $\mathbf{D}=(D_x, D_z)$ に対する変位場は式(5)より次式のように書くことができる。

$$\begin{Bmatrix} \bar{u} \\ \bar{w} \end{Bmatrix} = \frac{-i}{2\pi a} \begin{bmatrix} g_{xx} & g_{zx} \\ g_{zx} & g_{zz} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} D_x \\ D_z \end{Bmatrix} \quad \dots\dots\dots (46)$$

ここで、

$$\begin{aligned} g_{xx} &= \frac{1}{C_{55}} \sum_{j=1}^2 (-1)^j \left[-\frac{R_{3-j}}{b_1^*} \frac{2i\bar{x}}{\bar{x}^2 + (\lambda_j \bar{z})^2} + d_{j2} \tau_0 \psi_p(\alpha_j) \right] \\ g_{zx} &= \frac{1}{C_{33}} \sum_{j=1}^2 (-1)^{3-j} \frac{\omega_{2(3-j)}}{b_2^*} \tau_0 \psi_p(\alpha_j) \\ g_{zz} &= \frac{1}{C_{55}} \sum_{j=1}^2 (-1)^j R_j \left[\frac{R_{3-j}}{b_1^*} \frac{2\lambda_j \bar{z}}{\bar{x}^2 + (\lambda_j \bar{z})^2} + d_{j2} \tau_0 \psi_p(\alpha_j) \right] \\ g_{zz} &= \frac{1}{C_{33}} \sum_{j=1}^2 (-1)^{3-j} \frac{R_j \omega_{2(3-j)}}{b_2^*} \tau_0 \psi_m(\alpha_j) \quad \dots\dots\dots (47) \end{aligned}$$

である。

2.4 表面応力を考慮しない場合のグリーン関数およびダイポールによる変位場 表面応力を考慮しない場合のグリーン関数 G_0 およびダイポール g_0 の式は、次式のように導くことができる。

$$\begin{aligned} G_{0,xx} &= \frac{-1}{2\pi a} \frac{1}{C_{55}} \frac{1}{b_2^*} \sum_{j=1}^2 (-1)^j \omega_{3(3-j)}^* \log\{\bar{x}^2 + (\lambda_j \bar{z})^2\} \\ G_{0,xz} &= \frac{-i}{\pi a} \frac{1}{C_{55}} \frac{1}{b_2^*} \sum_{j=1}^2 (-1)^j R_j \omega_{3(3-j)}^* \arctan\left(\frac{\bar{x}}{\lambda_j \bar{z}}\right) \\ G_{0,zx} &= \frac{i}{\pi a} \frac{1}{C_{33}} \frac{1}{b_2^*} \sum_{j=1}^2 (-1)^{3-j} R_j \omega_{2(3-j)}^* \arctan\left(\frac{\bar{x}}{\lambda_j \bar{z}}\right) \\ G_{0,zz} &= \frac{1}{2\pi a} \frac{1}{C_{33}} \frac{1}{b_2^*} \sum_{j=1}^2 (-1)^{3-j} R_j \omega_{2(3-j)}^* \log\{\bar{x}^2 \end{aligned}$$

$$+ (\lambda_j \bar{z})^2\} \quad \dots\dots\dots (48)$$

$$\begin{aligned} g_{0,xx} &= \frac{1}{\pi a} \frac{1}{C_{55}} \frac{1}{b_2^*} \sum_{j=1}^2 (-1)^j \omega_{3(3-j)}^* \frac{\bar{x}}{\bar{x}^2 + (\lambda_j \bar{z})^2} \\ g_{0,xz} &= \frac{i}{\pi a} \frac{1}{C_{33}} \frac{1}{b_2^*} \sum_{j=1}^2 (-1)^{3-j} \omega_{2(3-j)}^* \frac{\lambda_j \bar{z}}{\bar{x}^2 + (\lambda_j \bar{z})^2} \\ g_{0,zx} &= \frac{-i}{\pi a} \frac{1}{C_{55}} \frac{1}{b_2^*} \sum_{j=1}^2 (-1)^j R_j \omega_{3(3-j)}^* \frac{\lambda_j \bar{z}}{\bar{x}^2 + (\lambda_j \bar{z})^2} \\ g_{0,zz} &= \frac{1}{\pi a} \frac{1}{C_{33}} \frac{1}{b_2^*} \sum_{j=1}^2 (-1)^{3-j} R_j \omega_{2(3-j)}^* \frac{\bar{x}}{\bar{x}^2 + (\lambda_j \bar{z})^2} \quad \dots\dots\dots (49) \end{aligned}$$

2.5 表面応力がステップ状に変化した場合の変位場

上述の解析では段差の端部における応力の考察から得られた集中荷重に対する変位場を導出してきた。図4に示すように段差の存在している面 ($x < 0$) と存在していない ($x \geq 0$) 面を考えると、 $x \geq 0$ の表面と同じ z 座標を持つ $x < 0$ の面では表面応力に違いがある。すなわち、半無限立方晶体の表面応力 τ_{xx} が $\tau_{xx} = \tau_{xx}^0 + \tau_{xx}^\Delta H(x)$ のようにステップ的に変化した場合を考える。著者ら⁽¹²⁾ は、そのような表面応力の変化から誘起される z 方向変位を理論的に誘導している。

$$\begin{aligned} \bar{w} &= \frac{1}{2\pi b_1^*} \frac{C_{ae}^\Delta}{C_{55}} \sum_{j=1}^2 (-1)^{j+1} R_j \left[2iA_j \theta_j + \frac{\omega_{2(3-j)}}{2} \right. \\ &\quad \left. \times q_1 \{\psi_m(s_{1j}) + \psi_m(s_{2j})\} \right] \quad \dots\dots\dots (50) \end{aligned}$$

ここで、

$$\begin{aligned} A_j &= R_{3-j} + \omega_{2(3-j)} q_1, \quad s_{1j} = g_1(\lambda_j \bar{z} + i\bar{x})/C_{ae}^0 \\ s_{2j} &= g_1(\lambda_j \bar{z} + i\bar{x})/(C_{ae}^0 + C_{ae}^\Delta), \quad C_{ae}^0 = \frac{\tau_{xx}^0}{C_{33}a} \\ C_{ae}^\Delta &= \frac{\tau_{xx}^\Delta}{C_{33}a}, \quad g_1 = -\frac{b_2^*}{q_2}, \quad \theta_j = \tan^{-1}(\bar{x}/\lambda_j \bar{z}) \\ q_1 &= \frac{q_2}{b_2}, \quad q_2 = R_1 \omega_{32} - R_2 \omega_{31} \end{aligned}$$

である。

3. 分子動力学解析

本研究では、MD法を用いて表面応力および段差のある表面の変位、段差端部の表面原子に作用する力を求める。本研究では立方晶系材料として、Feを用いる。MD法において分子間ポテンシャルに Finnis-Sinclair が提案した FS ポテンシャル関数を用いる。Fe に対するポテンシャル関数を以下に示す⁽¹³⁾⁽¹⁴⁾。

$$E_{\text{tot}} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha \neq \beta} V(r^{\alpha\beta}) - A \sum_{\alpha} F(\rho^{\alpha}) \quad \dots\dots\dots (51)$$

ここで、 α, β は原子、 $F(\rho)$ は埋込み関数で $F(\rho^{\alpha}) = \sqrt{\rho^{\alpha}}$ であり、 ρ^{α} は電子密度で $\rho^{\alpha} = \sum_{\beta} \Phi(r^{\alpha\beta})$ で表される。 $V(r)$ および $\Phi(r)$ はそれぞれ原子間の中心斥力、

Fig. 4 A model for analysis varying surface stresses in a step manner

電子密度の寄与を表す。ここで、

$$V(r) = \begin{cases} (r-d)^2(c_0 + c_1 r + c_2 r^2) & (r \leq c) \\ 0 & (r > c) \end{cases} \quad \dots\dots\dots (52)$$

ここで、 $d=3.569\,745\,\text{\AA}$, $\beta=1.8$, $A=1.828\,905\,\text{eV}$, $c=3.4\,\text{\AA}$, $c_0=1.237\,114\,7$, $c_1=-0.359\,218\,5$, $c_2=-0.038\,560\,7$ である。

表面応力 $\tau_{a\beta}$ は表面エネルギー γ と次式のような関係がある⁽¹⁵⁾⁽¹⁶⁾。

$$\tau_{a\beta} = \gamma \delta_{a\beta} + \frac{\partial \gamma}{\partial \epsilon_{a\beta}} \quad \dots\dots\dots (53)$$

ここで、 $\epsilon_{a\beta}$ は表面ひずみである。セル内における表面エネルギーを U_c 、面積を A_c 、セル内の原子一つのエネルギーを u_i とおくと ($U_c = \sum u_i$)、 $\tau_{a\beta}$ は以下のように表せる⁽¹⁷⁾。

$$\tau_{a\beta} = \frac{1}{A_c} \sum_i \frac{\partial u_i}{\partial \epsilon_{a\beta}} \quad \dots\dots\dots (54)$$

ここで、 i は原子を表し、 α, β は方向を表す。式(54)を原子一つずつについて適用することは困難であることから、原子 i, k の位置の変化から表面応力を求めることができるよう式(54)を変形する。その式を次に示す。

$$\tau_{a\beta} = \frac{1}{A_c} \sum_i \sum_k (R_{k\beta} - R_{i\beta}) \frac{\partial u_i}{\partial R_{ka}} \quad \dots\dots\dots (55)$$

ここで、 $R_{k\beta}$ は原子 k の位置ベクトルの β 方向成分で

ある。本研究では、この関係を用いて表面応力を求める。

次に、単位長さ当たりの表面力について説明する。原子 i が系全体から受けるポテンシャルエネルギー E_{tot} を $R_{i\beta}$ で偏微分を行うと β 方向の力の総和を表す式が得られる。この式を用いて原子 j^{edge} から原子 k^{edge} までの力の総和をとり、その間の長さ L でそれを割ることにより表面力を求める。

$$f_\beta = \frac{1}{L} \sum_{i=j^{\text{edge}}}^{k^{\text{edge}}} \frac{\partial E_{\text{tot}}}{\partial R_{i\beta}} \quad \dots\dots\dots (56)$$

f_β は単位長さ当たりの表面力 [J/m] である。ここで、 $j^{\text{edge}}, k^{\text{edge}}$ は段差のエッジを形成する原子を表し、 β は方向成分を表す。

4. 解析結果および考察

4.1 解析モデル

表面応力を求める際に用いたモデルを図5(a)に、段差があるモデルを図5(b)に示す。図5(a)のモデルは、基本セルの総原子数 2880、 $a'=17.193\,\text{\AA}$, $b'=17.193\,\text{\AA}$, $c'=114.62\,\text{\AA}$ で、Fe は体心立方構造をしており、その格子間隔は $l_0=2.866\,5\,\text{\AA}$ である。無限体の解では x, y, z 方向に周期境界条件を、表面がある場合には [001] 面を表面とし x, y 方向に周期境界条件を適用した。また、図5(b)のモデルは表面に段差が1層(高さ $l_0/2$)あり、総原子数 2430、表面のある z 方向に20層の原子が配列し、 y 軸方向に周期境界条件を適用した。また、段差のある断面の y 方向変位を拘束し、それとは反対の断面 ($x=a$) は自由とした。

MD による緩和過程 10 000 step のうち、開始直後から 1 000 step までに系の温度を 1.0 K に上げ、その後 3 000 step まで温度を保持し、その後 8 000 step までに温度を 0 K まで下げて、その後 0 K に保持した。1 time step は 1.0 fs である。

(a) A model for surface stress analysis

$$a=114.62\,\text{\AA}, b=8.5965\,\text{\AA}, c=28.655\,\text{\AA}, d=28.655\,\text{\AA}, h=1.43275\,\text{\AA}$$

(b) A model for MD analysis with a step

Fig. 5 A model for analysis

Fig. 6 Configuration of atoms before and after relaxation

4・2 解析結果 表面応力は Ackaland ら⁽¹⁷⁾ と同様に緩和後のセル内のエネルギーを式(56)に従って求め、セルの表面積で除して得た。その結果、Fe の表面エネルギーは 2.0 J/m^2 、表面応力は 2.4 J/m^2 となった。

次に、段差がある場合の緩和前後の原子位置を図6に示す。緩和後段差の下にある原子が z 方向に変位

していることがわかる。段差端部 [図5(b)のE-F線上] の原子に作用している表面力を式(56)により求めた結果、 $F_x=2.94 \text{ N/m}$ 、 $F_z=0.56 \text{ N/m}$ が得られた。

次に、弾性論から得られた表面の変位とMDにより得られた表面にある原子の変位を比較する。始めに、図7および図8は段差端を $x=0$ として、表面応力を考慮したグリーン関数およびダイポールの式(42)、

Fig. 7 Displacement at several depth using the Green function

Fig. 8 Displacement at several depth using dipole theory

Fig. 9 A comparison of displacement in Green function and dipole theory

Fig. 10 A comparison of displacement in dipole theories

Fig. 11 Displacement in the z -direction calculated by MD

Fig. 12 Deformation due to the variation of surface stress

Fig. 13 A comparison of deformation near the step in MD, Green function and dipole theory

Fig. 14 A comparison of deformation near the step in MD, deformation added Green function and dipole theory to the deformation due to the variation of surface stress

(43) および式(46)から得られる z 方向変位を表面からの距離が異なる位置ごとに示したものである。グリーン関数から得られる変位は表面からの距離に対して大きな変化はない。一方、ダイポールによる変位は表面からの距離に対して大きく変化している。ダイポールによる変位について、Shilkrot ら⁽⁶⁾ と同じく段差上面に z の原点をとる。図9および図10は、それぞれ表面応力を考慮した場合と考慮しない場合のグリーン関数とダイポールによる z 方向の表面変位である。図9では A-E-B を含む平面を $z=0$ とした。このとき、グリーン関数に用いた集中荷重 F_x, F_z は MD から得られた値を用いた。また、ダイポールの大きさ D_x と D_z には、Shilkrot と Srolovitz らの解析結果⁽⁶⁾ を参考にして、表面応力と段差の高さとの積を用いた。図9, 10 から表面応力を考慮すると原点付近における変位が小さくなることがわかる。

図11は図5(b)における材料の厚さ c を変えて MD 法により得られた A-E-B 面における原子の z 方向変位である。なお、MD 解析の原子位置は緩和過程

の最後の1000段差間の平均値である。図11から材料の厚さが変化しても段差近傍の変位はあまり変化しないことがわかる。次に、式(50)から得られた表面応力がステップ状に変化した場合の表面の z 方向変位を図12に示す。図12は $\gamma_{\text{cs}}=1.5 \text{ J/m}^2$ としたときの結果である。図12から表面応力が変化すると段差が生じ、その角は表面応力の影響により丸くなることがわかる。最後に、表面応力を考慮した場合のグリーン関数およびダイポールによる z 方向表面変位と図5(b)の A-E-B 面の段差近傍の MD による原子の z 方向変位を図13に重ねて示す。ダイポールによる z 方向変位は $x=0$ の原点から離れると MD 解析の結果と合わなくなる。なお、図13でグリーン関数による z 方向表面変位は $z=0$ に対するものである。次に図12に示した表面応力が変化したことにより生じる z 方向変位をグリーン関数およびダイポールによる z 方向変位に加えると図14のようになる。図14からダイポールによる z 方向変位が MD 解析の結果に近い変位分布を与えることがわかる。表面応力はナノメートルサイズになると変位および応力に影響を与える。連続体力学の解析に表面応力を考慮することにより、ナノサイズ領域における応力解析が可能になる。

5. 結 論

本論文では、表面応力を考慮した境界条件を用いてグリーン関数とダイポールによる変位場の表示式を導出し、分子動力学法から得られた変位場と比較し、表面応力を考慮することによりナノメートル領域の変位場解析が可能であることを示した。

本研究を遂行するに当たり文部科学省科学研究費基盤研究(c)(2)(90143693)および(14550070)の支援をいただいた。ここに謝意を表す。

文 献

- (1) Ibach, H., *Surf. Sci. Rep.*, **29** (1997), 195-263.
- (2) Haiss, W., *Rep. Prog. Phys.*, **64** (2001), 591-648.
- (3) Marchenko, V. I. and Parshin, A. Ya., *Sov. Phys. JETP*, **52** (1980), 129-131.
- (4) Alerhand, O. L., Vanderbilt, D., Meade, R. D. and Joannopoulos, J. D., Spontaneous Formation of Stress Domains on Crystal Surfaces, *Phys. Rev. Lett.*, **61** (1988), 1973-1976.
- (5) Stewart, J., Pohland, O. and Gibson, J. M., Elastic-displacement field of an isolated surface step, *Phys. Rev.*, **B, 49**-19 (1994), 13848-13858.
- (6) Shilkrot, L. E. and Srolovitz, D. J., Elastic field of a surface step: Atomistic simulations and anisotropic elastic theory, *Phys. Rev.*, **B, 53**-16 (1996), 11120-11127.
- (7) Kouris, D., Peralta, A. and Sieradzki, K., Surface islands and near elastic interaction with adatoms, *Surf.*

- Sci., **445** (2000), 420-429.
- (8) Kukta, R. V., Kouris, D. and Sieradzki, K., Adatoms and their relation to surface stress, *J. Mech. Phys. Solids*, **51** (2003), 1243-1266.
- (9) Kukta, R. V., Liu, P. and Kouris, D., On the dependence of adatom interactions on strain, *J. Mech. Phys. Solids*, **51** (2003), 2149-2167.
- (10) 古口日出男, 機論, **58**-555, A (1992), 2132-2137.
- (11) Sneddon, I. N., *Fourier Transforms*, (1995), 404-410, Dover.
- (12) Koguchi, H., *Philosophical Magazine*, **83** (2003), 1205-1226.
- (13) Finnis, M. W. and Sinclair, J. E., *Phil. Mag. A*, **50**-1 (1984), 45-55.
- (14) 北川浩・ほか3名, 初心者のための分子動力学法, (1997), 57-63, 養賢堂.
- (15) Shutteleworth, R., *Proc. Phys. Soc., A*, **63** (1950), 444-457.
- (16) Ackland, G. J. and Finnis, M. W., *Philosophical Magazine*, **54**-2 (1986), 301-315.
-