「材料」(Journal of the Society of Materials Science, Japan), Vol. 59, No. 12, pp. 908-915, Dec. 2010
論　文

分子静力学法を用いた異種結晶材料接合角部の特異応力場解析と混合モード破壊じん性値の評価[†]

堀池弘一[*]　池田　徹[**]
松本龍介[**]　宮崎則幸[**]

Stress Singularity Analysis at an Interfacial Corner between Dissimilar Crystals and Evaluation of Mixed Modes Fracture Criteria Using Molecular Statics

by

Koichi Horiike [*], Toru Ikeda [**], Ryosuke Matsumoto [**] and Noriyuki Miyazaki [**]

The asymptotic solution of an interfacial corner between dissimilar crystals is expressed by the theory of anisotropic linear elasticity. However, it is not elucidated if the stress field obtained by the molecular analysis corresponds with the anisotropic linear elastic solution. We analyzed the stress fields around interfacial corners between dissimilar crystals using the molecular statics, and compared them with the asymptotic solutions. The stress intensity factor (SIF) is one of the basic fracture mechanics parameters, but there are few applications of the SIF to the fracture criteria of interfacial corners. We proposed a new definition of the SIFs of an interfacial corner between dissimilar anisotropic materials in our previous paper. In this study, the mixed mode fracture criteria of interfacial corners between dissimilar crystals modeled by the molecular statics were evaluated using the proposed SIFs.

Key words : Interfacial corner, Stress intensity factor, Stroh formalism, Molecular statics, Mixed mode

1　緒　　言

近年の電子デバイスの多層構造化に伴い，デバイス内には多くの界面が存在している．さらに電子デバイスやMEMSなどの微小構造物に使用される材料は複合材料や単結晶といった異方性材料が多い．この様な理由により，異種結晶材料接合角部の強度評価が重要となっている．池田らは異方性異種材界面き裂の応力拡大係数を求める数値解析手法を開発し，[1)～3)]これを用いて陽極接合部の破壊じん性値評価を行なった.[4)]一方，異種材界面角部ではHwu[5)]が，界面き裂や均質体き裂と互換性がある応力拡大係数を定義している．さらに野村ら[6)]はHwuが定義した応力拡大係数の定義を改良し，変形モードに定性的に対応する直感的に捉えやすい応力拡大係数を定義している．しかし，この応力拡大係数を用いて，実際に異種材界面角部の破壊じん性値を評価した例はない．そこで，本論文では，分子静力学法によって理想的な異種材料モデルを作成し，応力拡大係数を用いて混合モード破壊じん性値評価を行なった．以下にその内容を報告する．

2　解 析 理 論

2・1　特異性応力場

異種材界面角部の形状をFig. 1に示す．角部の特異点を原点として，特異点からの距離をr，界面に対する角度をθとすると，Williamsの固有値展開法より角部近傍の応力・変位場は次式のように示すことができる.[7)]

$$\sigma_{ij}^{M} = \sum_{k=1}^{N} C_k r^{\lambda_k - 1} f_{ij}^{kM}(\theta),\ u_i^{M} = \sum_{k=1}^{N} C_k r^{\lambda_k} g_i^{kM}(\theta) \qquad (1)$$

ここで，C_k (k = I, II, III) は応力集中の大きさを示すスカラー係数．また，λは特異性固有値，f_{ij}^{kM}とg_i^{kM} (M = Material A or B）は固有関数であり，材料定数と角部形状α，βから決定され，負荷条件には影響されない．

2・2　特異性固有値

異方性異種材界面角部の特異性固有値λを求める手法はHwuら[8)]によってStroh formalism[9)]を用いて求められている．式 $(2)_2$ はFig. 1の接合角部開口部表面が自由表面となる場合の境界条件をまとめたもので，$\mathbf{p}^*$が自明解を持たないためには式 $(2)_1$ を満たす必要がある．$\mathbf{E}$は6 × 6のマトリックスであり，式 (3)のように示すことができる．また，$\mathbf{E}_3$は3 × 3のサブマトリックスである．α，βはFig. 1に示す角度である．

$$\left|\mathbf{E}_3\right| = 0,\ \mathbf{E}_3\mathbf{p}^* = \mathbf{0} \qquad (2)$$

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} \mathbf{E}_1 & \mathbf{E}_2 \\ \mathbf{E}_3 & \mathbf{E}_4 \end{bmatrix} = \hat{\mathbf{N}}_A^{\lambda}(\alpha, 0)\hat{\mathbf{N}}_B^{\lambda}(0, -\beta) \qquad (3)$$

$\hat{\mathbf{N}}_M^{\lambda}$ ($M = A, B$)は6 × 6のマトリックスであり，次式のように示すことができる．

$$\hat{\mathbf{N}}^{\lambda}(\theta_1, \theta_2) = \begin{bmatrix} \mathbf{A} & \bar{\mathbf{A}} \\ \mathbf{B} & \bar{\mathbf{B}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \left\langle \hat{p}_j^{\lambda}(\theta_1)\hat{p}_j^{-\lambda}(\theta_2)\right\rangle & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \left\langle \bar{\hat{p}}_j^{\lambda}(\theta_1)\bar{\hat{p}}_j^{-\lambda}(\theta_2)\right\rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{B}^T & \mathbf{A}^T \\ \bar{\mathbf{B}}^T & \bar{\mathbf{A}}^T \end{bmatrix} \qquad (4)$$

$$\hat{p}_j(\theta) = \cos\theta + p_j \sin\theta \qquad (5)$$

ここで，$\mathbf{A}$，$\mathbf{B}$はStrohの固有ベクトルからなるマトリックスで，p_jはStrohの固有値である．$\overline{(\ )}$は共役を，< >

†　原稿受理　平成22年4月12日　Received Apr. 12, 2010　
＊　京都大学工学研究科　〒606-8501　京都市左京区吉田本町，Dept. Mech. Eng. and Sci., Kyoto Univ., Sakyo-ku, Kyoto, 606-8501
＊＊　正 会 員　京都大学工学研究科　〒606-8501　京都市左京区吉田本町，Dept. Mech. Eng. and Sci., Kyoto Univ, Sakyo-ku, Kyoto, 606-8501

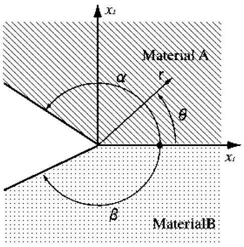

Fig. 1　Geometry of an interfacial corner.

は j = 1, 2, 3 の対角成分を持つマトリックスを示す．

式 (2)から得られる λ の値は無限に存在する．しかし異種材接合角部は特異点となり，角部近傍での応力場は特異項が支配的になるので，Re $(\lambda-1) < 0$ となる項のみを考える．また変位は特異点でも有限な値を持つことから Re $(\lambda) > 0$ となる．これらのことから，考慮すべき特異性固有値の範囲は $0 <$ Re $(\lambda) < 1$ となる．本手法では特異性固有値を以下の 6 通りの組み合わせに分けて取り扱った．

(A) 実数の値が 3 つ　$0 < \lambda_{\mathrm{I}} < \lambda_{\mathrm{II}} < \lambda_{\mathrm{III}} < 1$

(B) 実数の値が 2 つ　$0 < \lambda_{\mathrm{I}} < \lambda_{\mathrm{II}} < 1$

(C) 実数の値が 1 つ（3 重解）　$\lambda_{\mathrm{I}} = \lambda_{\mathrm{II}} = \lambda_{\mathrm{III}} = 0.5$

(D) 実数の値が 1 つ，共役な複素数が 2 つ

$\lambda_{\mathrm{I}} = \lambda + i\varepsilon$，$\lambda_{\mathrm{II}} = \lambda - i\varepsilon$，$\lambda_{\mathrm{III}} = \lambda'$ $(\lambda \le \lambda')$

$\lambda_{\mathrm{I}} = \lambda'$，$\lambda_{\mathrm{II}} = \lambda + i\varepsilon$，$\lambda_{\mathrm{III}} = \lambda - i\varepsilon$ $(\lambda' < \lambda)$

(E) 共役な複素数値が 2 つ　$\lambda_{\mathrm{I}} = \lambda + i\varepsilon$，$\lambda_{\mathrm{II}} = \lambda - i\varepsilon$

(F) 対数－指数の特異性固有値　特異性固有値が実数値のみ存在する領域と複素数が存在する領域の境界に現れるが，[10] 本手法では考慮しない．

特異性固有値に対応する固有関数は式 (6)に示す関係から得られる．$\mathbf{g}^{\mathrm{M}}$ は g_i^{kM} に対応するベクトルであり，$\mathbf{F}^{\mathrm{M}}$ は応力関数の固有関数で式 (7)のような関係があり，f_{ij}^{kM} と対応しているベクトルである．

$$\begin{Bmatrix} \mathbf{g}^M(\theta) \\ \mathbf{F}^M(\theta) \end{Bmatrix} = \hat{\mathbf{N}}_M^{\lambda}(\theta,0)\hat{\mathbf{N}}_B^{\lambda}(0,-\beta)\begin{Bmatrix} \mathbf{p}^* \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix} \tag{6}$$

$$\boldsymbol{\phi}^M = C_k r^{\lambda_k}\mathbf{F}^M(\theta),\ \sigma_{i2}^M = \phi_{i,1},\ \sigma_{i1}^M = -\phi_{i,2} \tag{7}$$

ただし，特異性固有値が重解または 3 重解の場合には，対応する固有ベクトル $\mathbf{p}^*$ は重解の場合は 2 つ，3 重解の場合は 3 つ考慮する必要がある．

2・3　応力拡大係数の定義

スカラー係数 C_k (k = I, II, III) は，破壊力学における変形モードとは全く関係が無いため，応力拡大係数として用いるのは不適切である．野村ら [6] は異種材接合角部の応力拡大係数として，Hwu ら [5] の理論を発展させることで式 (8)のように均質体中き裂と異種材界面き裂の定義と互換性がある応力拡大係数を定義した．

$$\mathbf{K} = \begin{Bmatrix} K_{\mathrm{II}} \\ K_{\mathrm{I}} \\ K_{\mathrm{III}} \end{Bmatrix} = \lim_{\substack{r\to 0\\ \theta=0}} \sqrt{2\pi r}\, l_k^{0.5-\mathrm{Re}[\lambda_1]}\boldsymbol{\Lambda}(\theta)\left\langle (r/l_k)^{0.5-\lambda_m}\right\rangle \boldsymbol{\Lambda}^{-1}(\theta)\begin{Bmatrix} \sigma_{12} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{32} \end{Bmatrix} \tag{8}$$

$$\boldsymbol{\Lambda}(\theta) = [\mathbf{F}^{\mathrm{I}}(\theta),\ \mathbf{F}^{\mathrm{II}}(\theta),\ \mathbf{F}^{\mathrm{III}}(\theta)] \tag{9}$$

ここで $\mathbf{F}$ は式 (6)で与えられ，λ_{I} は実部が最も小さな特異性固有値，l_k は代表長さ，< > は m = I, II, III の対角成分を持つマトリックスを示す．き裂で定義されている変形モードと定性的に対応しており，角部近傍の応力と変位の漸近解を再現できる．ただし，**2・2** 節で場合分けした (B)，(E)のように特異性固有値が 2 つの場合には，便宜的に $\mathbf{F}_{\mathrm{III}}(0) = [0\ 0\ 1]^T$，$\lambda_{\mathrm{III}} = 1$ とおく必要がある．さらに，式 (1), (8)より，次式が得られる．

$$\begin{Bmatrix} K_{\mathrm{II}} \\ K_{\mathrm{I}} \\ K_{\mathrm{III}} \end{Bmatrix} = \sqrt{2\pi}\left[C_{\mathrm{I}} l_k^{\mathrm{Im}[\lambda_1]i}\begin{Bmatrix} f_{12}^{\mathrm{I}}(0) \\ f_{22}^{\mathrm{I}}(0) \\ f_{32}^{\mathrm{I}}(0) \end{Bmatrix} + C_{\mathrm{II}} l_k^{\lambda_{\mathrm{II}}-\mathrm{Re}[\lambda_1]}\begin{Bmatrix} f_{12}^{\mathrm{II}}(0) \\ f_{22}^{\mathrm{II}}(0) \\ f_{32}^{\mathrm{II}}(0) \end{Bmatrix} + C_{\mathrm{III}} l_k^{\lambda_{\mathrm{III}}-\mathrm{Re}[\lambda_1]}\begin{Bmatrix} f_{12}^{\mathrm{III}}(0) \\ f_{22}^{\mathrm{III}}(0) \\ f_{32}^{\mathrm{III}}(0) \end{Bmatrix}\right] \tag{10}$$

また界面上の応力は次式のようになる．

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{12} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{32} \end{Bmatrix} = \frac{l_k^{\mathrm{Re}[\lambda_1]-1}}{\sqrt{2\pi}}\boldsymbol{\Lambda}(0)\left\langle (r/l_k)^{\lambda_i-1}\right\rangle \boldsymbol{\Lambda}^{-1}(0)\begin{Bmatrix} K_{\mathrm{II}} \\ K_{\mathrm{I}} \\ K_{\mathrm{III}} \end{Bmatrix} \tag{11}$$

異種材界面き裂の場合には，特異性固有値は，$0.5 \pm i\varepsilon$, 0.5 の 3 つとなり，このとき式 (8)は Hwu によって提案された異種材界面き裂の応力拡大係数の定義式になる．[11]

$$\mathbf{K} = \begin{Bmatrix} K_{\mathrm{II}} \\ K_{\mathrm{I}} \\ K_{\mathrm{III}} \end{Bmatrix} = \lim_{\substack{r\to 0\\ \theta=0}} \sqrt{2\pi r}\boldsymbol{\Lambda}(\theta)\left\langle (r/l_k)^{-i\varepsilon_m}\right\rangle \boldsymbol{\Lambda}^{-1}(\theta)\begin{Bmatrix} \sigma_{12} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{32} \end{Bmatrix} \tag{12}$$

$$\varepsilon_1 = \varepsilon,\ \varepsilon_2 = -\varepsilon,\ \varepsilon_3 = 0$$

ここで，ε は，異方性異種材界面き裂のバイマテリアル係数である．均質体中のき裂では特異性固有値は 0.5 になり，$\varepsilon = 0$ となる．

3　解　析　方　法

3・1　分子静力学法概略

分子静力学法 (MS 法)は系内に含まれる原子を原子間ポテンシャルによって相互作用する質点に近似し，全原子に対し系の全ポテンシャルを空間最適化する方向に移動させることで系の物性や変形を解析する手法である．本解析では，次式の Lennerd-Jones ポテンシャルを用いた．

$$\phi_{\alpha\beta}(r) = 4\varepsilon_{\alpha\beta}\left[\left(\frac{\sigma_{\alpha\beta}}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{\alpha\beta}}{r}\right)^{6}\right] \tag{13}$$

ここで，r は原子 α と原子 β の距離，$\sigma_{\alpha\beta}$ と $\varepsilon_{\alpha\beta}$ は，それぞれ原子 α と原子 β の原子間距離と結合エネルギーを決定するパラメータである．Fig. 2 に示すようなモデルを切り出すのに十分大きな平板モデルを作成し，緩和計算を行ない，残留応力が低減するようにモデルの大きさを調整した．このとき，座標軸を x，y，z 軸方向がそれぞれ [1 0 0]，[0 1 0]，[0 0 1] になるようにとった．次に，この平板モデルから半径約 10nm の円筒状のモデルを切り出した．その後，モデル中心部から角部角度の範囲内に存在する原子を取り除き再度緩和計算を行なった．原子数は約 2,000 〜 3,000 原子の疑似 3 次元モデルであり，z 軸方向に周期境界条件を適用した．モデル外周部から約 0.8nm の距離以内にある境界原子に応力拡大係数を少しずつ増分しながら，それに対応した境界条件（強制変位）を与えた．その後，外周部の境界原子以外の全原子に対して緩和計算を行なった．緩和後，異方性弾性論より求められる応力場の適用限界を調べるために，分子静力学より求められた原子応力と弾性論より求められた角部近傍の応力分布を比較検討した．原子応力は次式の定義により求めた．

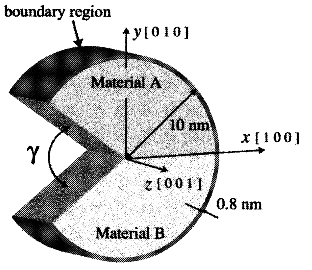

Fig. 2　Analyzed model.

$$\sigma_{ij}^{\alpha} = \frac{1}{2V_{\alpha}} \sum_{\beta=1,\beta\neq\alpha}^{N} \left\{\phi'(r^{\alpha\beta})\right\} \frac{r_i^{\alpha\beta} r_j^{\alpha\beta}}{r^{\alpha\beta}} \tag{14}$$

ここで，σ_{ij}^{α} は原子 α の応力，V_α は原子の占める体積，$r^{\alpha\beta}$ は原子 α，β 間の距離を示す．また，角部近傍の結晶構造を局所構造解析（CNA）[12]で判別し，結晶の乱れが生じた時の応力拡大係数を破壊じん性値として採用した．この手順を結晶構造に乱れが生じるまで繰り返し行なった．また，式 (8) より応力拡大係数を決定するには代表長さ (l_k) をある値に固定する必要があるが，本解析では 1nm と 0.1nm を用いて応力拡大係数を決定した．

4　解　析　結　果

4・1　格子定数が等しい異種材モデル

異種材が接合された，両材料の格子定数が等しいモデルの解析を行なった．まず，特異性固有値を算出した．横軸に角部の開き角度 γ を，縦軸に特異性固有値 $1-\lambda$ をプロットしたものを Fig. 3 に示す．$180° \geq \gamma > 102°$ では **2・2** 節の場合分けの (B) に相当する．$102° \geq \gamma > 21$ では (A) に相当し，$21° \geq \gamma > 0°$ では (D) に相当する．最後に $\gamma = 0°$ では特性固有値は $0.5 \pm i\varepsilon$ となり (E) のき裂問題に相当する．また，Tables. 1, 2, 3 に本解析で用いた式 (13) のパラメータ，特異性固有値，弾性定数をそれぞれ示す．界面で破壊が生じるように異種材料間のポテンシャルパラメータを小さくした．

まず，異方性弾性論による応力場解析の適用限界を考察するため，開き角度が 40° のモデルに C_{I}=1.5 (GPa·mm$^{0.4945}$)，C_{II}=1.5 (GPa·mm$^{0.4945}$)，き裂のモデルには $C_{\mathrm{I}} = 0.13 + 0.65i$ (GPa·mm$^{0.4980-0.0013i}$)，$C_{\mathrm{II}} = 0.13-0.65i$ (GPa·mm$^{0.4980-0.0013i}$) に対応する強制変位を与え，角部近傍の応力分布を比較検討した．Figs. 20 ～ 23 に緩和後の角部近傍での応力分布を示す．分子静力学法による解析では，異種材料が接合された界面で応力値が滑らかに変化していないが，その他の領域では両者の応力分布はよく一致していた．Figs. 4 ～ 7 に界面上での応力値を示す．角部近傍から

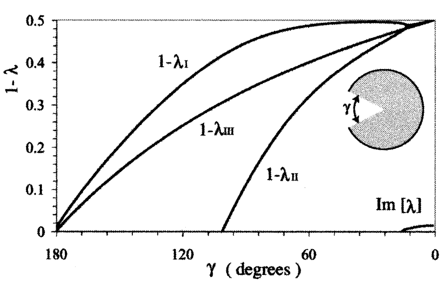

Fig. 3　Singular order for an interfacial corner between bimaterial (Equal lattice constants model).

Table 1　Parameters of Lennard-Jones potential (Equal lattice constants model).

	$\varepsilon_{\alpha\beta}$ (eV)	$\sigma_{\alpha\beta}$ (nm)	r_0 (nm)
Material A	0.2809	0.3000	0.4646
Material B	0.3745	0.3000	0.4646
Interface	0.1873	0.3075	

$\varepsilon_{\alpha\beta}$, $\sigma_{\alpha\beta}$: parameters in Eq. (13), r_0: Lattice constant

Table 2　Eigenvalues (Equal lattice constants model).

γ	λ_{I}	λ_{II}
40°	0.5055	0.5980
Crack (1°)	$0.5020+0.0013i$	$0.5020-0.013i$

Table 3　Elastic stiffness of Material A and B (Equal lattice constants model).

Material A	$C_{11}= C_{22}= C_{33}=$ 152.5(GPa) $C_{12}= C_{13}= C_{23}= C_{44}= C_{55}= C_{66}=$86.6(GPa)
Material B	$C_{11}= C_{22}= C_{33}=$ 203.4(GPa) $C_{12}= C_{13}= C_{23}= C_{44}= C_{55}= C_{66}=$115.5(GPa)

2nm より遠方では両者の応力値が一致していることから，その範囲では異方性弾性論による漸近解で応力場を表現できていることがわかった．ただし，一部の分布では，角部先端から遠方の 9nm より遠い部分で分子静力学より求めた原子応力と異方性弾性論による漸近解にずれが見られる．これは，変位境界条件を与えた周囲境界の影響が現れたものと考えられ，さらに大きなモデルを用いて解析を行えばより遠くまで両者は一致するものと考えられる．

また，Fig. 8 に，角部中心で結晶構造の乱れが生じた時の応力拡大係数を用いてプロットした破壊じん性値を

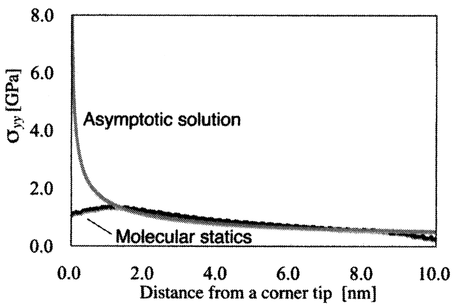

Fig. 4　Stress distribution (σ_{yy}) along $\theta = 0°$. (Equal lattice constant model, $\gamma = 40°$)

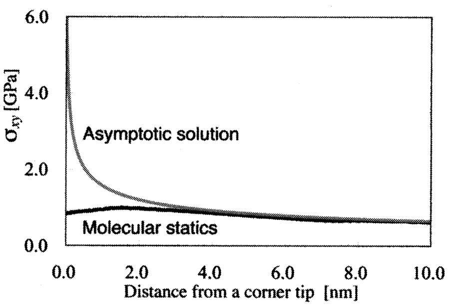

Fig. 5　Stress distribution (σ_{xy}) along $\theta = 0°$. (Equal lattice constant model, $\gamma = 40°$)

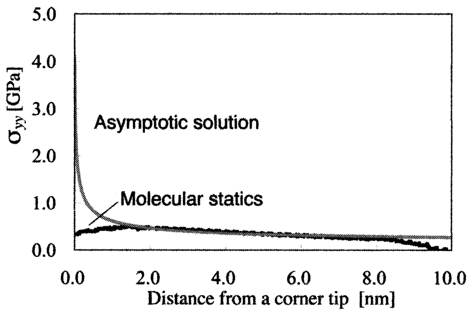

Fig. 6 Stress distribution (σ_{yy}) along $\theta = 0°$.
(Equal lattice constant, $\gamma = 1°$)

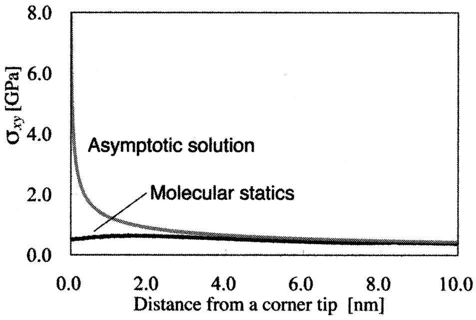

Fig. 7 Stress distribution (σ_{xy}) along $\theta = 0°$.
(Equal lattice constant, $\gamma = 1°$)

示す．これらの混合モード破壊じん性値は，均質体中のき裂の混合モード破壊じん性値に類似した単純な形状を示している．このことより，単純引張，単純せん断変形も含めた混合モード破壊じん性値の分布を式 (8)で定義した応力拡大係数で表現することは妥当であると考えられる．また，界面き裂では破壊じん性値が楕円形の分布となった．

4・2 格子定数が異なる異種材モデル 1

Table. 4 に示すように両材料の格子定数が 5% 異なる異種材接合角部の解析を行なった．z 方向に周期境界条件を適用するために，材料 A を 20 層，材料 B を 21 層 z 方向に初期配置した．まず，特異性固有値を算出した．横軸に角部の開き角度 γ を，縦軸に特性固有値 $1\text{–}\lambda$ をプロットしたものを Fig. 9 に示す．$180° \geq \gamma > 104°$ では **2・2** 節の場合分けの(B)に相当する．$104° \geq \gamma > 10°$ では(A)に相当し，$10° \geq \gamma > 0°$ では(D)に相当する．$\gamma = 0°$ では特性固有値は $0.5 \pm i\varepsilon$ となり (E)のき裂問題に相当する．また，Tables. 4, 5, 6 に本解析で用いた式 (13)のパラメータ，特異性固有値，弾性定数をそれぞれ示す．

異方性弾性論による応力場解析の適用限界を考察するため，開き角度が 40° のモデルに $C_{\mathrm{I}} = 2.0$ (GPa·mm$^{0.4965}$)，$C_{\mathrm{II}} = 2.0$ (GPa·mm$^{0.4965}$)，き裂のモデルには $C_{\mathrm{I}} = 0.2$ (GPa·mm$^{0.4998-0.0007i}$)，$C_{\mathrm{II}} = 0.2$ (GPa·mm$^{0.4998-0.0007i}$)として強制変位を与え，角部近傍の応力分布を比較検討した．Fig. 24 に示すように，格子定数が異なるため角部近傍に初期残留応力が発生したため，分子静力学法では解析後の応力値から初期残留応力を除去した応力分布を解析結果として用いている．Figs. 25 ～ 28 に緩和後の角部近傍での応力分布を示す．格子定数が異なる異種材接合モデルのため，ミスフィット転位が発生した．そのため，

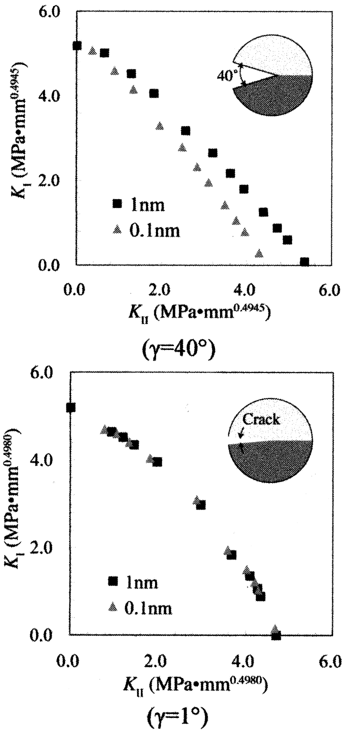

Fig. 8 Mixed mode fracture toughnesses of the corners between dissimilar anisotropic materials.
(Equal lattice constant model)

Table 4 Parameters of Lennard-Jones potential.
(5% different lattice constants model)

	$\varepsilon_{\alpha\beta}$ (eV)	$\sigma_{\alpha\beta}$ (nm)	r_0 (nm)
Material A	0.3745	0.3150	0.4878
Material B	0.3745	0.3000	0.4646
Interface	0.1873	0.3075	

Table 5 Eigenvalues. (5% different lattice constants model)

γ	λ_{I}	λ_{II}
40°	0.5035	0.6000
Crack (1°)	0.5002+0.0070i	0.5002–0.0070i

Table 6 Elastic stiffness of Material A and B.
(5% different lattice constants model)

Material A	$C_{11}= C_{22}= C_{33}=$ 175.7(GPa)
	$C_{12}= C_{13}= C_{23}= C_{44}= C_{55}= C_{66}=$99.7(GPa)
Material B	$C_{11}= C_{22}= C_{33}=$ 203.4(GPa)
	$C_{12}= C_{13}= C_{23}= C_{44}= C_{55}= C_{66}=$115.5(GPa)

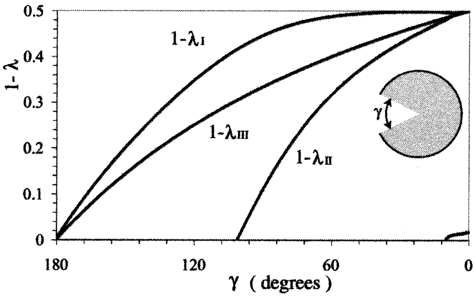

Fig. 9 Singular order for an interfacial corner between bimaterial. (5% different lattice constants model)

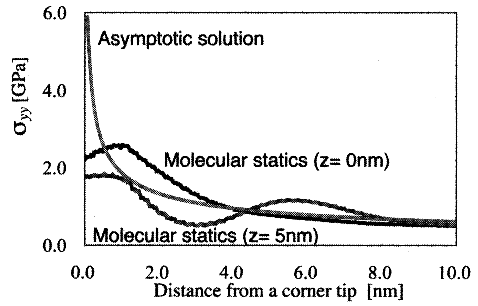

Fig. 10 Stress distribution (σ_{yy}) along $\theta = 0°$. (5% different lattice constants model, $\gamma = 40°$)

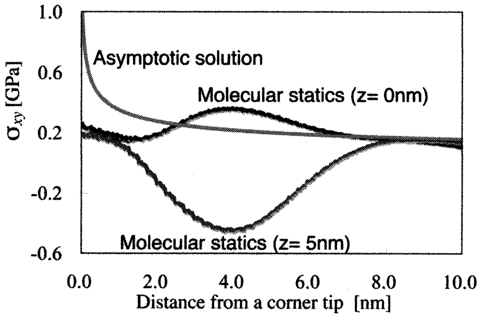

Fig. 11 Stress distribution (σ_{xy}) along $\theta = 0°$. (5% different lattice constants model, $\gamma = 40°$)

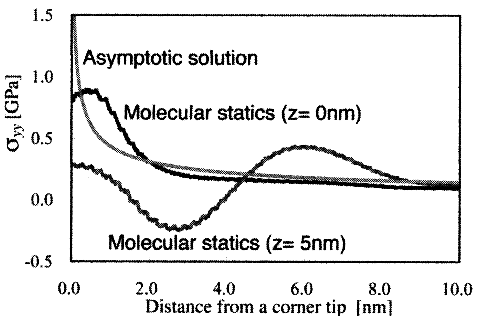

Fig. 12 Stress distribution (σ_{yy}) along $\theta = 0°$. (5% different lattice constants model, $\gamma = 1°$)

分子静力学法による解析結果では，切り出す z 方向の位置によって応力分布が異なっていた．また，Figs. 10 ～ 13 に界面上での応力値を示しているが，異方性弾性論による漸近解と分子静力学法による応力値は全く一致していないことわかった．これは，ミスフィット転位によって発生する応力の影響を異方性弾性論では考慮することはできないためである．このことから，ミスフィット転位が存在する異種材モデルの場合，異方性弾性論による漸近解で応力分布を表現することはできないことがわかる．よって，ミスフィット転位が存在するモデルでは，異方性弾性論による応力拡大係数を用いた混合モード破壊じん性値評価は困難であると考えられる．

4・3　格子定数が異なる異種材モデル 2

Table 7 に示すように両材料の格子定数が 2% 異なる異種材接合角部の解析を行なった．ただし，本解析モデルでは界面でミスフィット転位を生じさせないように両材料それぞれの格子定数では原子を配置せず，両材料の中間値の格子定数で初期配置した．まず，特異性固有値を算

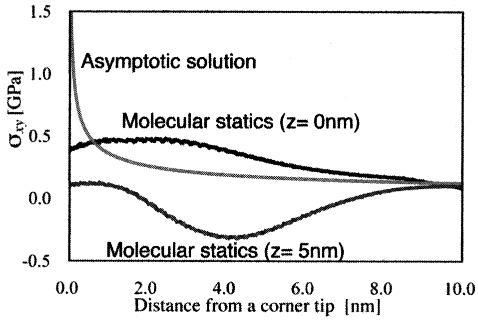

Fig. 13 Stress distribution (σ_{xy}) along $\theta = 0°$. (5% different lattice constants model, $\gamma = 1°$)

出した．横軸に角部の開き角度 γ を，縦軸に特性固有値 $1-\lambda$ をプロットしたものを Fig. 14 に示す．$180° \geq \gamma > 101°$ では **2・2** 節の場合分けの (B) に相当する．$101° \geq \gamma > 0.2°$ では (A)に相当し，$0.2° \geq \gamma > 0°$ では (D)に相当する．$\gamma = 0°$ では特性固有値は $0.5 \pm i\varepsilon$ となり (E) のき裂問題に相当する．また，Tables. 7, 8, 9 に本解析で用いた式 (13) のパラメータ，特異性固有値，弾性定数を示す．格子定数が等しい異種材モデルと同様，本解析でも界面での破壊評価が目的のため，界面ではく離が進展するようにポテンシャルパラメータを他より小さくした．

開き角度が 40° のモデルには $C_{\mathrm{I}} = 1.9$ (GPa·mm$^{0.4970}$)，$C_{\mathrm{II}} = 7.2$ (GPa·mm$^{0.4970}$)，き裂のモデルには $C_{\mathrm{I}} = 3.1$ (GPa·mm$^{0.4988}$)，$C_{\mathrm{II}} = 3.3$ (GPa·mm$^{0.4988}$)として強制変位を与えた．Fig. 29 に示すように，格子定数が異なるためひずみが発生し角部近傍に初期残留応力が発生した．しかし，本異種材モデルでは両材料の平均の格子定数で初期配置しているため，ミスフィット転位によって発生した残留応力はない．また，接合角部とは反対側の端部にも残留応力が発生しているが，Fig. 29 から角部近傍の応力場には影響がないと判断した．分子静力学法による解析結果では解析後の応力値から初期残留応力を除去することで，強制変位を与えることによって発生した応力値を示した．Figs. 30 ～ 33 に緩和後の角部近傍での応力分布を示す．格子定数が等しいモデル同様，分子静

Table 7 Parameters of Lennard-Jones potential. (2% different lattice constants model)

	$\varepsilon_{\alpha\beta}$ (eV)	$\sigma_{\alpha\beta}$ (nm)	r_0 (nm)
Material A	0.3745	0.3060	0.4739
Material B	0.3745	0.3000	0.4646
Interface	0.1873	0.3030	

Table 8 Eigenvalues. (2% different lattice constants model)

γ	λ_{I}	λ_{II}
40°	0.5030	0.5625
Crack (1°)	0.5012	0.5069

Table 9 Elastic stiffness of Material A and B. (2% different lattice constants model)

Material A	$C_{11}= C_{22}= C_{33}=$ 191.6(GPa) $C_{12}= C_{13}= C_{23}= C_{44}= C_{55}= C_{66}=$108.8(GPa)
Material B	$C_{11}= C_{22}= C_{33}=$ 203.4(GPa) $C_{12}= C_{13}= C_{23}= C_{44}= C_{55}= C_{66}=$115.5(GPa)

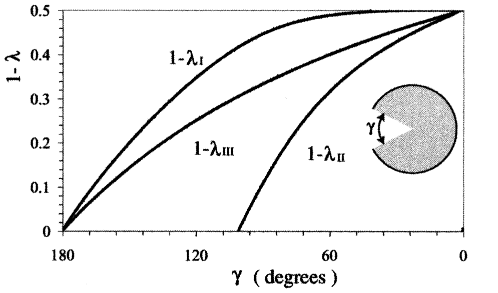

Fig. 14 Singular order for an interfacial corner between bimaterial. (2% different lattice constants model)

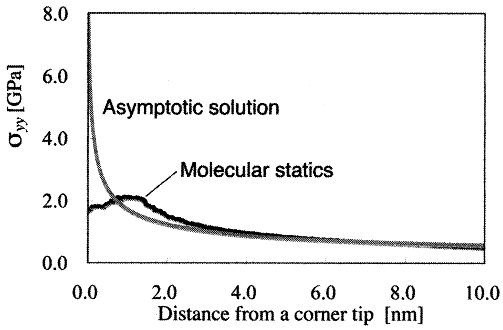

Fig. 15 Stress distribution (σ_{yy}) along $\theta = 0^{\circ}$. (2% different lattice constants model, $\gamma = 40^{\circ}$)

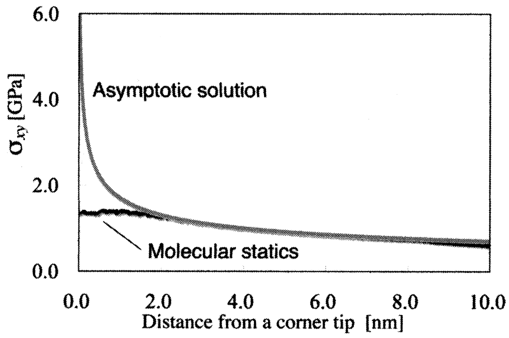

Fig. 16 Stress distribution (σ_{xy}) along $\theta = 0^{\circ}$. (2% different lattice constants model, $\gamma = 40^{\circ}$)

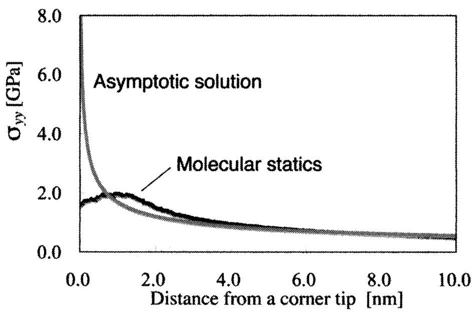

Fig. 17 Stress distribution (σ_{yy}) along $\theta = 0^{\circ}$. (2% different lattice constants model, $\gamma = 1^{\circ}$)

力学法による解析では異種材料が接合された界面で応力が滑らかに変化していないが，それ以外の領域では両者の応力分布がよく一致していた．Figs. 15 ～ 18 に界面上での応力値を示す．角部近傍から 2nm より遠方では両者の応力値が一致していることから，その範囲では異方性弾性論による漸近解で精度良く応力場を表現できていることが分かった．

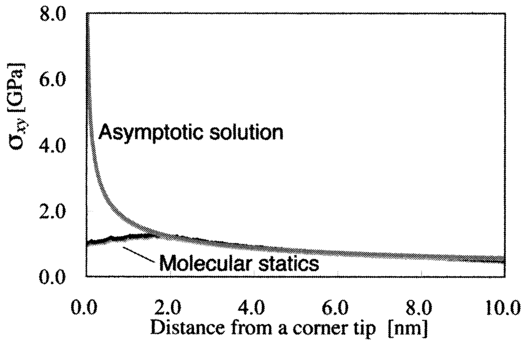

Fig. 18 Stress distribution (σ_{xy}) along $\theta = 0^{\circ}$. (2% different lattice constants model, $\gamma = 1^{\circ}$)

また，Fig. 19 に角部先端で結晶構造の乱れが生じた時の応力拡大係数を破壊じん性値としてプロットした図を示す．破壊じん性値の分布は初期残留応力の影響を受けた分布となっているが，格子定数が等しい異種材モデルと同様，式 (8)で定義した応力拡大係数を用いて単純引張，単純せん断変形も含めた混合モード破壊じん性値を評価できることがわかった．

5 結　　言

分子静力学法を用いて異方性弾性論による応力場解析の適用限界の検証を行なった．その結果，Lennerd-Jones ポテンシャルを用いた解析において，異種材界面にミスフィット転位が存在しない場合，角部から 2nm（数原子分）より遠方の領域では異方性弾性論を用いて精度良く応力分布が表現できていることを確認した．

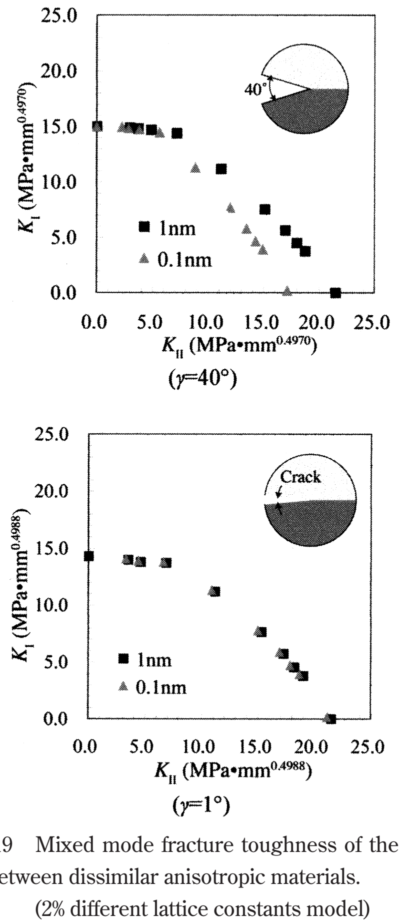

Fig. 19 Mixed mode fracture toughness of the crack between dissimilar anisotropic materials. (2% different lattice constants model)

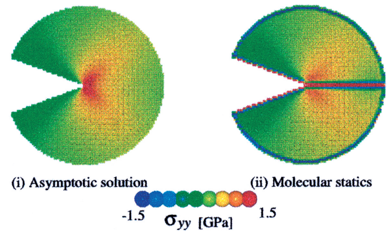

Fig. 20　Stress distribution (σ_{yy}) near the corner. (Equal lattice constant model, $\gamma = 40°$)

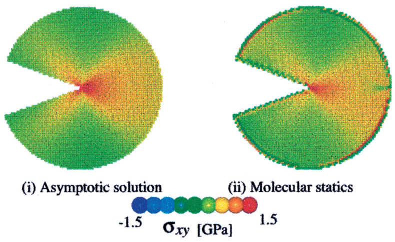

Fig. 21　Stress distribution (σ_{xy}) near the corner. (Equal lattice constant model, $\gamma = 40°$)

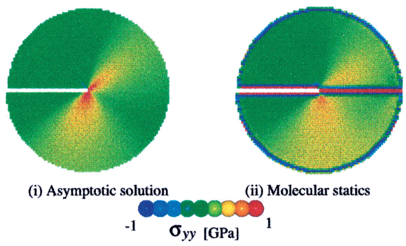

Fig. 22　Stress distribution (σ_{yy}) near the crack. (Equal lattice constant, $\gamma = 1°$)

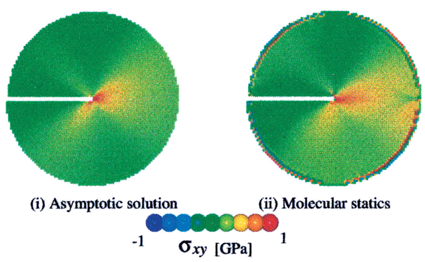

Fig. 23　Stress distribution (σ_{xy}) near the crack. (Equal lattice constant, $\gamma = 1°$).

一方，角部から 2nm より近い領域では原子自身の大きさの影響や境界表面の影響を考慮する必要があるため，異方性弾性論で応力分布を表現することはできない．

また，理想的な異種結晶材料接合角部モデルを作成し以前の研究で定義した界面角部の応力拡大係数にしたがう境界条件（強制変位）をモデルに加えることで，異種結晶材料接合角部の混合モード破壊じん性値の評価を行なった．その結果，以前の研究[6]で定義した式 (8)の応力拡大係数を用いて混合モード下の破壊じん性値の評価ができることが確認でき，応力拡大係数が異種結晶材料接合角部の破壊強度を知る上で有効であること示した．

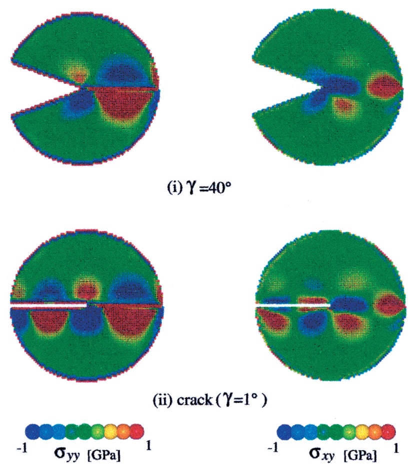

Fig. 24　Residual stress distribution. (5% different lattice constants model, $\gamma = 40°$)

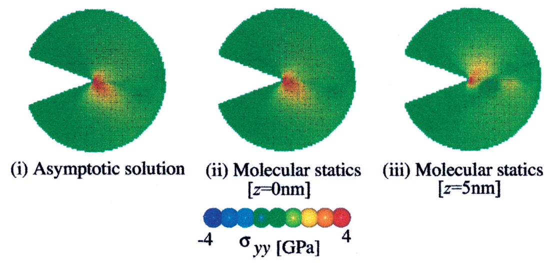

Fig. 25　Stress distribution (σ_{yy}) near the corner. (5% different lattice constants model, $\gamma = 40°$)

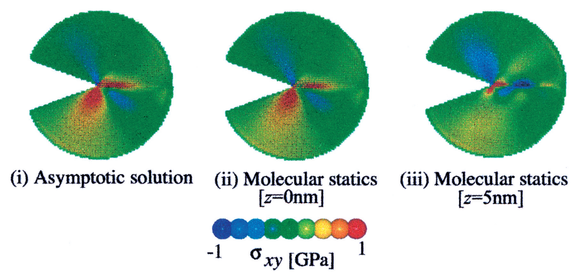

Fig. 26　Stress distribution (σ_{xy}) near the corner. (5% different lattice constants model, $\gamma = 40°$)

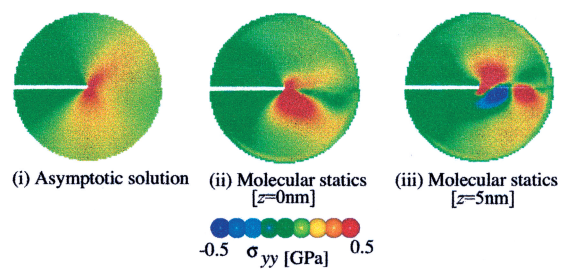

Fig. 27　Stress distribution (σ_{yy}) near the crack. (5% different lattice constants model, $\gamma = 1°$)

しかし，異種材界面にミスフィット転位が発生する場合には，異方性弾性論に基づいた応力拡大係数による評価は困難であり，この場合の強度評価モデルの構築は今後の課題である．

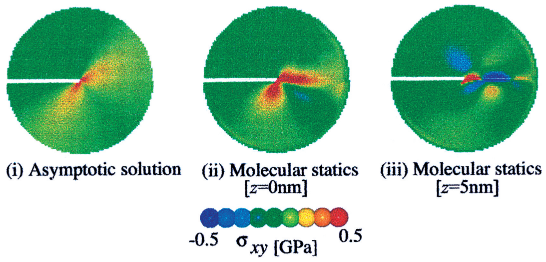

Fig. 28 Stress distribution (σ_{xy}) near the crack.
(5% different lattice constants model, $\gamma = 1^{\circ}$)

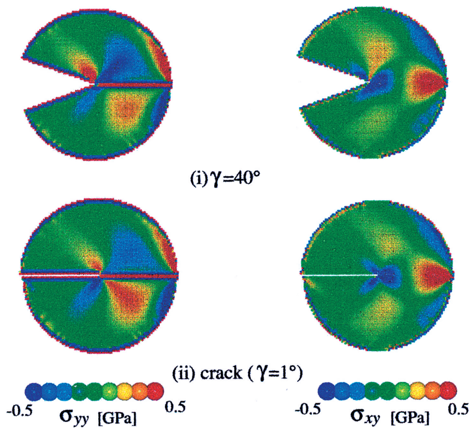

Fig. 29 Residual stress distribution.
(2% different lattice constants model)

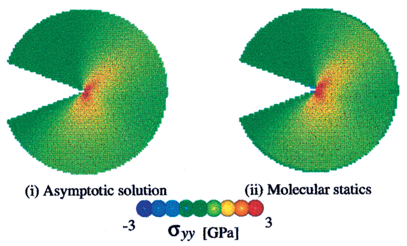

Fig. 30 Stress distribution (σ_{yy}) near the corner.
(2% different lattice constants model, $\gamma = 40^{\circ}$)

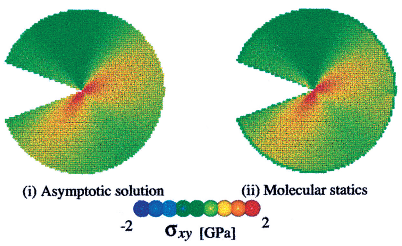

Fig. 31 Stress distribution (σ_{xy}) near the corner.
(2% different lattice constants model, $\gamma = 40^{\circ}$)

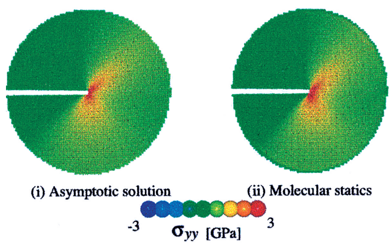

Fig. 32 Stress distribution (σ_{yy}) near the crack.
(2% different lattice constants model, $\gamma = 1^{\circ}$)

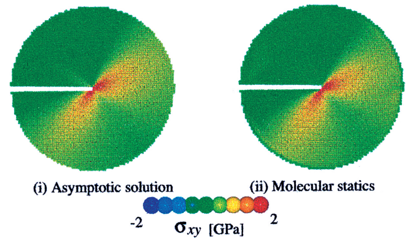

Fig. 33 Stress distribution (σ_{xy}) near the crack.
(2% different lattice constants model, $\gamma = 1^{\circ}$)

参 考 文 献

1) K. Yamanaga, T. Ikeda and N. Miyazaki, "Stress Intensity Factor Analysis of a Crack on an Interface between Dissimilar Anisotropic Materials", Transaction of the Japan Society of Mechanical Engineers (Series A), Vol.69, No.687, pp.1531-1538 (2003).

2) M. Nagai, T. Ikeda and N. Miyazaki, "Stress intensity factor analysis of a three-dimensional interface crack between dissimilar anisotropic materials", Engineering Fracture Mechanics, Vol.74, Issue 16, pp.2481-2497 (2007).

3) M. Nagai, T. Ikeda and N. Miyazaki, "Stress Intensity Factor Analysis of an Interface Crack between Dissimilar Anisotropic Materials under Thermal Stress Using the Finite Element Analysis", International Journal of Fracture, Vol.146, pp.233-248 (2007).

4) Y. Nomura, M. Nagai, T. Ikeda and N. Miyazaki, "Evaluation of the Interfacial Fracture Toughness of Anodic Bonds", Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers (Series A), Vol.73, No.735, pp.1266-1272 (2007).

5) C. Hwu and T. L. Kuo, "A unified definition for stress intensity factors of interface corners and cracks", International Journal of Solid and Structures, Vol.43, pp.6340-6359 (2007).

6) Y. Nomura, T. Ikeda and N. Miyazaki, "Stress Singularity Analysis at an Interfacial Corner between Anisotropic Bimaterials under Thermal Stress", Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers (Series A), Vol.74, No.737, pp.37-44 (2008).

7) W. C. Carpenter, "Calculation of fracture mechanics parameters for a general corner", International Journal of fracture, Vol.24, pp.45-58 (1984).

8) C. Hwu, M. Omiya and K. Kishimoto, "A Key Matrix for the Stress Singularity of the Anisotropic Elastic Composite Wedge", JSME international jounarl, Series A, Vol.46, No.1, pp.40-50 (2003).

9) T. C. T. Ting, "Anisotropic Elasticity: Theory and Applications", Oxford University Press, pp.134-263 (1996).

10) J. P. Dempsey, "Power-logarithmic stress singularities at bi-material corners and interface cracks", Journal adhesion Science and Technology, Vol.9, pp.253-265 (1995).

11) C. Hwu, "Explicit solutions for collinear interface crack problems", International Journal of Solids and Structures, Vol.30, pp.301-312 (1993).

12) J. D. Honeycutt and H. C. Anderson, "Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones cluster", Journal of Physical Chemistry, Vol.91, pp.4950-4963 (1987).