

平成 21 年 5 月 27 日現在

研究種目：基盤研究(S)

研究期間：2004～2008

課題番号：16106002

研究課題名（和文） 低次元微小構造体の界面破壊

研究課題名（英文） Interface Strength of Low-Dimensional Small Components

研究代表者

北村 隆行 (KITAMURA TAKAYUKI)

京都大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号：20169882

研究成果の概要：ナノスケールの低次元構造体の最弱部である界面の強度評価実験方法を開発し、その場観察とマルチスケールの力学評価を行った。また、原子レベルの構造不安定性解析を行った。その結果、従来の破壊力学（連続系）概念の適用下限は数 nm 程度であることを明らかにするとともに、それ以下の離散系支配領域での破壊基準を検討した。

交付額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2004年度	22,200,000	6,660,000	28,860,000
2005年度	34,900,000	10,470,000	45,370,000
2006年度	8,200,000	2,460,000	10,660,000
2007年度	11,000,000	3,300,000	14,300,000
2008年度	8,200,000	2,460,000	10,660,000
総計	84,500,000	25,350,000	109,850,000

研究分野：材料強度学

科研費の分科・細目：機械工学 機械材料・材料力学

キーワード：破壊、界面、低次元構造体、ナノスケール、連続系、離散系、き裂

1. 研究開始当初の背景

バルク材の界面強度特性は、連続体力学に基づく解析・評価が有効である。しかし、材料の寸法がナノスケールになると応力拡大領域が原子スケールにまで縮小することがあるため、その妥当性に疑義が生じる。さらに、破壊力学は局所に十分な数の原子が存在することを仮定しており、原子配列の離散性を考慮していない。一方、ナノスケール構造体については、破壊を精密に力学評価できる実験技術は存在しなかった。

2. 研究の目的

(1) ナノスケールの低次元微小構造体の界面

破壊実験観察方法を確立すること。

(2) 界面破壊実験と力学解析を行って、ナノスケール構造体界面の破壊力学の適用性を明らかにすること。とくに、その適用限界を解明すること。

(3) 原子レベルの力学的構造不安定性を明らかにすること。

(4) 破壊力学の適用域外の界面破壊に関する力学クライテリオンを明らかにすること。

3. 研究の方法

(1) 微小負荷装置を透過型電子顕微鏡に組み込んだナノ構造体界面破壊実験装置を作製し、試験片製作法等を含む実験方法を確立し

- て、詳細な実験観察を行う。
- (2) 破壊力学の適用性とその適用下限について連続体力学解析を行う。
- (3) マルチスケール解析により、原子構造体の構造不安定性を解析する。
- (4) 実験と解析を総合して、ナノレベルの界面破壊クライテリオンについて検討する。

4. 研究成果

(1) 界面破壊実験法の確立

多層膜（シリコン Si/銅 Cu (200nm 厚) / 窒化ケイ素 Si₃N₄) から自作したカンチレバー試験片を用いて電子顕微鏡内での負荷実験を行い、その場観察によって Si/Cu 界面端（試験片上端と界面の会合部）からのき裂発生を明確に同定した（図 1）。ナノ構造体に対して十分な精度で力学評価が可能な実験法を確立した。

(2) 破壊力学の適用性と適用下限

破壊過程のビデオ画像を記録するとともに、負荷荷重をモニターして、界面き裂発生時の臨界荷重を求めた。これより、臨界応力場解析によって界面端近傍の応力場を評価した（図 2）。1 段カンチレバー試験片（印）の結果より、30nm の応力拡大領域については連続体力学に基づく破壊クライテリオンが適用できることが明らかになった。一方、応力拡大領域を縮小した 2 段カンチレバー試験片（図 2 印：応力拡大領域は数 nm）の結果は、それが適用できない。すなわち、破壊力学の適用下限が数 nmであることを示している。

(3) 原子レベルの構造不安定性

図 3 は、臨界における不安定に寄与する自由度を示したものであり、き裂先端極近傍は各原子の自由度が全てき裂先端の不安定性に關与している（離散性が機能している領域）のに対して、それから離れた部分は三角形要素で示される疎視化（自由度の削減）が可能な領域（連続体近似の成立する領域）を示している。この場合の原子領域（離散性領域）は約 4nm であり、実験による破壊力学の

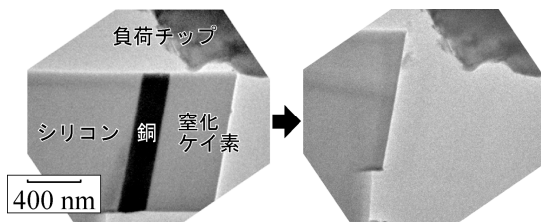


図 1 界面端からの破壊過程のその場観察像

限界領域寸法と対応し、連続性の適用下限は一致している。

(4) 破壊力学適用下限以下の破壊基準

(2)の実験および(3)の数値解析結果の界面端近傍の詳細応力解析より、適用範囲を越えるケースにおいては、数 nm の範囲の平均応力が、き裂発生を支配していることが明らかになった。

(5) ナノ要素薄膜を用いた離散構造環境下での界面強度評価

当初の計画にはなかったが、微視的構造の離散性と連続性に関する観点から、形状・寸法を制御した多数のナノ要素で構成された層を異材界面に配置した材料（図 4: 直径 50nm のナノ要素）の界面層破壊実験と力学解析を行った。その結果、界面端近傍 1-2 μm（約 20 本前後の要素に相当）の平均応力がき裂発生を支配していることを明らかにした。この要素数は、連続系の適用下限の原子数と対応している。

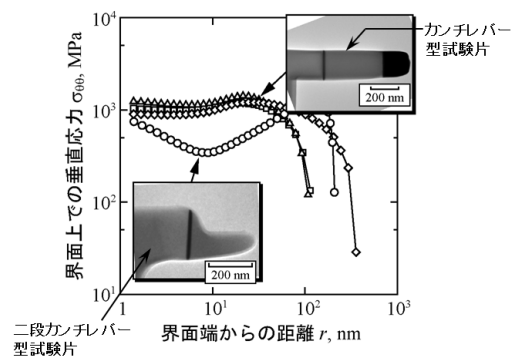


図 2 界面端近傍の応力分布

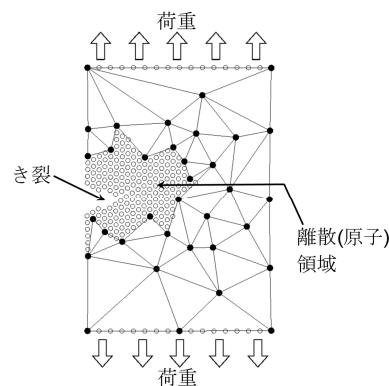


図 3 き裂先端の離散（原子）領域と要素領域

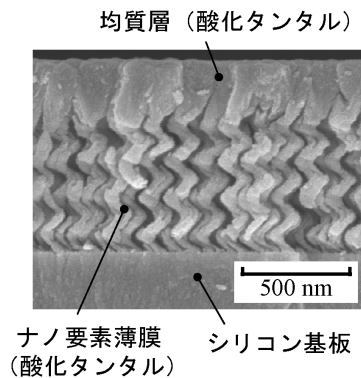


図4 ナノ要素薄膜

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文](計 79 件)

Takashi Sumigawa, Taisuke Sueta, Yuya Futamura, Motofumi Suzuki and Takayuki Kitamura, “Effect of Interface Layer Consisting of Nanosprings on Stress Field near Interface Edge”, *Engineering Fracture Mechanics*, (DOI: 10.1016/j.engfrac-mech.2009.02.002), Article in Press, (2009), with peer review

Takahiro Shimada, Satoru Okawa, Shinichiro Minami and Takayuki Kitamura, “Simplified Evaluation of Mechanical Instability in Large-Scale Atomic Structures”, *Materials Science and Engineering A*, Vols. 513-514, pp. 166-171 (2009), with peer review

Hiroyuki Hirakata, Toshihiro Hirako, Yoshimasa Takahashi, Yasunori Matsuoka and Takayuki Kitamura, “Creep Crack Initiation at a Free Edge of an Interface between Submicron Thick Elements”, *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 75, pp. 2907-2920 (2008), with peer review

Takashi Sumigawa, Hiroyuki Hirakata, Masaki Takemura, Shohei Matsumoto, Motofumi Suzuki and Takayuki Kitamura, “Disappearance of Stress Singularity at Interface Edge due to Nanostructured Thin Film”, *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 75, pp. 3073-3083 (2008), with peer review

Yoshimasa Takahashi, Hiroyuki Hirakata, Takayuki Kitamura,

“Quantitative Evaluation of Plasticity of a Ductile Nano-Component”, *Thin Solid Films*, Vol. 516, pp. 1925-1930 (2008), with peer review

Hiroyuki Hirakata, Yoshimasa Takahashi, Do Van Truong and Takayuki Kitamura, “Role of Plasticity on Interface Crack Initiation from a Free Edge and Propagation in a Nano-Component”, *International Journal of Fracture*, Vol. 145, pp. 261-271 (2007), with peer review

Hiroyuki Hirakata, Takayuki Kitamura and Masaya Kitazawa, “Fatigue Crack Growth along Interface between Metal and Ceramics Submicron-thick Films in Inert Environment”, *Acta Materialia*, Vol. 54, pp. 89-97 (2006), with peer review

平方寛之, 高橋可昌, Do Van Truong, 北村隆行, “透過型電子顕微鏡によるナノ構造体の界面端はく離のその場観察”, *材料*, 第55巻, pp. 1073-1080 (2006), 査読有

Hiroyuki Hirakata, Yoshimasa Takahashi, Shohei Matsumoto and Takayuki Kitamura, “Dominant Stress Region of Crack Initiation at Interface Edge of Micro-Dot on Substrate”, *Engineering Fracture Mechanics*, Vol. 73, pp. 2698-2709 (2006), with peer review

Akihiro Kushima, Yoshitaka Umeno and Takayuki Kitamura, “Ideal Strength of Cu Multi-Shell Nano-wire”, *Modeling and Simulation in Materials Science and Engineering*, Vol. 14, pp. 1031-1039 (2006), with peer review

Sergey V Dmitriev, Takayuki Kitamura, Ju Li, Yoshitaka Umeno, Kisaragi Yashiro and Nobuhiro Yoshikawa, *Acta Materialia*, Vol. 53, pp. 1215-1224 (2006), with peer review

Yoshitaka Umeno, Akihiro Kushima, Takayuki Kitamura, Peter Gumbsch and Ju Li, “Ab initio Study of the Surface Properties and Ideal Strength of (100) Silicon Thin Films”, *Physical Review B*, Vol. 72, Article number 165431 (2005), with peer review

Hiroyuki Hirakata, Takayuki Kitamura and Takato Kusano, “Pre-cracking Technique for Fracture

Mechanics Experiments along Interface between Thin Film and Substrate”, Engineering Fracture Mechanics, Vol. 72, pp. 1892-1904 (2005), with peer review

Fulin Shang, Takayuki Kitamura, Hiroyuki Hirakata, Isaku Kanno, Hidetoshi Kotera, and K. Terada, “Experimental and Theoretical Investigations of Delamination at Free Edge of Interface between Piezoelectric Thin Films on a Substrate”, International Journal of Solids and Structures, Vol. 42, pp. 1729-1741 (2005), with peer review

Yoshitaka Umeno, Takayuki Kitamura and Ryoji Fushino, “Instability Criterion of Inhomogeneous Atomic System”, Materials Science and Engineering A, Vol. 379, pp. 229-233 (2004), with peer review

Hiroyuki Hirakata, Takayuki Kitamura and Yoshitake Yamamoto, “Direct Measurement of Interface Strength between Copper Submicron-Dot and Silicon Dioxide Substrate”, JSME International Journal, Ser.A, Vol. 47, pp. 324-330 (2004), with peer review

Takayuki Kitamura, Hiroyuki Hirakata and Yusuke Satake, “Applicability of Fracture Mechanics on Brittle Delamination of Nano-Scale Film Edge”, JSME International Journal Ser. A, Vol. 47, pp. 106-112 (2004), with peer review

Yoshitaka Umeno, Takayuki Kitamura, Akihiro Kushima, “Theoretical Analysis on Electronic Properties of Zigzag-type Single-Walled Carbon Nanotubes under Radial Deformation”, Computational Materials Science, Vol. 30, No. 3-4, pp. 283-287 (2004), with peer review

他、6 1 件の論文が査読付の学術雑誌に掲載済み

[学会発表](計 121 件)

Takayuki Kitamura and Takashi Sumigawa, “Applicability of Fracture Mechanics to Nano-Components (Plenary Lecture)”, The 2nd International Conference on Recent Advances in Materials Processing

Technology, 2009.2.25, Tamil Nadu, India.

Takayuki Kitamura, Hiroyuki Hirakata, Takashi Sumigawa and Takahiro Shimada, “Mechanical Strength of Nano- Elements (Plenary Lecture)”, 17th European Conference on Fracture, 2008.9.3, Brno, Czech Republic.

Takayuki Kitamura, “Investigation and Application of Fracture Mechanics at the Nanoscale (Invited Lecture)”, Gordon Research Conference Thin Films & Small Scale Mechanical Behavior, 2008.7.28, Waterville, ME, the United States of America.

Takayuki Kitamura, Takashi Sumigawa and Hiroyuki Hirakata, “Strength of Low-Dimensional Nano-Structure (Invited Lecture)”, The 2nd International Conference on Heterogeneous Materials Mechanics, 2008.6.4, Huangshan, China.

[その他]

(1) ホームページ

<http://cyber.kues.kyoto-u.ac.jp/>

(2) 期間内の受賞

研究代表者：日本材料学会賞（論文賞）など 4 件、研究分担者：梅野 4 件、平方 3 件、澄川 3 件

(3) 国際会議での特別講演

European Conference on Fracture での Plenary Lecture 等 16 件

(4) 海外の大学や公的研究機関での特別講義

ウィーン大学（オーストリア）など 21 件

(5) 専門書執筆依頼

アメリカの出版社より本研究に関する専門書(250-300 頁)の執筆依頼を受け、正式契約を交わしている。

(6) レビュー

すでに 4 件執筆したほか、2 件執筆予定

(7) 当初研究分担者が東京大学と大阪大学へ昇任移籍。博士課程修了者が、名古屋大学助教、米国 MIT 研究員、京都大学助教、産業総合研究所研究員、ハノイ工科大学講師等に乞われて就職

(8) 国際的共同研究

チェコ、韓国（協定締結）、インド等の研

研究所・大学からの国際共同研究の要請を受け、実施している。

6. 研究組織

(1) 研究代表者

北村 隆行 (KITAMURA TAKAYUKI)
京都大学・大学院工学研究科・教授
研究者番号：20169882

(2) 研究分担者

梅野 宜崇 (UMENO YOSHITAKA)
東京大学・生産技術研究所・准教授
研究者番号：40314231
(参加年：平成 16、18 年度)

平方 寛之 (HIRAKATA HIROYUKI)
大阪大学・大学院工学研究科・准教授
研究者番号：40362454
(参加年：平成 16～19 年度)

澄川 貴志 (SUMIGAWA TAKASHI)
京都大学・大学院工学研究科・講師
研究者番号：80403989
(参加年：平成 19～20 年度)

(3) 連携研究者

なし

(4) 研究協力者

嶋田 隆広 (SHIMADA TAKAHIRO)
京都大学・大学院工学研究科・助教
研究者番号：20534259
(参加年：平成 19～20 年度)