

平成18年度科学研究費補助金（基盤研究（S））研究状況報告書

◆ 記入に当たっては、「平成18年度科学研究費補助金（基盤研究（S））研究状況報告書記入要領」を参照してください。

ローマ字		KITAMURA TAKAYUKI					
①研究代表者氏名		北村 隆行			②所属研究機関・部局・職 京都大学・工学研究科・教授		
③研究課題名	和文	低次元微小構造体の界面破壊					
	英文	Interface Strength of Low-Dimensional Small Components					
④研究経費		平成16年度	平成17年度	平成18年度	平成19年度	平成20年度	総合計
18年度以降は内約額 金額単位：千円		22,200	34,900	8,200	11,000	8,200	84,500
⑤研究組織（研究代表者及び研究分担者） *平成18年3月31日現在							
氏名	所属研究機関・部局・職		現在の専門	役割分担（研究実施計画に対する分担事項）			
北村 隆行	京都大学・工学研究科・教授		材料強度物性学	実験・解析の実施・統括と力学評価			
平方 寛之	京都大学・工学研究科・助手		微小材料強度学	低次元構造体の製作と界面強度実験			
⑥当初の研究目的（交付申請書に記載した研究目的を簡潔に記入してください。）							
<p>微小材料は膜・線・点の低次元構造を有しており、バルク材とは異なる物性を示す。また、低次元材料を組合せることによっていっそう多様な機能を発現させることができる。一方、材料の組み合わせによって生じる異材界面には原子構造の不整合があり、変形特性のミスマッチが大きいため複雑な破壊が進行する箇所でもある。バルク材の界面強度特性については連続体力学に基づく評価が有効である。とくに、界面端部やき裂先端近傍の応力特異場の強さに着目した破壊力学によって界面じん性の評価が行われている。しかし、材料の寸法が小さくなるとともに特異応力場支配域が縮小するため、その妥当性に疑義が生じる。さらに、連続体力学（破壊力学）はその局所にも十分な数の原子が存在することを仮定しており、原子配列の離散性の影響が強度に直接反映される極微小材料には適用できない。すなわち、微小構造体における連続体力学および破壊力学には寸法的限界が存在する。本研究では、典型的な材料組み合わせによる低次元微小構造体の界面破壊実験観察と力学解析（連続体力学解析および分子動力学解析）を行い、破壊メカニズム解明を通じて連続体力学および破壊力学の適用限界を明らかにするとともに、その適用域外のナノレベルの破壊に関する力学クライテリオンを明らかにすることを目的とする。</p>							

⑦これまでの研究経過（研究の進捗状況について、必要に応じて図表等を用いながら、具体的に記入してください。）

本研究は、主に以下の3つの項目から構成されている。

- (1) 微小低次元構造体界面破壊過程のその場観察装置の作製とそれによる観察・実験
- (2) 原子間力顕微鏡(AFM)を用いた低次元微小材料の基板からの剥離実験・解析
- (3) 原子シミュレーションによる微小構造体および界面強度解析

(1)については、申請どおり、平成16年度に微小構造体負荷装置（顕微鏡用負荷装置）を、平成17年度に電子顕微鏡を購入するとともに、両者を組み合わせた破壊過程のその場観察実験が可能となっている。なお、申請時の装置概念概要図では試料を挟み込む負荷方式を考えていたが、チャッキングに難点があるため、試料形状を工夫することによって、押し下げ方式とした。また、解像度等を考慮して申請時のフィールドエミッション走査型電子顕微鏡（FE-SEM）を透過型電子顕微鏡（TEM）にした。基本は申請時と変わっておらず、破壊過程のその場観察試験に成功する（下図：元データは動画記録）とともに微小破壊荷重も同時測定し、力学解析を実施した。これらの成果は速報として学会で発表し、装置の概要やその場観察例を中心にした論文を平成17年度後半に投稿している（現在審査中）。さらに、平成18年度の実験に向けた微細な試料の作製を行い、改良した試料を準備している。計画は、申請時の予定どおり順調に推移している。

(2)については、シリコン基板上に作製した多層膜における界面端からの界面き裂発生試験（押し下げ方式）を行い、破壊力学の妥当性を検証するとともに、(1)の試験に対する基礎的知見を得た。さらに、シリコン基板上に形状や寸法の異なる微小構造体（点、線）を作製し、改造AFMによる界面強度試験を実施した。これらを基に、界面端近傍の特異応力場およびその領域寸法と界面き裂発生について、連続体解析を行った。その結果、特異場領域がナノメートルオーダーに達すると、従来の破壊力学概念では有効な評価ができないことが明らかになりつつある。また、軟かい微小金属構造体と基板の界面強度評価を行うため、変形拘束層を導入した多層構造を有するアイランド（点状構造体）を基板上に作製した。その界面強度実験を行い、変形拘束が有効に作用することを検証した。この力学解析より、平成18年度以降のその場観察実験(1)の試料に関する基礎的データを得た。なお、本項目(2)は申請の数年前より取り組んでいる研究の高度化であり、本補助金によって多くの成果が獲得できたため、それらを学会発表・論文発表している。

(3)については、低次元構造体に関連する原子シミュレーションを行っている。第一原理解析に基づいて原子間ポテンシャルの考察の他、低次元構造体の基本強度について検討を行ってきた。界面端からの剥離き裂発生のシミュレーションより、微小低次元構造体界面の特異応力場領域はナノメートル程度であり、界面き裂発生時には応力特異場は大きく乱れていることが明らかになった。これは、ナノ構造体に対しては従来の破壊力学概念の適用には問題があることを示している。一方、原子系の負荷による力学的不安定条件を提案し、き裂発生に関して有効なクライテリオンとなることを原子シミュレーションに基づいて確認した。さらに、低次元構造体の強度クライテリオンとしての有効性、および、界面を想定した結晶構造が乱れた部分への適用性について検討を進めた。これらについては、その結果を学会発表・論文発表している。また、予定どおり、薄膜構造体に対する予備的なシミュレーションを実施しており、不安定条件が有効であるとの成果を得つつある。

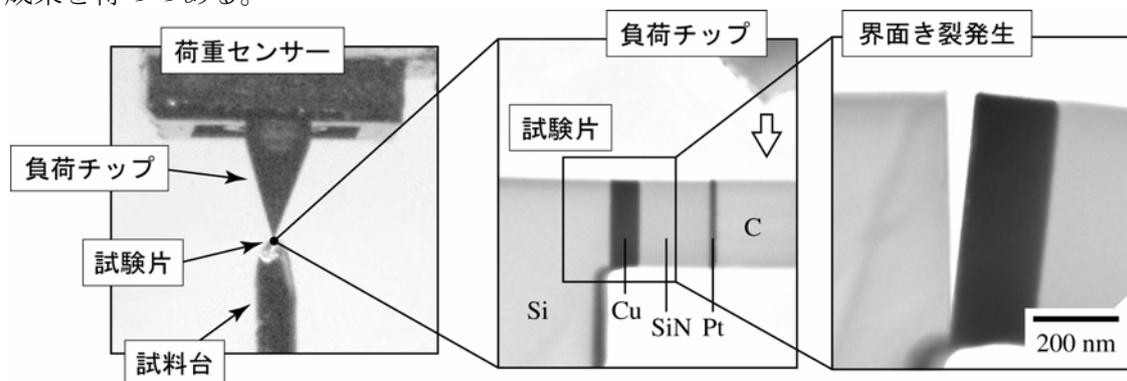


図 透過型顕微鏡内負荷装置と微小材料の界面破壊その場観察例

⑧特記事項 (これまでの研究において得られた、独創性・新規性を格段に発展させる結果あるいは可能性、新たな知見、学問的・学術的なインパクト等特記すべき事項があれば記入してください。)

(1)

独創性・新規性： 応力特異場領域がナノメートルオーダーの場合には、界面破壊に対して従来の破壊力学概念では有効な評価ができないことを実験的に示しつつある。

今後の発展の可能性： その場観察負荷装置の本格稼動によって、シミュレーションとリンクしたナノ構造体界面破壊の力学法則解明のための精密な実験ができる。

(2)

独創性・新規性： 界面破壊に対して、原子レベルの不安定クライテリオンの有効性をシミュレーション（下図）より確認した。

今後の発展の可能性： 実際の界面破壊には多くの局所因子が競合していると考えられるが、実験結果と考え合わせるにより、微小材料の界面破壊における支配力学因子の抽出と影響因子の精密解析が可能と考えている。

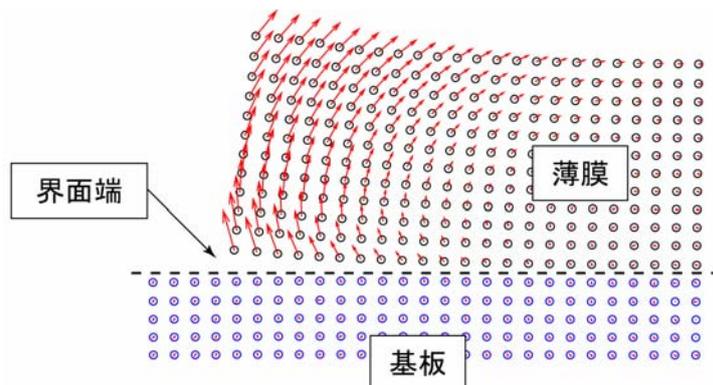


図 原子シミュレーションにおける薄膜上面負荷による界面破壊不安定モード
(界面端よりき裂発生の瞬間の原子の移動の様子)

⑨研究成果の発表状況 (この研究費による成果の発表に限り、学術誌等に発表した論文(掲載が確定しているものを含む。)の全著者名、論文名、学協会誌名、巻(号)、最初と最後のページ、発表年(西暦)、及び国際会議、学会等における発表状況について記入してください。なお、代表的な論文3件に○を、また研究代表者に下線を付してください。)

論文

Hiroyuki Hirakata, Takayuki Kitamura and Yoshitake Yamamoto, Evaluation of Interface Strength of Micro-Dot on Substrate by means of AFM, International Journal of Solid and Structures, Vol. 41, No.11-12, pp.3243-3253 (2004)

Yoshitaka Umeno, Takayuki Kitamura, Kazuyuki and Akihiro Kushima, Metallic-Semiconducting Transition of Single-Walled Carbon Nanotubes under High Axial Strain, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, Vol.31, pp.33-41 (2004)

Fulin Shang, Takayuki Kitamura and M.Kuna, An Elliptical Crack in Thermo-Piezoelectric Solids under Uniform Temperature Gradient: Analytical Development, Key Engineering Materials, Vol.261-263, Advances in Fracture and Failure Prevention, pp.63-68 (2004)

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, No.2, pp.106-112 (2004)

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, No.3, pp.324-330 (2004)

Takayuki Kitamura, Yoshitaka Umeno, Ryoji Fushino, Instability Criterion of Inhomogeneous Atomic System, Material Science and Engineering: A, 379, No.1-2, pp.229-233 (2004)

Yoshitaka Umeno, Takayuki Kitamura, Yoshiaki 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)

Yoshitaka Umeno and Takayuki Kitamura, Ab Initio Molecular Dynamics Study on the Formation Process of Al Layers on Si (001) Surface, Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, Vol.12, pp.1147-1157 (2004)

Fulin Shang and Takayuki Kitamura, On Stress Singularity at the Interface Edge between Piezoelectric Thin Film and Elastic Substrate, Microsystem Technologies, Vol.11, pp.1115-1120 (2005)

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)

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)

Yoshitaka Umeno and Takayuki Kitamura, Criterion of Mechanical Instability in Inhomogeneous Atomic System, Materials Science Forum, Vol.482, pp.127-130 (2005)

Takayuki Kitamura, Yoshitaka Umeno and Akihiro Kushima, Ideal Strength of Nano-components, Materials Science Forum, Vol.482, pp.25-32 (2005)

⑨研究成果の発表状況（続き）（この研究費による成果の発表に限り、学術誌等に発表した論文（掲載が確定しているものを含む。）の全著者名、論文名、学協会誌名、巻（号）、最初と最後のページ、発表年（西暦）、及び国際会議、学会等における発表状況について記入してください。なお、代表的な論文3件に○を、また研究代表者に下線を付してください。）

- Sergey V. Dmitriev, Takayuki Kitamura, Ju Li, Yoshitaka Umeno, Kisaragi Yashiro and Nobuhiro Yoshikawa, Near-Surface Lattice Instability in 2D Fiber and Half-Space, Acta Materialia, Vol.53, pp.1215-1224 (2005)

Sergey V. Dmitriev, Ju. Li, Nobuhiro Yoshikawa, Yoshihisa Tanaka, Yutaka Kagawa, Takayuki Kitamura and Sidney Yip, Breaking Atomic Bonds through Vibrational Mode Localization, Defects and Diffusion Forum, Vols.233-234, pp.49-60 (2005)

Yoshitaka Umeno, Akihiro Kushima, Takayuki Kitamura, Peter Gumbsch and Ju Li, Ab Initio Study of the Surface Properties and the Ideal Strength of (100) Silicon Thin Films, Physical Review B, Vol.72, 165431 (2005)

- Fulin Shang, Takayuki Kitamura and Hiroyuki Hirakata, Delamination Test and the Effect of Free Edge on Interface Strength of PZT Thin Films, Integrated Ferroelectrics, Vol.73, pp.67-74 (2005)

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

Tadahiro Shibutani, Takayuki Kitamura and Masaki Shiratori, Effect of Grain Boundary/Interface Network on Cavity Growth Due to Atom Migration Induced by Stress and Electric Current in Polycrystalline LSI Conductor, Defect and Diffusion Forum, Vol.249, pp.247-254 (2006)

土井祐介, 山寄優, 中谷彰宏, 北村隆行, 非線形相互作用によるエネルギー局在構造（非線形局在モード）と材料の原子・分子スケールでのダイナミクスへの応用, 材料, 掲載予定

Yoshitaka Umeno, Takayuki Kitamura and Motoki Tagawa, Mechanical Instability in Non-uniform Atomic Structure: Application to Amorphous Metal, Materials Science and Engineering: A, 掲載予定

北村隆行, 梅野宜崇, 木下祐介, 局部を有するカーボンナノチューブの不均一ひずみ評価, 日本機械学会論文集, A編, 掲載予定

北村隆行, 梅野宜崇, 尚福林, 嶋田隆弘, 若原嘉鶴人, Shell model に基づく $\text{Pb}(\text{Zr,Ti})\text{O}_3$ の原子間ポテンシャルの開発, 日本機械学会論文集, A編, 掲載予定

- Hiroyuki Hirakata, Yoshimasa Takahashi, Shohei Matsumoto and Takayuki Kitamura, Dominant Stress Region of Crack Initiation at Interface Edge of Microdot on a Substrate, Engineering Fracture Mechanics, 掲載予定

国際会議

Hiroyuki Hirakata, Takayuki Kitamura and Yoshitake Yamamoto, Evaluation of Interface Strength between Copper Submicron Dot and Silicondioxide Substrate, 9th International Conference on Electronic Materials, San Francisco, USA, Symposium P Proceedings (2004)

Hiroyuki Hirakata and Takayuki Kitamura, Interface Toughness between Copper Thin Film and Silicone Substrate, International Conference on Heterogeneous Material Mechanics, Chongqing, China, No.16 (2004)

⑨研究成果の発表状況（続き）（この研究費による成果の発表に限り、学術誌等に発表した論文（掲載が確定しているものを含む。）の全著者名、論文名、学協会誌名、巻（号）、最初と最後のページ、発表年（西暦）、及び国際会議、学会等における発表状況について記入してください。なお、代表的な論文3件に○を、また研究代表者に下線を付してください。）

Yoshitaka Umeno and Takayuki Kitamura, Ab Initio Simulation on Mechanical and Electronic Properties of Nanostructures under Deformation, NANOTECH2004, Boston, USA, Vol.2, pp.41-44 (2004)

Yoshitaka Umeno and Takayuki Kitamura, Criterion of Mechanical Instability in Inhomogeneous Atomic System, Materials Structure & Micromechanics of Fracture, Brno, Czech Republic (2004)

Yoshitaka Umeno, Akihiro Kushima and Takayuki Kitamura, Ab Initio Simulation of Ideal Structural Strength, Nano-Interface Mechanics Workshop, Tokyo, Japan (2004)

Fulin Shang, Takayuki Kitamura and Yoshitaka Umeno, Molecular Dynamics Study on the Internal Stress of Piezoelectric Thin Film Deposited by Magnetron Sputtering, World Congress on Computational Mechanics VI, Beijing, China (2004)

Takayuki Kitamura and Hiroyuki Hirakata, Initiation of Interface Crack at Free Edge between Thin Films in an Advanced LSI, 11th International Conference on Fracture, Turin, Italy (2005)

Fulin Shang, Takayuki Kitamura and Hiroyuki Hirakata, Delamination at Free Edge of Interface between Piezoelectric Thin Films, 11th International Conference on Fracture, Turin, Italy (2005)

Fulin Shang, Takayuki Kitamura and Hiroyuki Hirakata, Delamination Test and The Effect of Free Edge on Interface Strength of PZT Thin Films, The 17th International Symposium on Integrated Ferroelectrics, Shanghai, China (2005)

Takayuki Kitamura, Hiroyuki Hirakata and Do Van Truong, Initiation of Interface Crack at Free Edge between Thin Films with Weak Stress Singularity, International Conference on Fracture and Damage Mechanics IV, Mallorca, Spain, pp. 205-210 (2005)

Yoshimasa Takahashi, Hiroyuki Hirakata and Takayuki Kitamura, In Situ Observation of Interfacial Fracture in Low-dimensional Nano Structures, 2005 International Symposium on Electronics Materials and Packaging, Tokyo, Japan, pp. 55-60 (2005)

Do Van Truong, Hiroyuki Hirakata and Takayuki Kitamura, Effect of Frequency on Fatigue Crack Growth along Interface between Copper Film and Silicon Substrate, 2005 International Symposium on Electronics Materials and Packaging, Tokyo, Japan, pp. 61-66 (2005)

Yoshitaka Umeno, Akihiro Kushima and Takayuki Kitamura, Ab Initio Analysis on Ideal Strength of Nanoscale Thin Films, 11th International Conference on Fracture, Turin, Italy (2005)

Yoshitaka Umeno, Motoki Tagawa and Takayuki Kitamura, Mechanical Instability in Non-uniform Atomic Structure, ISPMA10, Prague, Czech Republic (2005)

Yoshitaka Umeno, Akihiro Kushima and Takayuki Kitamura, Atomistic study of ideal tension of nanometer scale thin films, EUROMAT2005, Prague, Czech Republic (2005)

⑨研究成果の発表状況（続き）（この研究費による成果の発表に限り、学術誌等に発表した論文（掲載が確定しているものを含む。）の全著者名、論文名、学協会誌名、巻（号）、最初と最後のページ、発表年（西暦）、及び国際会議、学会等における発表状況について記入してください。なお、代表的な論文3件に○を、また研究代表者に下線を付してください。）

Takayuki Kitamura, Yoshitaka Umeno and Akihiro Kushima, Mechanical and Electronic Property of Zigzag Type Single-walled Carbon Nanotubes under Radial Compression, International Conference on Computational & Experimental Engineering and Sciences, Chennai, India (2005)

Akihiro Kushima, Yoshitaka Umeno, and Takayuki Kitamura, First Principle Evaluation of Ideal Strength of Cu Nano-wire, Osaka, Japan, P8 (2005)