セラミックスの気孔を考慮した微視的応力とひずみの解析*

皿井孝明^{*1}, 本田和男^{*1}

Analysis of Microscopic Stress and Strain in Ceramics

Takaaki SARAI and Kazuo HONDA

The macroscopic elastic constants of alumina are calculated by the finite element method based on a plane model of polycrystalline ceramics. The microscopic stress and strain in the uniaxial elastic deformation are also analyzed considering the pore in ceramics and the elastic anisotropy of the crystal grain. As the porosity increases, the macroscopic value of Young's modulus decreases and the calculated relation between them agrees with the well-known experimental equation. The microscopic stress and strain concentrations around a pore are affected by Young's modulus of the grain and are dependent on the position of the pore on the grain boundary. The maximum values of stress and strain change with the porosity, and the influence of the position of the pore is large when porosity becomes large. In the case when a pore exists on the grain boundary nearly perpendicular to the stress axis, the maximum values are at the region around the grain having a large value of Young's modulus.

Key Words: Ceramics, Elasticity, Anisotropy, Stress Concentration, Pore, Grain

1. 緒 言

セラミックスの多くは不均質材料であり、その強度は微視的組織の影響を強く受ける。多結晶セラミックスの微視的組織としては結晶粒、気孔、構成相などがあげられ、結晶粒も結晶方位により変形特性の異なる不均質体として取扱う必要がある。セラミックスでは、このような不均質構造に基づく局所的な応力やひずみの集中が強度の低下をもたらすため、結晶粒や気孔を考慮した微視的応力、ひずみの考察が重要であると考えられる。すなわち、セラミックスの強度に及ぼす気孔の影響などは従来より研究されているが、微視力学的な考察を目的として、気孔による微視的応力、ひずみの集中と結晶粒の変形異方性の関係などを明らかにすることは材料設計の立場から有意義であると思われる。

本報では、多結晶セラミックスのモデルと有限要素法を用いてアルミナの微視的弾性変形を解析し、巨視的弾性係数と気孔率の関係、および微視的応力、ひずみの集中に及ぼす気孔の位置や気孔率などの影響について考察した。なお、本解析は着目した結晶粒の周囲

(結晶粒界)に気孔が一つ存在する場合を対象とし、有限要素法では平面応力状態を仮定する。

2. 有限要素法による解析

2・1 多結晶セラミックスのモデル 本報では、図1に示すような気孔を含む多結晶セラミックスの平面モデルを考え、通常の有限要素法を用いて弾性変形解析を行う。解析に使用したモデルは、着目した結晶粒周囲の平均的性質を考え、多結晶セラミックスの全体としての巨視的性質(セラミックスに含まれるすべ

図1 多結晶セラミックスのモデル

* 原稿受付 平成2年3月12日。

*¹ 正員、岡山大学工学部 (〒700 岡山市津島中3-1-1)。

ての結晶粒と気孔に対する平均的性質)をもつ正方形のバルク材の中央に円形結晶粒を配置したもので、結晶粒とバルク材の境界(結晶粒界)に沿って x 方向からの角度が α の位置に気孔が一つ存在する。この場合、結晶粒周囲のバルク材はある程度大きな領域とするのが妥当と考えられるため、モデル全体に対する結晶粒の体積割合を約 2% とし、結晶粒より十分離れたところでモデルの各辺に強制変位を与えた。本解析は図 1 の y 方向への一軸引張変形を対象としてすべて行い、境界条件として引張方向と引張直角方向の変位の比を $1:-\nu$ (ν はポアソン比)とした。

図 2 はモデルの要素分割を示したもので、A 部の詳細図における太線が結晶粒とバルク材の境界を表す。要素分割は三角形要素を用いて図 1 のモデル全体について行ったが、 x 軸および y 軸に対して対称としたため 1/4 の部分を示した。なお、ここでは気孔がない場合に結晶粒部分の応力、ひずみがほぼ一様になること⁽¹⁾などを考慮して要素分割を行っており、モデル全体に対する要素数は気孔の部分も含めて 992、節点数は 513 である。図 2 は結晶粒界に規則的に配置した要素のうち $\alpha=30^\circ$ の位置の要素を気孔としたモデルを

表 1 アルミナ単結晶の弾性係数(GPa)

C_{11}	C_{12}	C_{13}	C_{14}	C_{33}	C_{44}
497.37	163.98	112.26	-23.59	499.36	147.43

図 2 解析に用いた要素分割

表し、結晶粒と気孔を加えた部分に対する気孔の体積割合 p は 0.5% である。この気孔率については $p=0, 0.5, 1, 1.5\%$ として解析を行い、気孔率が増加した場合は気孔の形状が結晶粒界に沿って細長くなるように気孔に対応する要素数を増加させた。

2.2 巨視的弾性係数の計算 本モデルに基づいて、多結晶セラミックスの全体としての巨視的弾性係数を個々の結晶粒の弾性係数から計算する。アルミナ単結晶は三方晶であり、応力とひずみの関係は対称性から結晶系における 6 個の弾性係数あるいは弾性コンプライアンス定数を用いて表される⁽²⁾⁽³⁾。計算に使用したアルミナ単結晶の弾性係数 c_{ij} を表 1 に示す⁽⁴⁾。本解析では、種々の方位から成る結晶粒を考える必要があるためオイラー角⁽⁵⁾を用いて結晶方位を変化させ、対応する結晶粒の弾性係数を座標変換により求めた。一方、バルク材は縦弾性係数とポアソン比により表される通常の等方性材料の関係式を用い、セルフコンシステントな考え方⁽⁶⁾からそれらの値を決定した。すなわち、気孔の位置を結晶粒界に沿って変化させ、それぞれの位置においてすべての方位の結晶粒に対して有限要素法による解析を行った。その際、結晶粒と気孔を加えた部分の要素の応力、ひずみをすべての場合について平均し、気孔を含む多結晶全体としての巨視的応力、ひずみを計算した。本解析では、バルク材に初期値として与えた弾性係数とこのような巨視的応力、ひずみから求まる弾性係数を比較し、両者の値がほぼ等しくなった場合を巨視的弾性係数とした。なお、対称性から $\alpha=0\sim90^\circ$ の範囲において気孔の位置を $\alpha=0, 30, 60, 90^\circ$ と変化させて解析を行い、気孔の部分は縦弾性係数をほぼ零とみなせる小さな値とした。

図 3 巨視的弾性係数と気孔率の関係

3. 巨視的弾性係数

図3は本モデルにより計算したアルミナの巨視的な縦弾性係数 E 、ポアソン比 ν と気孔率 p の関係を示したもので、縦弾性係数は気孔率の増加とともに急激に減少し、ポアソン比も全体的には気孔率が大きくなると減少する。セラミックスの縦弾性係数の実測値と気孔率の関係は、気孔がない場合の縦弾性係数を E_0 として

$$E = E_0 \exp(-bp) \dots\dots\dots (1)$$

と表され、アルミナの場合は係数 b として3~4程度の値が多く得られている⁽⁷⁾。なお、式(1)は気孔率の小さい範囲においてほぼ直線となる。そこで、本計算結果を幾分ばらつきがあるが上式に基づいて最小二乗法により近似すると $b \approx 3.87$ となり、実測値とほぼ対応する。Reussの応力一定モデル⁽⁸⁾とvoigtのひずみ一定モデル⁽⁹⁾により気孔がない場合の巨視的な縦弾性係数、ポアソン比を求めると、応力一定は約397 GPa, 0.237, ひずみ一定は約408 GPa, 0.230 となり、両モデルによる値の差は比較的小さい。本モデルによる値はいずれも両モデルの間で応力一定モデルのほうに近く、また前述のように気孔率との関係もほぼ妥当と思われることから、このようなモデルと有限要素法を用いて気孔を有するセラミックスの巨視的弾性係数を推定できると考えられる。

4. 微視的応力、ひずみの集中

4.1 結晶粒の弾性異方性 気孔付近には微視的応力、ひずみの集中を生じるが、着目した結晶粒により様子は異なると考えられる。この場合、気孔付近の変形状態は結晶粒の縦弾性係数の影響を受けると考えられるため、以下では縦弾性係数との関係について考察する。図4はアルミナ三方晶の3回対称軸(六方格子により表示した場合の c 軸)を含む一つの面内における縦弾性係数 E_c の変化を表1の弾性係数から計算し

図4 縦弾性係数の異方性(単結晶)

たもので、横軸は対称軸からの角度 θ をとっている。図は縦弾性係数の変化の大きい面内の値を示しており、これより縦弾性係数は $\theta=0^\circ$ で最大、 $\theta=50^\circ$ 付近で最小となることがわかる。なお、この最大、最小の縦弾性係数はすべての結晶方位を考えた場合にも最大、最小となる。図5は図1のモデルにおいて引張方向の結晶方位を $\theta=0\sim90^\circ$ と変化させ、結晶粒とバルク材の部分の要素について応力、ひずみの最大値 σ_y/σ , ϵ_y/ϵ (引張方向)をそれぞれ求めたもので、 σ , ϵ は多結晶全体としての巨視的応力、ひずみである。なお、気孔率は $p=0.5\%$ であり、気孔の位置が $\alpha=0, 90^\circ$ における結果を一例として図(a), (b)に示した。図から、結晶粒の縦弾性係数の影響は気孔の位置により異なることがわかる。気孔の位置が $\alpha=0^\circ$ の場合、縦弾性係数の大きい $\theta=0^\circ$ 付近の結晶粒に着目すると、応力は結晶粒、ひずみはバルク材のほうがそれぞれ大きく、縦弾性係数の小さい $\theta=50^\circ$ 付近はその反対になる。一方、 $\alpha=90^\circ$ の場合は結晶粒とバルク材における値の差が大きく、バルク材のほうが応力、ひずみのいずれも大きいことがわかる。また、バルク材についてみると $\alpha=0^\circ$ は縦弾性係数の小さい結晶粒周囲、 $\alpha=90^\circ$ は大きい結晶粒周囲のほうが応力、ひずみの集中が大きくなり、気孔率が1%, 1.5%の場合も同様の結果となってい

(a) $\alpha=0$

(b) $\alpha=90$

図5 結晶粒とバルク材における微視的応力、ひずみの集中($p=0.5\%$)

(a) $p = 0.5\%$ (b) $p = 1.0\%$ (c) $p = 1.5\%$ 図6 微視的応力、ひずみの最大値と気孔の位置の関係
および最大値を示すときの結晶粒の縦弾性係数

る。気孔がない場合、応力軸と平行な結晶粒界はひずみが、直角な粒界は応力がそれぞれ連続となるため⁽¹⁰⁾、結晶粒の縦弾性係数の影響により前述のような結果がバルク材において得られると考えられる。

4.2 気孔の影響 図5のような応力、ひずみの最大値と結晶方位の関係を全方位について計算することにより、すべての結晶粒を考えた場合のそれらの最大値を求めることができる。このような最大値 σ_{max}/σ , ϵ_{max}/ϵ と気孔の位置を表す角度 α の関係、および最大値を示すときの結晶粒の縦弾性係数 E_c を図6に示す。なお、図では結晶粒において最大値を生じた場合を○, □, バルク材の場合を●, ■で区別した。気孔率が $p=0.5\%$ の場合、応力、ひずみの最大値はともに1.7~2程度の値となり、気孔の位置による違いは比較的小さいことがわかる。一方、気孔率が1%, 1.5%と大きくなると気孔の位置による差が認められ、 $\alpha=60^\circ$ あるいは 90° において最大値が3程度の値が得られている。本モデルでは、気孔率が大きくなると気孔の形状が結晶粒界に沿って細長くなるため、気孔が応力軸に対して偏平になる α の大きな位置において応力、ひずみの集中が大きくなると考えられる。また、このような最大値を生じる場所は気孔の位置により異なり、 $\alpha=60, 90^\circ$ は縦弾性係数の比較的大きい結晶粒周囲のバルク材において応力、ひずみが最大となる。一方、 $\alpha=0^\circ$ で気孔率が0.5%の場合、応力はバルク材、ひずみは結晶粒においてそれぞれ最大となるが、気孔率が増加すると応力、ひずみのいずれも結晶粒において最大となる。その場合、ひずみは縦弾性係数が最小あるいはそれに近い結晶粒において最大となるが、応力は縦弾性係数が最大に近い結晶粒において必ずしも最大

図7 微視的応力、ひずみの最大値と気孔率の関係

となっていない。また、 $\alpha=30^\circ$ は応力とひずみの最大値が結晶粒のみ、バルク材のみ、および結晶粒とバルク材に分かれるなど、気孔率により最大値を生じる場所が大きく異なる。実際の多結晶体の変形状態は隣接結晶粒により複雑に変化するが、一つの結晶粒に着目してその弾性異方性を考慮した場合、以上のような微視的応力、ひずみの集中が考えられる。

図7に応力、ひずみの最大値と気孔率の関係を示す。気孔率が $p=0\%$ 、すなわち気孔がない場合にも結晶粒の弾性異方性により最大値は巨視的な値の10%程度大きな値を示す。このような最大値と気孔率の関係は気孔の位置に依存し、 $\alpha=0^\circ$ は $p=0.5\%$ 、 $\alpha=30^\circ$ 、 60° は $p=1\%$ の値が最も大きく、 $\alpha=90^\circ$ は気孔率の増加とともに値が大きくなる。また、応力、ひずみの集中が大きい気孔の位置は気孔率により異なり、 $p=0.5$ 、 1.5% は $\alpha=90^\circ$ 、 $p=1\%$ は $\alpha=60^\circ$ に位置する気孔が危険であることがわかる。以上のように、応力、ひずみの最大値は気孔の位置や気孔率により変化し、気孔率が大きくなると気孔の位置による差が大きくなる。また、気孔の位置が同じ場合でもどのような結晶粒の周囲に気孔が存在するかにより最大値が異なるため、セラミックスの強度は気孔の分布状態の影響を大きく受けると考えられる。

5. 結 言

多結晶セラミックスのモデルに基づいて、気孔の存在するアルミナの巨視的弾性係数を計算した。さらに、結晶粒の弾性異方性を考慮して気孔による微視的応力、ひずみの集中を考察した結果、以下のことが明らかになった。

かになった。

(1) 巨視的な縦弾性係数は気孔率の増加とともに急激に減少し、両者の関係は代表的な実験式とほぼ対応する。また、ポアソン比も全体的には気孔率の増加により減少する。

(2) 微視的応力、ひずみの集中は結晶粒の縦弾性係数の影響を受け、気孔の位置による違いも認められる。

(3) 微視的応力、ひずみの最大値は気孔率とともに変化し、気孔率が大きくなると気孔の位置による差が大きくなる。

(4) このような最大値を生じる場所は気孔の位置に依存し、応力軸と結晶粒界が直角に近い位置の気孔の場合、縦弾性係数の比較的大きい結晶粒の周囲において応力、ひずみが最大となる。

文 献

- (1) Eshelby, J. D., *Proc. R. Soc., Ser. A*, **241**(1957), 376.
- (2) Schmid, E. and Boas, W., *Plasticity of Crystals*, (1950), 14, F. A. Hughes.
- (3) Bhagavantam, S., *Crystal Symmetry and Physical Properties*, (1966), 127, Academic Press.
- (4) Simmons, G. and Wang, H., *Single Crystal Elastic Constants and Calculated Aggregate Properties*, 2nd ed., (1971), 146, M. I. T. Press.
- (5) 文献(3)の5ページ。
- (6) Kröner, E., *Z. Phys.*, **151**(1958), 504.
- (7) Spriggs, R. M., *J. Am. Ceram. Soc.*, **44**-12(1961), 628.
- (8) Reuss, A., *Z. angew. Math. Mech.*, **9**-1(1929), 49.
- (9) Voigt, W., *Lehrbuch der Kristallphysik*, (1928), 962, Teubner.
- (10) 本田・ほか2名, 機論, **53**-490, A(1987), 1057.