多結晶体中における微視組織的微小表面き裂の応力拡大係数*

釜谷 昌幸^{*1}, 北村 隆行^{*2}

Stress Intensity Factors of Microstructurally Small Surface Crack in Polycrystalline Material

Masayuki KAMAYA^{*3} and Takayuki KITAMURA^{*3} Institute of Nuclear Safety System, Inc.,
64 Sata, Mihama-cho, Mikata-gun, Fukui, 919-1205 Japan

Averaging the anisotropy of each crystal, the macroscopic behavior of polycrystalline materials is isotropic and homogenous in terms of elastic deformation. However, the anisotropic and/or inhomogeneous property influences on the stress field ahead of a crack if the crack size is small in comparison with the grain. This brings about the change in the stress intensity factor (SIF). In present study, in order to investigate the cause and magnitude of the change in the SIF, the finite element analysis is performed. The calculations are carried out for the polycrystal cracked plate model, which consists of hexagonal pillar shape of crystal grains with random orientation. The results implied that the SIF of microstructurally small crack is greatly affected by the deformation constraint caused by the difference in elastic modulus of grains near the crack. The statistical scatter of SIF due to the random orientation of crystal orientation in a polycrystal is examined by a Monte Carlo simulation. The variation in the SIF becomes large as the crack size decreases and anisotropy of the material increases. We propose an equation for estimating the variation in the SIF of the microstructurally small crack.

Key Words: Stress Intensity Factor, Finite Element Method, Small Crack, Polycrystal, Anisotropic Elasticity, Microstructure, Constraint

1. 結 論

疲労や応力腐食割れ (Stress Corrosion Cracking, 以後 SCC) などではき裂進展速度と応力拡大係数 (K 値) との間に相関関係のあることが経験的に示されている^{①②}。K 値はハンドブック^{③④}などを用いることで、多様なき裂形状や境界条件に対する値を求めることができる。したがって、試験によりこの相関係数を調べておけば、き裂の進展を予測することが可能となる。これまで、このような K 値に基づくき裂進展予測が工業的に広く行われてきた^⑤。

しかし、従来の解析では、材料が均質等方弾性体であるという仮定のもとで求められた K 値を用いていた。多結晶体は、巨視的には耐力以下で等方弾性体とみなすことができるが、微視的にはそれぞれの結晶粒は弾性異方性を有している。そのため、き裂サイズが結晶粒径と同じオーダーの微小き裂においては、結晶粒の弾性異方性がき裂周囲の応力場に及ぼす影響は無視できなくなる。弾性異方性を有する単結晶中のき

裂では、結晶方位に依存して K 値が変化することが指摘されている^{⑥⑦}。また、多結晶体中では、き裂が存在しない場合でも結晶粒同士の变形拘束の影響により、応力分布が不均一になることが示されており^{⑧⑨}、き裂が存在する場合にも K 値はその効果により変化すると考えられる。したがって、これらの影響を考慮して算出された微小き裂の K 値 (以後、ミクロな K 値と呼ぶ) は、同じ形状の一樣等方弾性体条件下で評価された K 値 (以後、マクロな K 値と呼ぶ) とは異なる^⑩。そして、これが不規則で不安定な進展速度に代表される微小き裂の特異な進展挙動^{⑪⑫}の要因の一つであると考えられる。

本研究では、多結晶体表面にある半円形表面き裂のミクロな K 値を有限要素法により解析し、K 値の変化をもたらす要因と、その変化の大きさについて考察する。まず、多結晶体を構成する結晶粒の基本となる単結晶モデルを用いて、単結晶中に存在する半円き裂の K 値の結晶方位による変化を調べる。次に、多結晶体を模擬したモデルを用いて、多結晶中におけるミクロな K 値の変化の傾向について考察する。とくに、隣接する結晶粒による变形拘束の影響に着目し、多結晶体中のミクロな K 値がマクロな K 値と異なる要因に

* 原稿受付 2005 年 5 月 13 日。

^{*1} 正員、(株)原子力安全システム研究所(〒919-1205 福井県三方郡美浜町佐田 64)。^{*2} 正員、京都大学大学院工学研究科(〒606-8501 京都市左京区吉田本町)。

E-mail: kamaya@inss.co.jp

Fig. 1 Analysis model of plate with a semi-circular surface crack under tension.

Fig. 2 Crack size in the polycrystal model.

ついて考察する。また、微小な SCC き裂の進展を統計的に予測するために²²⁾、結晶方位をランダムに与えた場合のミクロなK値の統計的な変化を調べた。

2. 解析方法

解析対象は、図 1 に示す深さ a の半円形表面き裂を中央部に導入した平板である。平板のサイズは、幅 $W=3a$ 、厚さ $t=3a$ 、長さ $B=8a$ で、遠方一様引張応力 σ_0 を負荷した。平板は六角柱（ただし、自由境界と接する部分を除く）の結晶粒で構成されており、結晶粒に対するき裂の相対サイズを図 2 に示す 4 種類設定した。つまり、結晶粒を代表するサイズ p を基準に、き裂サイズを $0.5p$ 、 $2p$ 、 $4p$ 、そして $6p$ とした。以後、これらのき裂サイズに対応したモデルを、それぞれ $0.5p$ モデル、 $2p$ モデル、 $4p$ モデル、そして $6p$ モデルと呼ぶ。それぞれのき裂サイズの場合のき裂面断面における有限要素メッシュを図 3 に示す。この図において、結晶粒は濃淡によって区別した。それぞれのモデルから得られたK値を比較するために、き裂と平板の相対サイズを一定とした。図 4 に $0.5p$ モデルの全体図を示すが、いずれのモデルにおいても結晶粒の長手方向は荷重方向に平行で、その端面は荷重方向に垂直

(a) $0.5p$ -cracked polycrystal model

(b) $2p$ -cracked polycrystal model

(c) $4p$ -cracked polycrystal model

(d) $6p$ -cracked polycrystal model

Fig. 3 Sectional view of finite element mesh divisions for polycrystal models.

な面である。き裂面は荷重方向に垂直に、平板の長手方向の中央部、つまり図中に示した Grain1 の結晶粒内にある。それぞれの有限要素メッシュを用いてマクロなK値を評価した結果を図 5 に示す。ここで、K値は次式で無次元化している。

$$F_I = \frac{K_I}{\sigma_0 \sqrt{\pi a}} \quad (1)$$

これらの結果は、表面点を除いて同じ境界条件で算出した高精度な解析結果²³⁾とよく一致している。したが

って、図3に示した有限要素メッシュにより精度の高い解析が可能である。結晶粒の弾性定数は表1に示したNi, Al, Cu, FeそしてWのものを用いた²⁰⁾。解析では、それぞれの結晶粒の結晶方位を一樣乱数で与え、400通りの結晶方位の組み合わせに対してK値を求めた。モデルの対称性は考慮せず、全ての結晶粒に対して別々の方位を与えた。単結晶に対する解析も実施し、その場合は0.5pモデルにおいて全ての結晶粒の方位を同一に設定した単結晶モデルを用いた。有限要素解析には、汎用の有限要素解析コードであるABAQUS

Ver.6.3²⁰⁾を用いた。このコードでK値は仮想き裂進展法で求めたJ積分値から算出される²⁰⁾。

Table 1 Elastic compliance of materials.

Material	Elastic compliance (10^{-11} Pa^{-1})		
	S_{11}	S_{12}	S_{44}
Ni	0.73	-0.27	0.80
Al	1.57	-0.57	3.51
Cu	1.50	-0.63	1.33
Fe	0.80	-0.28	0.86
W	0.26	-0.07	0.66

Fig.4 Crack position in polycrystal model
(0.5p · cracked polycrystal model).

Fig.6 Normalized stress intensity factor along crack front in single crystal model with various crystal orientations.

Fig.5 Stress intensity factor evaluated using the polycrystal models in homogenous body.

Fig.7 Eulerian angles between the crystal coordinates and the xyz-coordinates.

Fig.8 Normalized stress intensity factor along crack front in the 0.5p-cracked polycrystal model with various combinations of crystal orientation.

3. 解析結果および考察

3.1 単結晶き裂体における応力拡大係数 モデル中の全ての結晶粒の方位が同一である単結晶モデルを用いた解析結果を図6に示す。図には、結晶方位をランダムに設定し、Niの弾性定数を用いて求めた5通りの結果と、図7に定義するオイラー角($\theta_1, \theta_2, \theta_3$) (単位: $^\circ$)で定義する結晶方位 (0, 45, 0)と(0, 0, 0)の場合の結果、および結晶が等方弾性体 (ポアソン比0.3) であるとした場合のK値、つまりマクロなK値も示した。これまでに指摘されてきたように⁶⁹, 単結晶中の半円表面き裂のK値は、結晶方位に依存してマクロなK値とは異なった値となる。また、その変化の大きさも前縁に沿って異なり、最深部で最も大きくなる傾向を示した。前縁に沿って変化するK値を代表するパラメータとして、前縁に沿ったK値の平均 F_{Iave} を次式のように定義した⁷⁰。

$$F_{Iave} = \frac{1}{\pi a} \int F_I d\Gamma \quad (2)$$

ここで、 Γ はき裂前縁に沿った経路を示す。なお、表面点 ($\nu=0^\circ$ および 180°) での F_I は計算から除外している。マクロなK値の場合は $F_{Iave} = 0.710$ となった。また、結晶方位 (0, 45, 0) の場合は $F_{Iave} = 0.687$, および (0, 0, 0) の場合は $F_{Iave} = 0.745$ となり、これらの値の範囲に結晶方位をランダムに設定した400通りの F_{Iave} の全てが含まれた。このことから、単結晶中の応力拡大係数 F_{Iave} は、0.687 から 0.745 の範囲で変化すると考えられる。

(a) Case 1

(b) Case 2

Fig.9 Normalized stress in 0.5p-cracked polycrystal models obtained by finite element analysis.

3.2 多結晶き裂体における応力拡大係数 0.5pモデルを用いて算出した多結晶体中の、き裂前縁に沿ったK値を図8に示す。弾性定数はNiのものを使用し、図には結晶方位をランダムに変化させた10通りの結果と、マクロなK値を示している。単結晶の場合と同様に、得られたK値は、結晶方位の組み合わせに依存して大きく変化している。しかも、変化の大きさは単結晶より大きくなる傾向にある。個々のケースについて見ると、前縁に沿ったK値は単結晶の場合に多く見られたようにマクロなK値を中心に変化するのではなく、明らかにマクロなK値から逸脱した大きな変化を示すケースが見られる。図8において小さなK値を示した結晶方位の組み合わせ (Case1) と大きなK値を示した組み合わせ (Case2) について、き裂部分周囲のMises 応力分布を図9に示す。いずれのケースも、き

Fig. 10 Elastic modulus along loading direction.

裂前縁に沿って応力が集中している様子が見られる。また、き裂が存在する中心部分の結晶粒の応力を見ると、K値の小さいCase1の方が、K値の大きいCase2より大きくなっていることが分かる。このような結晶粒毎の不均一な応力分布の影響により、Case1およびCase2のK値は、前縁全体に渡ってマクロなK値より大きくシフトしたと考えられる。Case1とCase2における、き裂周囲の結晶粒の応力方向に対する等価弾性率を図10に示す。Case1においては、き裂の存在する結晶粒の弾性率が周囲のそれより小さくなっている。これにより、き裂の存在する結晶粒の応力が相対的に小さくなったと考えられる。逆に、Case2においてはき裂の存在する結晶粒の弾性率が相対的に大きくなり、周囲の結晶粒よりも分担する荷重が大きくなった。つまり、き裂周囲の結晶粒の相対的な弾性率が応力分布に影響している。例えば、図4で定義したき裂が存在する結晶粒 Grain1 と隣接する結晶粒 Grain2 および Grain3 の方位を(35.3, 45.0, 0.0) (111面を応力方向に垂直に向けた場合に相当)とし、他の結晶方位を(0, 0, 0)とした場合についてK値を計算すると $F_{I_{ave}} = 0.988$ と大きな値となる。また、逆に Grain1,2,3 の方位を(0, 0, 0)とし、他を(35.3, 45.0, 0.0)とした場合は、 $F_{I_{ave}} = 0.435$ と小さな値となった。同様に Grain1 のみの方位を他の結晶粒と異なるように設定した場合は、それぞれ $F_{I_{ave}} = 0.789$ および 0.695 となり、先の場合より変化の幅は小さくなる。このように、多結晶体においては、

(a) Relation between F_I in polycrystal model and F_I in single crystal model with the orientation of Grain 1 (b) Relation between F_I in polycrystal model with a crack and normalized stress at the correspondent point of the deepest crack front in the model without a crack.

Fig. 11 Influence of anisotropic elasticity and constraint on stress intensity factor in polycrystalline material.

周囲の結晶粒との弾性率の関係、つまり結晶方位の関係により荷重の分担が変化し、それによってその結晶粒に存在するき裂のK値が変化する。

3.3 異方性効果および変形拘束効果 以上のように、多結晶体中のミクロなK値の変化をもたらす要因として、弾性異方性の影響（以後、異方性効果と呼ぶ）と、周囲との等価弾性率の差に起因する結晶粒の変形拘束の影響（以後、変形拘束効果）が考えられる。これらの内、異方性効果の影響を考察するために、0.5pモデルの最深点のK値と、き裂が存在する結晶粒 Grain 1 と同じ方位の単結晶モデルにおける最深点で

Fig.12 Distribution of averaged F_I along the crack front

($0.5p$ -cracked polycrystal model, $N=400$, crystal orientations are random)

のK値の関係を調べる。結晶方位をランダムに設定した400通りの多結晶体と、Grain 1と同方位の単結晶体の結果を図11(a)に示した。単結晶中においても弾性異方性の影響でK値にばらつきが見られるものの、多結晶体中のK値との間に相関は認められない。つまり、異方性効果によりミクロなK値が変化するものの、多結晶体中におけるミクロなK値の変化に対する影響は小さい。一方、同じく $0.5p$ モデルの最深点のK値と、同じ結晶方位の組み合わせを持つ多結晶体ではあるがき裂が存在しない場合のき裂最深点相当位置の応力値の関係を図11(b)に示す。図からき裂付近の応力の大きさとK値には大きな相関があることが分かる。図9および図10の結果と併せて考えると、多結晶体中におけるミクロなK値の変化には変形拘束効果が大きく寄与している。図11(b)に示した直線は、図8に示したマクロなK値の最深点の値 $F_I = 0.683$ と無次元化応力 $\sigma_y/\sigma_0 = 1$ の交点と原点を結んだ直線を示している。この直線とミクロなK値の関係から、き裂のないモデルを用いてき裂部分の応力を解析することで、多結晶体中におけるミクロなK値を推測することが概ね可能であることが分かる。

3.4 K値変化の統計的傾向 多結晶体中のミクロなK値の変化は、変形拘束効果の影響が支配的であることが明らかになったが、変形拘束による応力変化を結晶方位の組み合わせから解析的に導くことは困難である。そこで、多結晶体の結晶方位がランダムであると仮定して、ランダムに与えた結晶方位からK値の変化の統計的な傾向を考察する。Niの弾性定数を用いた $0.5p$ モデルから得られる $F_{I\text{ ave}}$ の分布を図12に示す。結晶方位の組み合わせによって $F_{I\text{ ave}}$ はばらつく

(a) Mean value

(b) Standard deviation

Fig.13 Change in the distribution parameters for the crack size ($N=400$, crystal orientations are random).

Fig.14 Relationship between degree of anisotropy and variation in the stress intensity factor.

きは小さく、巨視的なき裂のK値と同等になる。

計算ではモードⅡおよびモードⅢのK値も算出された。0.5pモデルでNiの場合、(2)式と同様に計算したモードⅡおよびモードⅢのK値の最大値はそれぞれ0.37と0.65で、モードⅠのK値と比較して小さい。

3.5 材料の影響 図13(b)に示すように、 F_{Iave} の平均は材料、き裂サイズによらずほぼ一定であるが、標準偏差は材料によって異なる。異方性の小さいWでK値のばらつきはほとんど見られないが、異方性の大きいCuの標準偏差は最も大きい。これは、弾性異方性が大きくなることで、多結晶体中での応力分布の不均一性が増加し、K値の標準偏差が大きくなったためと考えられる。図13の結果から、異方性の大きさ β 、き裂サイズ p および F_{Iave} の標準偏差 S との関係を近似し、次式を得た、

$$S_v = \left(-0.00458\beta^2 + 0.0344\beta - 0.0293 \right) e^{\frac{-p-0.5}{14.0}} + (0.0276\beta - 0.0282) e^{\frac{-p-0.5}{-0.374\beta+1.27}} + (0.0522\beta - 0.0525) e^{\frac{-p-0.5}{1.1}} \quad (3)$$

ここで、 β は次式で与えられる

$$\beta = \frac{2(S_{11} - S_{12})}{S_{44}} \quad (4)$$

図14に(3)式の関係と、図13の計算結果を併せて示す。 $\beta=1$ となるWでは標準偏差はほとんど0であるが、 β が増加するにしたがって標準偏差も大きくなり、 β と標準偏差はよい相関関係を示している。これより、材料の弾性異方性とき裂サイズから(3)式を用いて多結晶体中のミクロなK値の統計的な変化を推測できる。

4. 結 論

単結晶モデル、き裂サイズの異なる4種の多結晶モデルを用いて、ミクロなK値について解析し、以下の結論を得た。

- 1) 単結晶中のミクロなK値は、結晶方位に依存する。その変化幅は、き裂前縁に沿った無次元化K値の平均 F_{Iave} で0.687から0.745の間であると考えられる。
- 2) 多結晶き裂体のミクロなK値は、結晶方位の組み合わせによって単結晶中より大きな変化を示した。それは、多結晶体中の応力の不均一な分布が要因である。

- 3) ランダムな結晶方位の多結晶き裂体のミクロなK値は正規分布にしたがう。その平均値は材料、き裂サイズに依存することなく、マクロなK値とほぼ同一である。一方、標準偏差はき裂サイズが小さくなるほど、また材料の弾性異方性が大きくなるほど、大きくなる。
- 4) き裂サイズと材料の弾性異方性よりミクロなK値分布の標準偏差を求める近似式を得た。

文献

- (1) Paris, P.C. and Erdogan, F., A Critical Analysis of Crack Propagation Laws, *Transaction of the ASME Ser. D85* 528 (1963), 528-534.
- (2) *Data Book on Fatigue Crack Growth Rates of Metallic Materials*, (1983), The Society of Materials Science, Japan.
- (3) Shack, W. J. and Kassner, T. F., Review of Environmental Effects on Fatigue Crack Growth of Austenitic Stainless Steels, *NUREG/CR-6176* (1994).
- (4) Y. Murakami(Eds), *Stress Intensity Factors Handbook*, (1987), Pergamon Press.
- (5) Tada, H., Paris, P. C. and Irwin, G. R. *The Stress Analysis of Cracks Handbook, Third Edition*, (2000), ASME Press.
- (6) *Boiler & Pressure Vessel Code Section XI 2002 Addenda*, (2002), ASME.
- (7) *Fitness-for-Service Code, JSME S.N.A 1-2002* (2002), Maruzen.
- (8) Hashimoto, K., Sakane, M. and Ohnami, M., Stress Intensity Factor for Semicircular Surface Crack Embedded in Si Single Crystal, *Nihon Kikai Gakkai Ronbunshu, A (Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A)*, 60-370 (1994), 317-323.
- (9) Hashimoto, K., Sakane, M. and Ohnami, M., Stress Intensity Factor for Cubic Single Crystal of Cu, Ni, Si, Al, and W, *Nihon Kikai Gakkai Ronbunshu, A (Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A)*, 61-586 (1995), 1218-1224.
- (10) Kitamura, T., Sumigawa, T. and Ohishi, K. Slip Behavior and Local Stress near Grain Boundary in High-Cycle Fatigue of Copper Polycrystal, *JSME International Journal, Series A*, 47-2, 92(2004), 92-97.
- (11) Sumigawa, T. and Kitamura, T., Nucleation of Slip Bands near Twin Boundary in High-Cycle Fatigue, *JSME International Journal, Series A*, 47-2, (2004), 98-105.
- (12) Kamaya, M. and Kitamura, T., Stress Intensity Factors of Microstructurally Small Crack, *International Journal of Fracture*, 124, (2003), 201-213.

- (13) Kitamura, T. and Ohtani, R., Creep Life Prediction Based on Stochastic Model of Microstructurally Short Crack Growth, *Journal of Engineering Materials and Technology*, 111, (1989), 169-175.
- (14) Tanaka, K., Mechanics and Micromechanics of Fatigue Crack Propagation, *Fracture Mechanics: Perspectives and Direction, ASTM STP 1020*, (1989), 151-183.
- (15) Navarro, A. and Rios, E. R., A Microstructurally-Short Fatigue Crack Growth Equation, *Fatigue and Fracture of Engineering Materials and Structures*, 11, (1988), 383-396.
- (16) Wang, Y. Z., Ebtehaj, K., Hardie, D. and Parkins, R. N., The Behaviour of Multiple Stress Corrosion Cracks in a Mn-Cr and a Ni-Cr-Mo-V Steel, *Corrosion Science*, 37, (1995), 1651-1675.
- (17) Pearson, S., Initiation of Fatigue Cracks in Commercial Aluminum Alloys and the Subsequent Propagation of Very Short Cracks, *Engineering Fracture Mechanics*, 7, (1975), 235-247.
- (18) Taylor, D. and Knott, J. F., Fatigue Crack Propagation Behaviour of Short Cracks, *Fatigue and Fracture of Engineering Materials and Structures*, 4, (1981), 147-155.
- (19) Tokaji, K. and Ogawa, T., The Growth Behaviour of Microstructurally Small Fatigue Cracks in Metals, *Short Fatigue Cracks*,ESIS 13, (1992), 85-99, Mechanical Engineering Publications.
- (20) Miller, K. J., The Behaviour of Short Fatigue Cracks and Their Initiation, *Fatigue and Fracture of Engineering Materials and Structures*, 10, (1987), 75-91.
- (21) Moevily, A. J., The Growth of Short Fatigue Cracks, *Materials Science Research International*, 4, (1998), 3-11.
- (22) Kamaya, M. and Kitamura, T., A Simulation on Growth of Multiple Small Cracks under Stress Corrosion, *International Journal of Fracture*, 130, (2004), 787-801.
- (23) Kamaya, M. and Kitamura, T., Stress Intensity Factors of Interacting Parallel Surface Cracks, *Nihon Kikai Gakkai Ronbunshu, A (Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series A)*, 68-671, (2002), 114-121.
- (24) Ngashima, S., Shugou Soshiki, (1984), 262, Maruzen (in Japanese).
- (25) *ABAQUS Standard User's Manual Version 6.3* (2002), ABAQUS, Inc.
- (26) Shih, C. F. and Asaro, R. J. Elastic-Plastic Analysis of Cracks on Bimaterial Interfaces, *Journal of Applied Mechanics*, 55, (1988), 299-316.
- (27) Kamaya, M., Stress Intensity Factors of Surface Crack with Undulated Front, *International Journal of Fracture*, to be published.