材料破壊への微視的アプローチ

クラックと結晶欠陥との相互作用

成 田 舒 孝* 東 田 賢 二**

1. はじめに

材料破壊は、基本的に原子間結合の切断によって生ずるが、その結合力のみならず材料組織などによっても強く支配される。例えば、組織制御された鉄鋼材料(マルエージ鋼など)の破壊靱性値は $100 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$ を越えるものが多く存在するのに対し、その鉄鋼材料を完全脆性体と見なして結合力のみを考慮した計算結果は $1 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$ 程度の小さな靱性値を与える。これは組織制御された材料の靱性値がクラック(き裂)先端近傍の応力緩和などによって実に100倍以上に達することを示している。しかし、これらの効果の詳細は従来の思考線上で把握しにくい点があり、上述の単なる応力緩和に対しても発想の転換を要する。例えば、クラック近傍の応力緩和は単なる塑性変形ではなくその変形の位置的変動に起因し、塑性変形勾配による転位集積などの逆応力が元の応力集中を打ち消す際におこすのである。そのため、材料組織はおもに導入結晶欠陥の集積挙動に強い影響を与え、靱性値を大きく変化させると解釈できる。これら効果は、上述の応力基準のみならず、クラックと欠陥の間に働く作用力からも表現でき、従来のエネルギー解放率や J 積分との関連について議論が可能となる。

本稿では、クラックと結晶欠陥の相互作用に対する2次元ならびに3次元解析の考え方を簡単に示し、次いで転位ならびに侵入型原子を含むクラック場の計算例を示して靱性値との関連を示す。

2. クラック場の力学状態

(1) 応力拡大係数と結晶欠陥

固体がクラック以外の結晶欠陥を含まず、外力 σ_A のみが作用している場合、鋭いクラック先端近くの応力 σ_{ij}^A は、そ

の先端を原点とした二次元極座標位置 (r, θ) において、

$$\sigma_{ij}^A = K \cdot f_{ij}(\theta) / \sqrt{2\pi r} \quad (1)$$

と表される。ここで、 K は負荷応力拡大係数あるいは単に応力拡大係数と呼び、 $K = \sigma_A (\pi a)^{1/2} M$ (a : 亀裂長さ、 M : 試片形状因子)と表され、また $f_{ij}(\theta)$ は θ に依存する関数である。

一方、クラック近傍に結晶欠陥が存在する場合、その欠陥による応力の伝達経路はクラック面を横切らずクラック先端近傍へ回り込むため、そこに応力集中が生ずる。この欠陥による応力 σ_{ij}^D は、クラック先端の極く近傍において、式(1)と同様に、

$$\sigma_{ij}^D = k_D \cdot f_{ij}(\theta) / \sqrt{2\pi r} \quad (2)$$

の形で表される。ここで、 k_D は欠陥による応力拡大係数である。外力と欠陥によるクラック先端近傍の応力 σ_{ij} は、重ね合せ原理によって、 $\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^A + \sigma_{ij}^D$ から、

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^A + \sigma_{ij}^D = (K + k_D) f_{ij}(\theta) / \sqrt{2\pi r} \equiv k \cdot f_{ij}(\theta) / \sqrt{2\pi r} \quad (3)$$

と求められる。ここで、 k 、すなわち

$$k = K + k_D \quad (4)$$

は局所応力拡大係数と呼ばれる。 k_D が負の場合、負荷 K よりも局所 k を減少させるので遮蔽効果を与え、逆に k_D が正の場合は k を K よりも強めるため反遮蔽効果を与える。

クラック先端や転位などの応力特異性を有する欠陥に働く力 F_k は、欠陥周りの閉曲線 S に沿う積分、すなわち、

$$F_k = \sum_j \int_S \left[W \delta_{jk} - \sum_i \sigma_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_k} \right] dS_j \quad (5)$$

から求められる⁽¹⁾。ここで、 W は歪みエネルギー密度、 δ_{jk} はクロネッカーの δ 記号、 u_i は i 方向の変位、 x_k は k 方向の座標である。式(5)と同じ形式の積分は Rice⁽²⁾ によって独立に J 積分として与えられ、応力-歪み関係が1価であれば非線形変形にも適用しうる例が示されている。

欠陥による応力と外力が共存する場合、式(3)とフック

* 九州工業大学教授；工学部物質工学科(〒804 北九州市戸畑区仙水町1-1)

** 九州大学助教授；工学部材料工学科(〒812-81 福岡市東区箱崎6-10-1)

Interaction of a Crack with Crystal Defects; Nobutaka Narita*, Kenji Higashida** (*Department of Materials Science and Engineering, Kyushu Institute of Technology, Kitakyushu. **Department of Materials Science and Engineering, Kyushu University, Fukuoka.)

Keywords: fracture, crack, crystal defect, dislocation, shielding, toughness, impurity, hydrogen, embrittlement

1996年11月29日受理

の関係を用いると式(5)を計算でき、クラック先端を前方(x_1 方向)へ進展させようとする作用力 F_1 は、モード I 成分のみを考慮すれば(II, III成分を含む場合も計算できる⁽³⁾),

$$F_1 = \frac{(1-\nu)k_I^2}{2\mu} \equiv \frac{(1-\nu)(K_I + k_{ID})^2}{2\mu} \quad (6)$$

と表される。ここで、 ν はポアソン比、 μ は剛性率、 k_I, K_I, k_{ID} はそれぞれモード I における k, K, k_D に対応する。この作用力が表面エネルギー 2γ を越えるときクラックが進展する場合、その臨界点は $F_1 = 2\gamma$ であり、 K_I の臨界値 K_{IC} は、

$$K_{IC} = \left(\frac{4\mu\gamma}{1-\nu} \right)^{1/2} - k_{ID} \quad (7)$$

と得られる。この式からわかるように、 K_{IC} 値は k_D が負(遮蔽)の場合に上昇し、正(反遮蔽)の場合に低下する。

(3) 結晶欠陥による局所応力場の 2 次元解析

本節では、2次元問題に適したグールサ関数を採用し、クラック面上における特定の応力成分をゼロとするようにクラック面に表面力を加えて、境界条件を満足させる解析法を示す。いま、クラックのない場合の結晶欠陥のグールサ関数を Φ_0, Ψ_0 、表面力による付加関数を Φ_1, Ψ_1 と表すと、クラックと欠陥を含む系のグールサ関数 Φ_D, Ψ_D は、

$$\Phi_D(z) = \Phi_0(z) + \Phi_1(z), \quad \Psi_D(z) = \Psi_0(z) + \Psi_1(z) \quad (8)$$

と書ける。ここで、複素変数 z は $z = x_1 + ix_2$ を表し、クラックは $\{x_1 \leq 0, x_2 = 0\}$ にあるとする。 Φ_0, Ψ_0 は容易に得られるので、この関数から付加関数 Φ_1, Ψ_1 を求めるには

$$\Phi_1'(z) = \frac{i}{2\pi z^{1/2}} \int_{-\infty}^0 \frac{t^{1/2} [\Phi_0'(t) + \Phi_0''(t) + t\Phi_0'''(t) + \Psi_0'(t)]}{t-z} dt \quad (9)$$

$$\Psi_1'(z) = \overline{\Phi_1'(z)} - \Phi_1'(z) - z\Phi_1''(z)$$

を用いればよい。ここで、第1式の積分変数 t はクラック面上の座標であり、積分はコーシーの積分定理を用いて容易に計算できる。関数の具体的な解は文献⁽³⁾⁻⁽⁶⁾にゆだねるが、得られた関数 Φ_D, Ψ_D の解を利用すれば、各応力成分が、

$$\begin{aligned} \sigma_{11} + \sigma_{22} &= 2[\Phi_D'(z) + \overline{\Phi_D'(z)}] \\ \sigma_{22} - \sigma_{11} + 2i\sigma_{12} &= 2[\bar{z}\Phi_D''(z) + \Psi_D'(z)] \end{aligned} \quad (10)$$

から求められる。また、同様に欠陥による応力拡大係数 k_D は、

$$k_D = \lim_{z \rightarrow 0} [2(2\pi z)^{1/2} \Phi_D'(z)] \quad (11)$$

を計算して得られる。

外力が加わった場合、負荷応力拡大係数 K を $K = K_I + iK_{II}$ (K_I, K_{II} はそれぞれモード I, II の負荷 K) と定義すれば、外力のみによるクラック場のグールサ関数 $\Phi_K(z), \Psi_K(z)$ は、

$$\Phi_K'(z) = \frac{\bar{K}}{2\sqrt{2\pi z}}, \quad \Psi_K'(z) = \frac{2K - \bar{K}}{4\sqrt{2\pi z}} \quad (12)$$

と求められる。これら関数を用いれば、外力下におけるクラックと欠陥を含む系のグールサ関数 $\Phi(z), \Psi(z)$ は、

$$\Phi(z) = \Phi_K(z) + \Phi_D(z), \quad \Psi(z) = \Psi_K(z) + \Psi_D(z) \quad (13)$$

から求められる。さらに、クラックや結晶欠陥に働く力 F は、式(5)を変形し、 F を複素形式で $F = F_1 + iF_2$ と表せば、

$$F = \frac{2\pi(1-\nu)}{\mu} \{ \text{Res}_{Z=Z_0} [\Phi'(z)]^2 + 2 \text{Res}_{Z=Z_0} [\Phi'(z)\Psi'(z)] \} \quad (14)$$

から求められる。ここで、 Z_0 は力 F が作用する欠陥の複素座標であり、クラックの場合にはその先端の座標を Z_0 とし、そこでの留数を得れば直ちに作用力 F が求められる。

(3) 結晶欠陥による局所応力場の 3 次元解析

クラック-欠陥系の 3 次元解析は、Rice⁽⁷⁾ によって部分的に初められ、その後 Bueckner⁽⁸⁾ によって示されたポテンシャル関数を用いて、いくつかの解析的手法が試みられている⁽⁶⁾⁽⁹⁾。いま、半平面クラックが $x \leq 0, y = 0$ に存在すると考え、点力が座標 (x, y, z) に作用する場合、クラック先端 $(0, 0, z')$ 近傍の基本場に対する Neuber-Papkovitch 型ポテンシャル関数 $G(x, y, z - z')$ は、次式で示される⁽⁸⁾⁽¹⁰⁾。

$$G(x, y, z - z') = -\frac{1}{4(1-\nu)\pi^{3/2}\zeta} \log \left(\frac{q + \zeta}{q - \zeta} \right) \quad (15)$$

ただし、 $\zeta = \sqrt{x + i(z - z')}$, $q = \text{Re}[\sqrt{2(x + iy)}]$ 。

欠陥を含む系に対する上式を用いた解析は、グリーン関数法による場合と同様に、欠陥に起因する固有(eigen)変形勾配を有する箇所と母相との境界面に分布点力を作用させて等価に記述し、その分布点力の大きさは固有変形勾配の大きさとフックの関係式を用いて導出する。実際の解析過程は紙面を多く費やすので他の文献⁽⁶⁾⁽⁹⁾⁽¹⁰⁾に委ね、ここでは結晶欠陥によるモード I の応力拡大係数 k_{ID} についてふれる。また、複雑さを避けるため、式(15)のポテンシャル関数を G と表し、微分表示は略して、 $(\partial G / \partial x) = G_{,x}$, $(\partial^2 G / \partial x \partial y) = G_{,xy}$ のように記す。

まず、バーガース・ベクトル (b_x, b_y, b_z) の転位ループ(形状 C)による z' 点での $k_{ID}(z')$ の計算式を示すと、

$$\begin{aligned} k_{ID}(z') &= -2\mu \left[\int_C \{ b_x(G_{,z} - yG_{,yz}) + b_z y G_{,yy} \} dx \right. \\ &\quad + \int_C \{ b_x((1-2\nu)G_{,z} + yG_{,yz}) \\ &\quad \left. - b_z((1-2\nu)G_{,x} + yG_{,yx}) \} dy \right. \\ &\quad \left. - \int_C \{ b_x y G_{,yy} + b_y(G_{,x} - yG_{,yx}) \} dz \right] \quad (16) \end{aligned}$$

のように表される⁽⁹⁾。ここで、積分は転位ループ C に沿って行う。転位が 1 本の直線転位の場合には、ループの一部をその転位に沿わせ、他の部分を無限遠へ拡張して積分すればよい。上式で示したモード I 成分のみならず、モード II, III の計算式も同様に求められている⁽⁹⁾。

次に、点欠陥の場合を取り上げる。いま、点欠陥が固有ひずみの垂直成分のみを有し($\varepsilon_{xx}^*, \varepsilon_{yy}^*, \varepsilon_{zz}^* \neq 0$)、かつ、 x 軸と z 軸方向の固有ひずみが等しく、 y 軸方向の固有ひずみが異なっているとしよう($\varepsilon_{xx}^* = \varepsilon_{zz}^* \neq \varepsilon_{yy}^*$)。表示を単純にするため、 $\varepsilon^* = (\varepsilon_{xx}^* + \varepsilon_{yy}^* + \varepsilon_{zz}^*)/3$, $s = \varepsilon_{yy}^*/\varepsilon_{xx}^* = \varepsilon_{yy}^*/\varepsilon_{zz}^*$ と表すと、点欠陥

によるモード I の応力拡大係数 k_{ID} は,

$$k_{ID}(z') = 2\mu \int_{\Omega} \left\{ \frac{3\epsilon^*}{2+s} [(1+2\nu+s)G_{,yy} - (s-1)yG_{,yyy}] \right\} dx dy dz \quad (17)$$

を用いて計算される。ここで、 Ω は点欠陥の領域(固有歪みの存在する領域)であり、積分はこの領域の範囲で行えばよい。なお、上で示したモード I のみならず、モード II, III の応力拡大係数についても同様の計算式を示すことができる。

3. 結晶欠陥と破壊靱性値

(1) 転位による遮蔽効果

引張応力の負荷による転位への作用力の方向を考慮すると、クラック先端からは負の k_{ID} をもたらす転位が導入されると予想される。つまり、外力条件からは遮蔽転位が導入されるであろう。このため、導入転位を外力の除去後も残留させれば、クラック先端近傍に負の k_{ID} に対応する圧縮応力場が生ずるはずである。実際、著者らは顕微光弾性法を用いたイオン結晶の観察によってその存在を立証している⁽⁵⁾⁽¹¹⁾⁻⁽¹³⁾。また、このような圧縮応力場の強さ $|k_{ID}|$ とそれによる靱性値増大量との対応性を調べた測定結果では、両者がほぼ一致することを示し、さらにクラック鈍化の靱性値への寄与は $|k_{ID}|$ の効果の約1/2であることを得ている⁽⁵⁾⁽¹¹⁾。つまり、転位活動による靱性値増大量の2/3が $|k_{ID}|$ に起因し、残りの1/3がクラック鈍化によって増加する。ただし、この実験結果は、クラック先端からの転位の移動距離が比較的大きな単結晶の例であり、微細組織を有する材料では転位がクラック先端近傍にとどまる傾向が強いので、転位当たりの $|k_{ID}|$ が大きくなり、クラック鈍化に比して $|k_{ID}|$ の効果が増すはずである。細粒化などの組織制御は $|k_{ID}|$ を効率的に大きくするため、高靱性化の有効な手段といえる。

次に、 $|k_{ID}|$ あるいは靱性値と個々の転位との関係について取り上げる。もし、クラック近傍の各転位を観察できれば、前節で述べた力学解析から $|k_{ID}|$ が計算できるので、靱性値との対応を調べることが可能となる。まず、エッチピット法を用いて NaCl 結晶を観察した結果、導入転位数が数百本以下の範囲では、転位の座標測定値から計算される $|k_{ID}|$ が靱性値増大量とほぼ一致するが、導入転位が多くなると、両者が一致しなくなる傾向を示した⁽¹⁴⁾。エッチピット法は転位の解像度に限界があり、また表面観察のため結晶内部での転位構造が不明であるなどのため、導入転位が多い場合の不一致の原因はまだ完全には明らかにされていない。

透過電顕法もクラック先端近傍を観察する方法として利用されているが⁽¹⁵⁾⁽¹⁶⁾、観察をもとに $|k_{ID}|$ を計算した例がないので、ここでは著者らの行った MgO 結晶の結果を示す。図1は、クラックを有する MgO 薄膜に導入された転位の透過電顕像である。薄膜において導入される転位は、図2(a)

図1 MgO 結晶のクラック先端近傍における転位配列の透過電顕像。

に示すようにクラック先端と平行ではなく傾いた面に存在するが、像の解析結果はいずれも遮蔽転位であることを示した。図2(b)は、観察された転位配列をもとにクラック先端に沿う k_D の値を計算した1例である。注目すべきは、転位が傾いた面に存在するにも拘わらず、モード II, III の成分はほぼゼロになり、モード I の k_{ID} 値のみが負の値をとることである。この結果は、薄膜であってもモード I の外力が加わると、これを有効に遮蔽する転位配列の生ずることを示している。図の k_{ID} は $-0.07 \text{ MPa} \cdot \text{m}^{1/2}$ 程度の値を示すが、その絶対値は(010)クラックと垂直に外力を加えた場合の靱性値増大量とほぼ一致する。ただし、靱性値はバルク試料で得られるものであるので、坂らの方法⁽¹⁶⁾を用いた電顕観察によってそれらを今後検証する必要がある。

(2) 点欠陥による効果

侵入型原子などの点欠陥は周りに応力場をもつので、クラック先端近傍に k_D 場をもたらす。この k_D 場の符号や大きさは点欠陥の位置に依存し、例えば、侵入型不純物の場合、図3に示すように点欠陥がクラック前方に存在すると正(反遮蔽)となり、後方にある場合、負(遮蔽)の k_D 場をもたらす⁽⁵⁾⁽⁶⁾。水素の場合について相互作用を考慮してクラック近傍の水素分布を計算すると、図4のようにクラック先端の前方に分布する傾向があり、その傾向は異方性のある欠陥ほど強まる⁽⁶⁾。つまり、易動性侵入型不純物の場合、クラック前方近くに分布して反遮蔽効果をもたらす、靱性値の低下をもたらすと予想される。このような靱性値低下は、水素のみならず、ヘリウムのプラズマ添加中にも観察される⁽⁵⁾。また、炭素原子や窒素原子による青熱脆性は、一般に転位の動歪み時効による脆化と説明されているが、動歪み時効による変形応力の増大量は脆化を説明するほど大きくなく、上述の反遮蔽効果による脆化を強く示唆している。易動性侵入型不純物による脆化の特徴は、クラックが緩慢成長する点にある。これは、クラック前方の不純物分布によってその領域をクラックが進展すると遮蔽場が変わるので、さらにクラックの再進展には前方への不純物の移動を要するためと考えられる。金属材料に見られる不純物による顕著な靱性値低下は、粒界脆化や前述の反遮蔽効果などによると考えられるが、いずれの場合も、結合力や k_D の不純物によるわずかな変化が転位遮

図2 クラック前方の転位配置とそれによる応力拡大係数.
(a) 転位配置の模式図. (b) 電顕写真の転位配置から計算された k_D 値のクラック先端に沿う変化.

図3 応力拡大係数 k_{ID} に対する不純物原子の位置・異方性の効果. (a), (b) クラック先端より前方および後方の不純物原子と k_{ID} の模式図. (c), (d) それぞれ図 a, b の位置に対する k_{ID} のクラック先端に沿う変化 (計算は Fe 中の H の場合で, $\epsilon_{yy}^*/\epsilon_{xx}^*=1$ と 2, $\rho=0.5$ nm に対応する).

蔽を顕著に弱め, 靱性値を大きく低下させることが示される⁽⁵⁾.

4. おわりに

本稿では, おもに転位と不純物原子に注目して, それらの

図4 クラック先端近傍の水素分布 (クラックは太線で示す. Fe 中の H の例で母相中に 4 質量 ppm の H を含む).
(a) $\epsilon_{yy}^*/\epsilon_{xx}^*=1$ の場合, (b) $\epsilon_{yy}^*/\epsilon_{xx}^*=2$ の場合.

クラックとの弾性的相互作用について示した. これら計算の最終目標は材料の靱性予測と高靱性化指針の構築にあるが, 単純な系⁽¹⁷⁾を除いてまだ未解決問題が多く, その目標に沿った十分な計算をするまでには至っていない. しかし, 着実な努力が続けられており, 1997年8月に開催される第5回破壊の基礎国際会議での報告を楽しみにしている.

文 献

- (1) J. D. Eshelby: *Solid State Physics*, Vol. 3, Ed. by F. Seitz and D. Turnbull, Academic Press, N. Y., (1956), 79.
- (2) J. R. Rice: *J. Appl. Mech.*, **35**(1968), 379.
- (3) I. -H. Lin and R. Thomson: *Acta Metall.*, **34**(1986), 187.
- (4) N. Narita, K. Higashida, T. Torii and S. Miyaki: *Mater. Trans. JIM*, **30**(1989), 895.
- (5) N. Narita, T. Shiga and K. Higashida: *Mater. Sci. Engr.*, **A176**(1994), 203.
- (6) N. Narita and K. Higashida: *Localized Damage IV*, Ed. by H. Nisitani, M. H. Aliabadi, S.-I. Nishida and D. J. Cortwright, Comp. Mechanics Publ., Boston, (1996), 727.
- (7) J. R. Rice: *Int. J. Solids Struct.*, **21**(1985), 781.
- (8) H. F. Bueckner: *Int. J. Solids Struct.*, **23**(1987), 57.
- (9) H. Gao: *J. Mech. Phys. Solids*, **39**(1991), 157.
- (10) H. Gao: *J. Mech. Phys. Solids*, **37**(1989), 133.
- (11) K. Higashida and N. Narita: *Lattice Defects in Ceramics*, Ed. by T. Suzuki and S. Takeuchi, Pub. Office JJAP, Tokyo, (1989), 39.
- (12) 成田舒孝: 東田賢二: セラミックス, **27**(1992), 288.
- (13) K. Higashida, N. Narita, M. Kamura, S. Minata, K. Matsunaga and R. Onodera: *Strength of Materials*, Ed. by H. Oikawa, K. Maruyama, S. Takeuchi and M. Yamaguchi, Jpn. Inst. of Metals, Sendai, (1994), 407.
- (14) N. Narita, K. Higashida and S. Kitano: *Scripta Metall.*, **21**(1987), 1273.
- (15) Y. Ikuhara, T. Suzuki and Y. Kubo: *Phil. Mag. Lett.*, **66**(1992), 323.
- (16) H. Saka and G. Nagaya: *Phil. Mag. Lett.*, **72**(1995), 251.
- (17) H. Higashida, N. Narita and K. Matsunaga: *Mater. Sci. Engr.*, **A176**(1994), 147.