

# 結晶粒の弾性異方性の応力拡大係数に及ぼす影響

## Effect of Elastic Anisotropy of Crystal Grain on Stress Intensity Factor

釜谷 昌幸 (Masayuki Kamaya)\*

**要約** 応力拡大係数 (K値) は機器構造物に発生したき裂の健全性評価に用いられる重要なパラメータで、通常は構造物が等方弾性であるという仮定のもと数値解析などにより算出される。多結晶体は巨視的には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大きくなる。したがって、結晶粒の弾性異方性を考慮して算出された微小き裂の応力拡大係数 (局所的なK値) は、同じ形状の等方弾性体条件下で評価されたK値 (マクロなK値) と異なる可能性がある。

本研究では、結晶粒の弾性異方性を考慮した局所的なK値のマクロなK値との差異を有限要素法により解析した。まず、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、局所的なK値が結晶方位の影響を受けて変化することを明らかにした。次に、多結晶モデルを用いて同じ結晶方位でも、隣接する結晶粒の拘束による影響を受けることを考察した。また、多結晶体中において結晶方位がランダムに変化した場合の統計的なK値の変化の傾向、およびそのき裂サイズとの関係を調べた。その結果、局所的なK値が結晶異方性の影響でばらつくこと、そしてそのばらつきが正規分布にしたがい、ばらつきの標準偏差がき裂サイズと共に小さくなることを明らかにした。そして最後に、K値の変化が微小き裂進展挙動に与える影響を考察した。

**Abstract** The stress intensity factor (SIF) is used widely for evaluating integrity of cracked components. Usually, the SIF obtained under isotropic elastic conditions is used for the evaluations. Although, macroscopic elastic behaviors of polycrystal materials can be considered isotropic, each crystal has anisotropic elastic properties. This implies that if the crack size is small and the influence of anisotropic elastic properties on the stress around cracks is significant, the SIF evaluated under anisotropic elastic conditions may differ from the SIF obtained under isotropic elastic conditions.

In the present study, the effect of anisotropic elasticity on the SIF was evaluated by using the finite element analysis (FEA). First, the SIF of semi-circular cracks located in a single crystal was evaluated. It was found that the SIF is affected crystal orientation. Secondly, FEA using a polycrystal model was performed. It was found that the change in the SIF was caused by crack tip crystal orientation as well as the deformation constraint from neighboring crystals. Finally, the statistical tendency of change in the SIF caused by the anisotropic elastic properties and the relationship with crack size were examined. The influence of the local SIF on crack growth behavior is also discussed.

**Keywords** Stress Intensity factor, Short Crack, Anisotropic elastic, Finite Element Method

## 1. 緒言

疲労やSCCなどではき裂進展速度と応力拡大係数 (K値) との間的一对一の相関関係があることが経験的に示されている<sup>(1)</sup>。したがって、試験によりこの相関係数を求めておけば、き裂サイズや応力状態などからK値を求めることで、き裂進展挙動を予測することが可能である。また、K値の算出には、多くのき裂形状や境界条件に対するK値を編集したハンドブック<sup>(2)</sup>などを用いることができる。したがって、K値を用いたき裂進展予測は工業的に広く行われてきた<sup>(3)(4)</sup>。

これらのK値の多くは、材料が等方弾性体であるという仮定のもと数値解析などにより算出される。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大きくなる。したがって、結晶粒の弾性異方性を考慮して算出された微小き裂の応力拡大係数 (以後、このK値を局所的なK値と呼ぶ) は、同じ形状の等方弾性体条件下で評価されたK値 (以後、マクロなK値

\* (株)原子力安全システム研究所 技術システム研究所

と呼ぶ)とは異なる可能性がある。

これまで微小き裂は、微視組織などの影響により進展速度が不安定であるなど、マクロなき裂とは進展挙動が異なることが指摘されてきた<sup>(5)(6)</sup>。マクロなき裂について経験的に示された、き裂進展速度とK値の相関が、微小き裂においても成立するとすれば、結晶粒の弾性異方性による局所的なK値の変化が、微小き裂の進展速度を不安定にする要因の一つとなっていると考えることができる。

本研究では、き裂の駆動力となるK値が、結晶粒の弾性異方性よりどのように変化するか有限要素法を用いて解析する。まず、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、次に多結晶中において隣接する結晶粒の拘束による影響を考察する。また、統計的なK値の変化傾向およびき裂サイズとの関係を把握するために、多結晶体中において結晶方位がランダムに変化する場合の解析を行った。そして最後に、K値の変化が微小き裂進展挙動に与える影響を考察した。

## 2. 単結晶中の表面き裂のK値

### 2.1 解析方法

単結晶中の半円き裂についての解析を行う。解析は有限要素法により図1に示すモデルについて実施した。き裂は深さ $a$ の半円形状で、境界の長さは $W=3a$ 、 $B=8a$ 、 $t=3a$ である。弾性定数として、ニッケル単結晶の結晶基準軸に対する弾性定数( $C_{11}=246.5\text{GPa}$ 、 $C_{12}=147.3\text{GPa}$ 、 $C_{44}=124.7\text{GPa}$ )を用いた。結晶方位は図1で定義するオイラー角で与える。

有限要素解析はABAQUS Ver.6.2<sup>(7)</sup>を用いた。このコードにおいては、K値は仮想き裂進展法によって得られる相互エネルギー開放率から求められる<sup>(8)</sup>。また、有限要素メッシュは高精度(最大誤差0.2%)が確認されたメッシュパターン<sup>(9)</sup>を用いる。き裂の先端部分には特異要素を用いており、20節点アイソパラメトリック要素で構成されている。き裂前縁の各節点において全部で37個のK値を算出した。

### 2.2 解析結果および考察

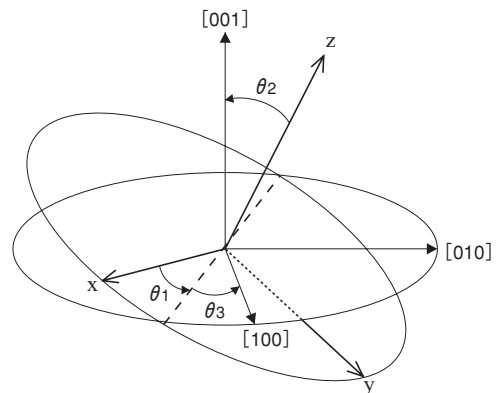
結晶方位を  $(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = (0, 0, 0)$ 、 $(0, 45, 0)$  および  $(45, 0, 0)$  (単位はいずれもdegree。以下同様とする)とした場合についての解析結果を図2に示

す。この図で示しているパラメータ $F_1$ はK値を次式で正規化した値である。

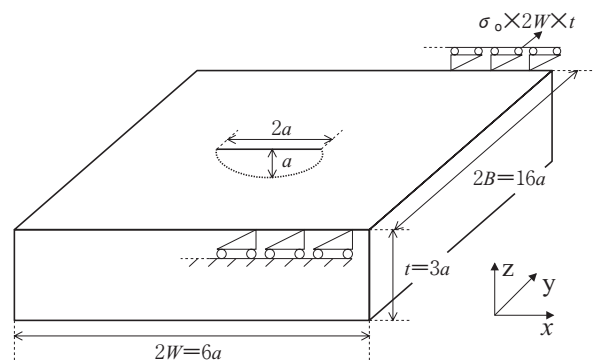
$$F_1 = \frac{K}{\sigma_0 \sqrt{\pi a}} \quad (1)$$

ここで、 $\sigma_0$ は負荷応力、 $a$ はき裂深さである。また、図2には結晶が等方弾性体であると仮定した場合のマクロなK値の場合の結果も示した。いずれの結果も $\phi=90^\circ$ で対称となった。しかし、方位の組み合わせによっては、必ずしも対象とはならないことが報告されている<sup>(10)</sup>。

K値は結晶方位に依存して変化している。また、その変化はき裂前縁で一定でなく、K値の絶対値、変化の大きさともに、ピークを示す位置は、方位によって変化している。また、ばらつきは等方弾性体の値をはさんで上下している。このように、弾性異方性を有する単結晶中に存在する表面き裂の局所的なK値は結晶異方性の影響で変化することが示された。



(a) 結晶方位座標系(x, y, z)に対するオイラー角の定義



(b) 境界条件

図1 モデルパラメータの定義SRT試験片の形状

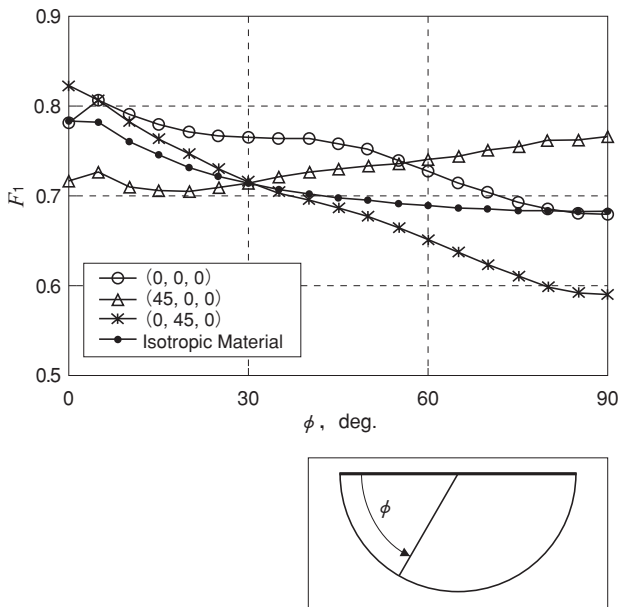


図2 単結晶モデルによって得られた正規化K値

### 3. 多結晶中の表面き裂のK値

#### 3.1 解析方法

実際の結晶は単独で存在するのではなく、弾性異方性を持つ多数の結晶粒が互いの変形を拘束しあいながら存在する<sup>(1)</sup>。このような状況においては、先の単結晶の場合とは違い、隣接結晶粒の拘束の影響を考慮しなければならない。この拘束を考慮した場合の弾性異方性によるK値の変化を考察するために、図3に示すような、結晶粒を六角柱で模擬したモデルを用いた解析を行う。この図はモデルをき裂面で切断した様子を示している。き裂の前縁は3結晶粒にまたがって存在しており、さらにその周囲には方位の異なる結晶粒が配置されている。

モデルでは、図3に色分けした区分毎を結晶粒と仮定し、それぞれの結晶粒に図で示した $(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = (0, 0, 0)$ ,  $(0, 45, 0)$  および  $(45, 0, 0)$  の3種の結晶方位を規則的に与えた。境界の長さは図1と同じ設定にした。また、メッシュの精度は図2に示した高精度のメッシュと等方弾性体に対するK値の解析結果を比較することで確認した。誤差は、表面点での値を除くと最大でも0.2%であった。

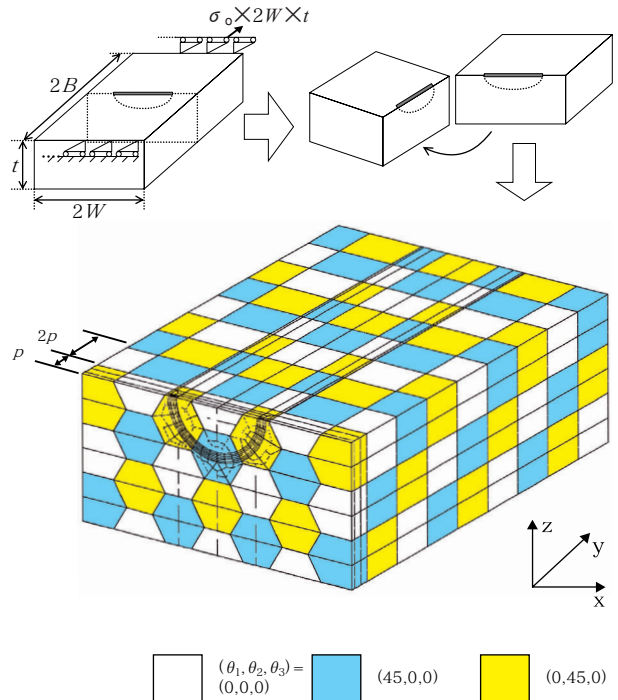


図3 多結晶モデルにおける有限要素メッシュパターンと結晶方位

#### 3.2 解析結果および考察

解析結果を図4に示す。 $\phi = 60^\circ$  ではき裂前縁が結晶粒界面と一致するため、K値が算出できない。図でSingle-Crystal Modelとあるのは、それぞれのき裂前縁部分のある結晶方位と同じ方位を持つ図2に示した単結晶モデルでの結果を示している。したがって、周辺の結晶粒の拘束がなければ、これらのカーブは一致する。き裂先端の結晶粒方位が $(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = (45, 0, 0)$ である $\phi \geq 65^\circ$ のき裂先端においては2つのK値はほぼ一致しているが、方位が $(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = (0, 45, 0)$ である $\phi \leq 55^\circ$ の先端においては、2つのK値は大きく異なっている。このことから、弾性異方性によるK値の変化は結晶方位のみならず、周辺結晶粒の拘束の影響、つまり境界条件の影響を受けることが分かる。

また、これらの解析ではモードIのみならず、マクロなK値では出現しないモードII、モードIIIのK値も算出された。ただし、これらの値は最大でモードIの0.1%であった。

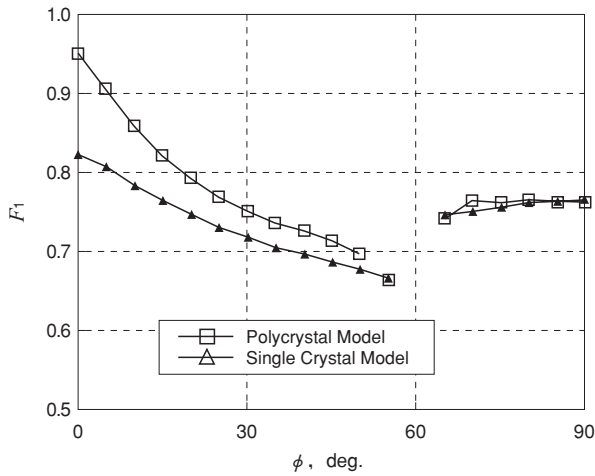


図4 多結晶モデルで得られた正規化K値と対応する単結晶モデルの値

#### 4. K値のばらつきとき裂サイズとの関係

##### 4.1 解析方法

これまでの検討で、結晶粒の弾性異方性によるK値の変化は、き裂先端結晶粒における弾性異方性の影響と、隣接結晶粒との変形の拘束という2つの影響によってもたらされることが示された。これらの影響を定量的に評価するには、き裂周囲の隣接した結晶粒の方位の組み合わせを考慮する必要があるが、組み合わせが膨大であることから統計的なアプロー

チが有利である。そこで、乱数を用いて結晶方位を与え、弾性異方性がK値に与える影響の統計的な傾向の評価を試みた。この影響はき裂と結晶粒との相対サイズにも依存すると考えられることから、図5に示す4通りのき裂サイズモデルについて評価を行った。モデルでは図3と同様に半円形のき裂と六角柱形状の結晶粒が仮定されている。き裂サイズを図で示した結晶粒のサイズを示す単位 $p$ を用いると、それぞれ $0.5p$ 、 $2p$ 、 $4p$ および $6p$ となる。また、これらのモデルに対応するき裂面断面のメッシュパターンを図6に示す。2 $p$ モデルのメッシュパターンは図3に相当する。境界長さは図3と同様に設定した。また、これらのメッシュパターンの精度は図3と同様に確認した。そして、それぞれの結晶粒の方位は乱数を用いて決定した。

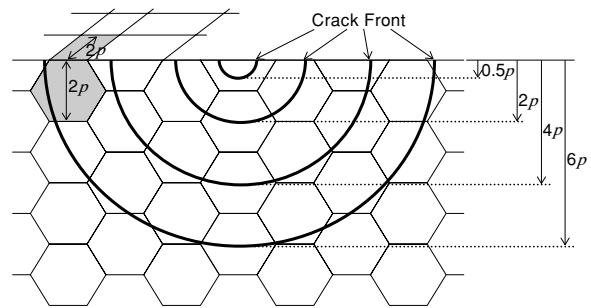
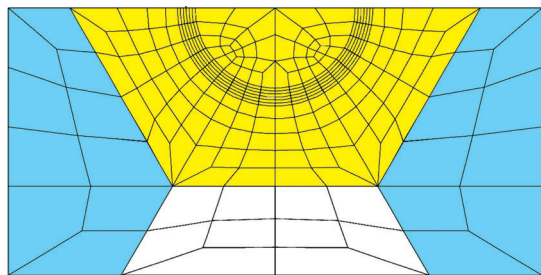
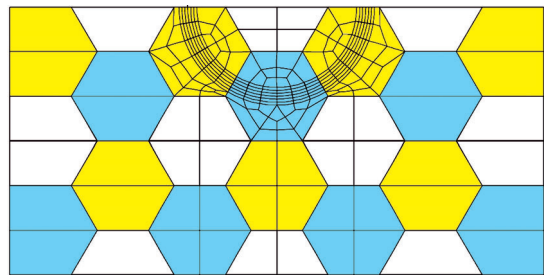


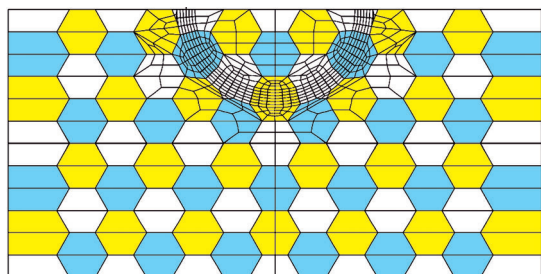
図5 多結晶モデルでの結晶粒サイズ ( $p$ ) とき裂サイズの関係



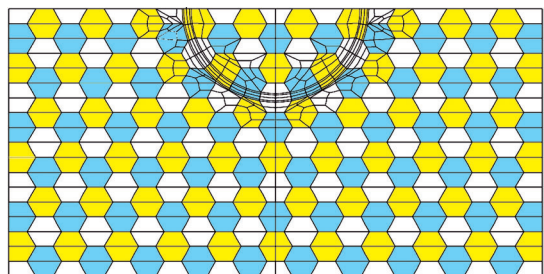
(a) 0.5 $p$ モデル



(b) 2 $p$ モデル



(c) 4 $p$ モデル



(d) 6 $p$ モデル

図6 多結晶モデルにおけるき裂断面での有限要素メッシュパターン

### 4.2 解析結果

それぞれのモデルについて、結晶方位の組み合わせを変化させた400パターンの解析を実施した。図8に代表3パターンについての解析結果と400パターン全ての結果におけるK値の変化幅およびマクロなK値を示した。2p, 4pおよび6pのモデルでは、き裂面断面において結晶粒界と節点が重なった点が存在するが、図4と同じくこれらの点においてK値は算出できない。K値の変化は、これらの重点を単位として大きくステップ状に変化している。つまり、K値がき裂前縁部の結晶方位の影響が支配的であることを示唆する。そして、同じ結晶粒内における比較的小さな変化は周辺結晶粒の拘束の影響による。400パターンにおけるK値の変化幅は、重点付近で大きくなる傾向にある。これは、重点近傍においては、隣り合う結晶粒同士の変形拘束によってK値の変化が大きくなるためである。このK値の変化幅は、き裂の結晶粒に対する相対長さが大きくなるにしたがって小さくなる傾向にある。そして、その変化の中心はマクロなK値となっている。

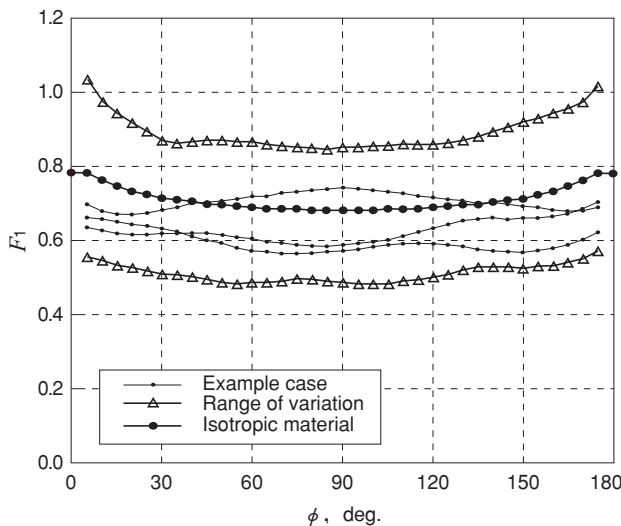
それぞれのパターン毎に、表面と接する節点を除いた正規化K値の平均値 $F_{1ave}$ を計算し、その分布を図9に示す。き裂の進展駆動力が $F_{1ave}$ で代表できると仮定すると、図9の分布は結晶異方性効果を考慮したき裂駆動力のばらつきを示すことになる。つまり、微小き裂におけるK値は、たとえ同じき裂サイズであっても巨視き裂のように一定ではなく、結晶異方

性効果の影響を受けてばらつくことになる。そして、き裂の結晶粒に対するサイズが大きくなるほどばらつきの幅が小さくなる。

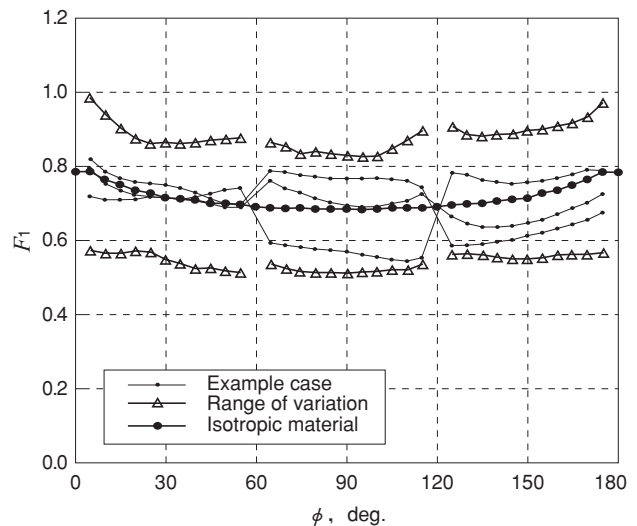
$F_{1ave}$ の平均値および標準偏差とき裂サイズの関係を図9に示す。また、図には最深点の正規化K値についての平均値および標準偏差も示す。いずれの場合も平均値はき裂サイズにほとんど依存しないが、標準偏差はき裂サイズが大きくなるにしたがって小さくなっている。したがって、十分大きなき裂では結晶粒の弾性異方性の影響は無視でき、局所的なK値はマクロなK値と一致する。K値のばらつきは、最深点のK値の変化に見られるように、隣接結晶粒の拘束の影響でき裂サイズとともに小さくなる。また、き裂サイズが大きくなるにしたがって、き裂前縁に接する結晶粒の数が増えることから、前縁の平均を用いた $F_{1ave}$ のばらつきの収束は、最深点のK値より大きくなっている。したがって、き裂サイズの増大に伴う $F_{1ave}$ の標準偏差の減少は、隣接結晶粒の変形拘束の影響によるばらつきの減少と、前縁に沿った結晶粒数の増加による平均化の2つの要因によってもたらされていると考えることができる。

長さ単位 $p$ と標準偏差 ( $V_{ave}$ ) の関係を近似すると次式を得ることができた。

$$V_{ave}=0.0248p^{-0.499} \tag{2}$$

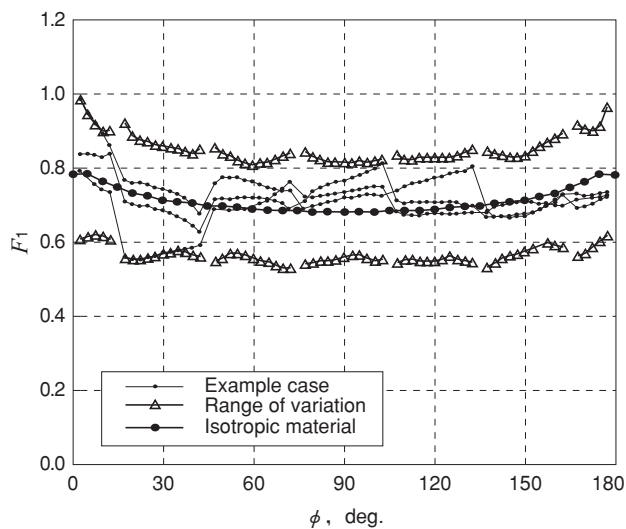


(a) 0.5pモデル

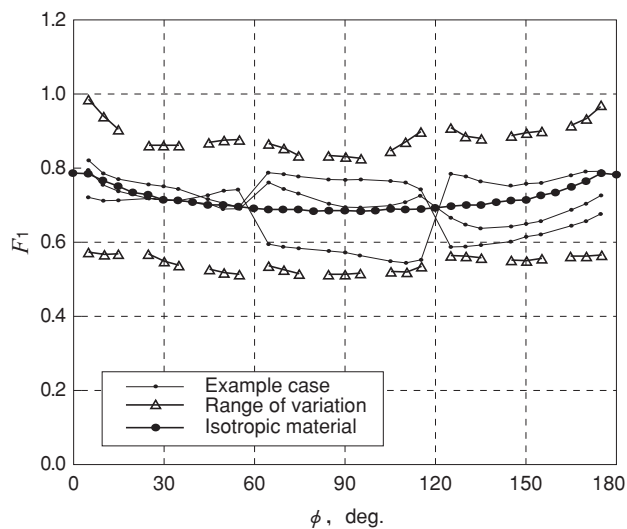


(b) 2pモデル

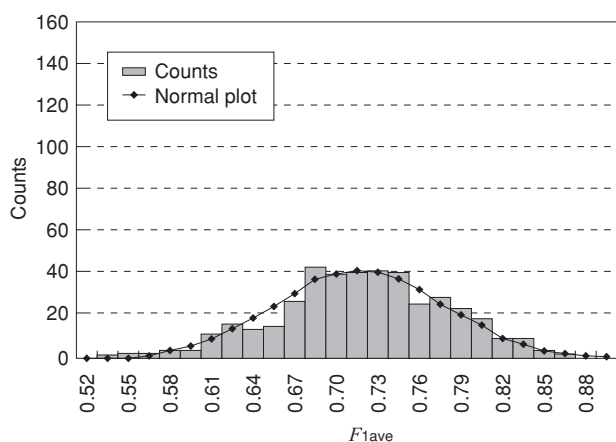
図7 多結晶モデルで得られた正規化K値とその変化幅 (N=400)



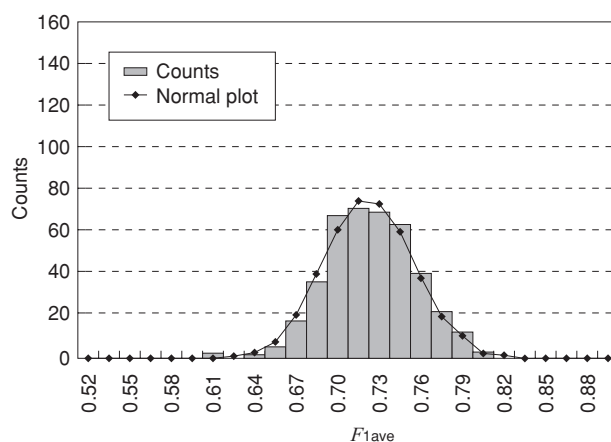
(c) 4pモデル



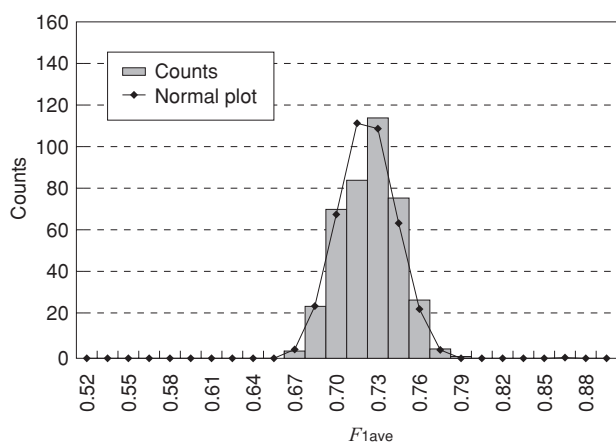
(d) 6pモデル

図7 多結晶モデルで得られた正規化K値とその変化幅 ( $N=400$ )

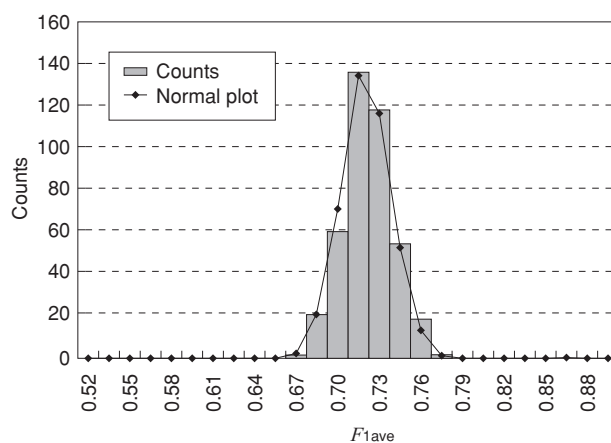
(a) 0.5pモデル



(b) 2pモデル



(c) 4pモデル



(d) 6pモデル

図8 正規化K値の平均値 ( $F_{1ave}$ ) の分布

### 5. き裂進展挙動への影響

これまでの検討で、結晶粒の弾性異方性により局部的にK値がばらつくことが示され、そのばらつきの大きさがき裂サイズの関数として得られた。この関係を用いて、異方性によるK値のばらつきのき裂進展速度に与える影響について考察する。

き裂進展速度とK値の関係が次式であらされると仮定する。

$$\frac{da}{dt} = D_p K^{m_p} \tag{3}$$

ここでは600合金の加圧水型原子炉一次系環境下での応力腐食割れを想定し、 $D_p = 5.24 \times 10^{-14}$ 、 $m_p = 3.46$ であると仮定する<sup>(12)</sup>。単位について速度はm/sec、K値はMPa√mで与えられる。また、K値は次式で表す。

$$K = F_{ani} F_o \sigma_o \sqrt{\pi a} \tag{4}$$

$F_o$ は形状パラメータに相当し、図9(a)から $F_o = 0.707$ とする。そして、 $F_{ani}$ は結晶粒の弾性異方性によるK値のばらつきを反映するパラメータである。(3)(4)式を用いて、マクロなK値とき裂進展速度の関係を求めると、マクロなK値では $F_{ani} = 1$ となるので、図10の実線のようにになる。ここで、 $\sigma_o = 1000$  (MPa)としている。これに対して、微小き裂においては、結晶粒の弾性異方性によって $F_{ani} = 1$ とはならない。そこで、 $F_{ani}$ を(2)式の $V_{ave}$ を用いて次式のように仮定する。

$$F_{ani} = 1 \pm V_{ave} \times 3 \tag{5}$$

ここで、 $\pm$ はそれぞればらつきの上下限を示す。そして、 $p = 25$  ( $\mu\text{m}$ )とした時の進展速度のばらつき範囲を図10に示す。速度のばらつきの幅は、き裂が大きくなると小さくなって、やがてマクロなK値に対応するカーブに一致する。速度のばらつきの大きさは、マクロき裂に対して $50 \mu\text{m}$ でおおよそ90%、 $100 \mu\text{m}$ で63%そして、 $1 \text{mm}$ では20%であった。

実構造物におけるき裂挙動を考えると、腐食環境下では多くのき裂が発生しやすい。そして、その中から限られたき裂がマクロなき裂に成長することになる。この中で最大サイズになるき裂は、微小き裂領域においても相対的に速い進展をすることが考えられる。したがって、最大サイズになるき裂の進展

を予測するには、マクロき裂に関して得られた(3)式を微小き裂領域にまで外挿したカーブ(図10の実線)ではなく、図10の局所的なK値を考慮した速度のばらつきの上限を包絡するカーブを用いて予測する必要がある。その意味で、本研究で求めた結晶異方性によるK値の定量的な変化量は重要である。

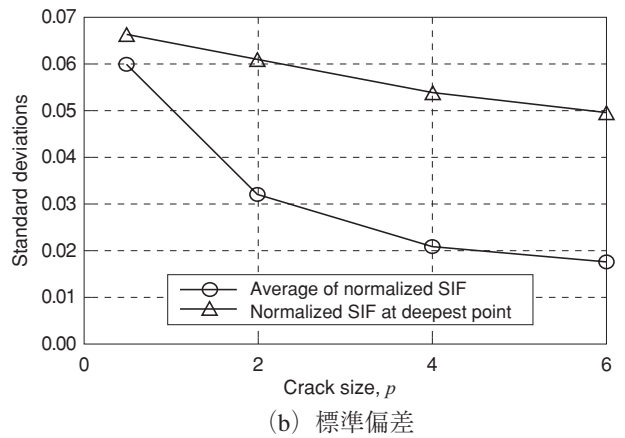
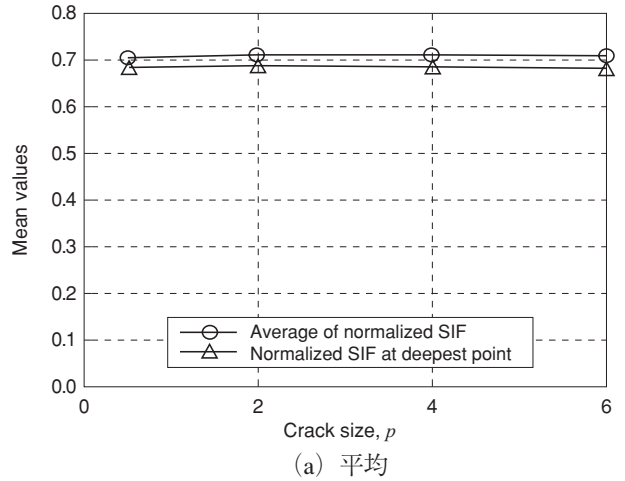


図9 き裂サイズと正規化K値の分布パラメータの関係 (N=400)

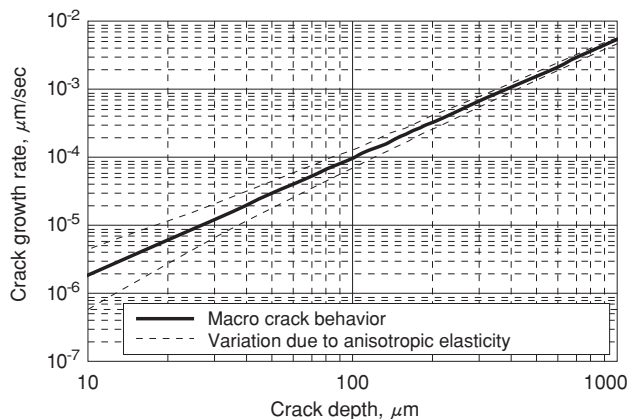


図10 き裂サイズとき裂進展速度の関係

## 6. 結言

本研究では、結晶粒の弾性異方性を考慮した場合のK値の変化について有限要素法による解析結果から考察を行った。その結果以下の結論を得ることができた。

- (1) 表面き裂では、弾性異方性の影響により結晶方位に依存してK値が変化する。
- (2) 多結晶中においては、隣接結晶粒による変形拘束の影響によってもK値が変化する。
- (3) 結晶方位がランダムに分布する多結晶中における弾性異方性の影響は、き裂サイズが大きくなるにしたがって小さくなる。
- (4) 分布定数とき裂サイズの間関係を定量的に示すことができた。
- (5) 微小き裂の進展予測には、(2)式で示したマクロき裂に関するき裂進展速度カーブを用いるのではなく、局所的なK値のばらつきを考慮したき裂進展速度カーブを用いる必要がある。

## 文献

- (1) P.C. Paris and F.Erdogan (1963), Trans ASME, Ser. D, 85, 528.
- (2) Y. Murakami, Stress Intensity Factors Handbook, Pergamon Press (1987).
- (3) ASME Boiler & Pressure Vessel Code Section XI (1998).
- (4) 発電用原子力設備規格 維持規格, JSME S NA 1-2000 (2000).
- (5) K. Tanaka (1989) Mechanics and micromechanics of fatigue crack propagation. In: Fracture Mechanics: Perspectives and Directions, ASTM STP 1020 (Edited by R.P.Weil and R.P.Gangloff) , ASTM, Philadelphia, pp.151-183.
- (6) A.Navarro and E.R.Rios (1988) A microstructurally-short fatigue crack growth equation. Fatigue Fract. Engng Mater. Struct. 11, pp.383-396.
- (7) ABAQUS/Standard User's Manual (2001) , HK&S, Inc.
- (8) C. F. Shih and R.J. Asaro (1988) Elastic-plastic analysis of cracks on bimaterial interfaces: part I- small scale yielding. J. of Applied Mech. 55, pp.299-316.
- (9) M. Kamaya and T. Kitamura (2002) Crack growth evaluation of interacting parallel surface cracks. In:Proc. The 4 th international workshop on the integrity of nuclear components, ASINCO, pp.121-130.
- (10) 橋本清司, 坂根政男, 大南正瑛 (1994) 半円表面き裂を有するシリコン単結晶の応力拡大係数, 日本機械学会論文集A編, 60, pp.317-323.
- (11) 北村隆行, 澄川貴志, 大石和義 (2001) 銅多結晶の高サイクル疲労下における粒界近傍すべり挙動と局所応力, 日本機械学会論文集A編, 67, pp.1819-1824.
- (12) M. Kamaya and N. Totsuka (2002) Influence of interaction between multiple cracks on stress corrosion crack propagation. Corrosion Science, 44, pp.2333-2352.