

多結晶体の粒界拡散クリープによる
キャビティの応力分布と成長

京都大学工学部 正 ○北村隆行, 正 大谷隆一
東芝 山中哲哉

1. 緒言

粒界拡散クリープ下のキャビティの成長については数多くの解析が行われてきているが、その大半は双結晶粒界上に周期的に存在するキャビティ群を対象としている⁽¹⁻³⁾。しかし、実用材料のクリープ破壊過程を考慮する上では、多結晶体中のキャビティの成長挙動を明らかにすることが重要である。また、粒界拡散は粒界面上の応力分布に律速されるため、キャビティ成長の解析には多結晶体の応力分布を明らかにしなければならない。Cocks^(4,5)は、粒界拡散クリープ下の任意の多結晶体における粒界上の応力分布を数値計算により求める方法を開発した。本研究では、この方法を用いて多結晶体中に存在するキャビティ近傍の応力分布を解析するとともに、キャビティの成長について検討した。

2. 粒界拡散クリープにおける多結晶体の応力分布の計算方法^(4,5)

ある粒界面に垂直応力 σ が作用するとき、この応力によって誘起される粒界面に沿った原子の流束 j は次式より与えられる⁽⁶⁾。

$$j = -(D_b \delta_b) / (kT) \cdot (\mu / x) \quad (1)$$

$$\mu = \mu_0 - \sigma \Omega \quad (2)$$

ここで、 D_b は粒界拡散係数、 δ_b は拡散層厚さ、 k はボルツマン定数、 T は温度、 x は粒界に沿った距離、 μ_0 はバルクの化学ポテンシャル、 Ω は原子容である。また、質量保存則より

$$V_n = -j / x \quad (3)$$

が成立する。ここで、 V_n は粒界への原子の堆積・流出速度であり、 V_n が正の場合は堆積を示し、負の場合は流出を示す。この粒界での原子の堆積・流出によりもたらされる時間依存性変形が粒界拡散クリープである。なお、本解析では以下の無次元化を行った。

$$\bar{j} = j / \dot{\epsilon} \cdot d^2 \quad (4)$$

$$\bar{x} = x / d \quad (5)$$

$$\bar{\sigma} = \sigma / \sigma_0 \quad (6)$$

$$\dot{\epsilon}_0 = (D_b \delta_b \Omega \sigma_0) / (kTd^3) \quad (7)$$

d は粒界長さ、 σ_0 は負荷応力である。

さて、任意の2次元粒界ネットワーク(例えば、図1(a)は六角形の結晶粒による粒界ネットワークである。)を考える。各粒界上の流速は三重点において

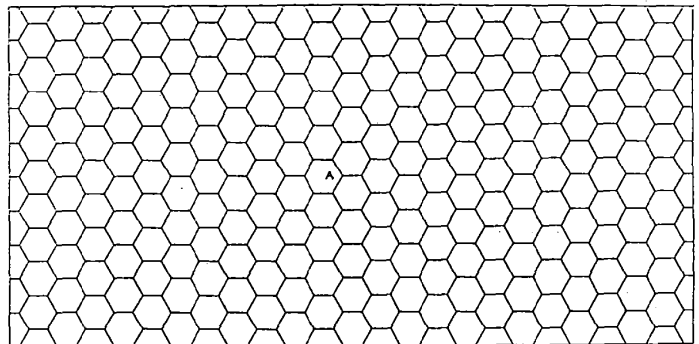
$$\sum \bar{j} = 0 \quad (8)$$

を満たす必要がある。Cocksは、この場合の系の汎関数 Φ は次のように与えられることを示した^(4,5)。

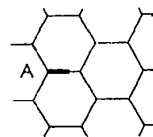
$$\Phi = \int_{\bar{A}} (\bar{j} \cdot \bar{j} / 2) d\bar{A} - \int_{\bar{S}} \bar{T}_i \bar{v}_i d\bar{S} + \sum (\lambda_n \bar{j}) \quad (9)$$

ここで、 \bar{T}_i と \bar{v}_i は表面 \bar{S} における表面力と変位速度、 \bar{A} は系内の全ての粒界、 λ_n はラグランジュの未定定数であり、各粒界両端における垂直応力に対応することが示されている。第三項は全ての三重点における総和である。各結晶粒を要素として領域を離散化し、 Φ が最小となる条件を求めると

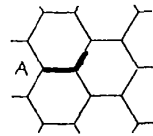
$$F = GU \quad (10)$$



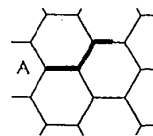
(a) 解析に用いた粒界ネットワーク



(b) $\bar{a}=0.6$ のキャビティ
(図(a)のA部近傍の拡大図)



(c) $\bar{a}=1.5$ のキャビティ
(図(a)のA部近傍の拡大図)



(d) $\bar{a}=2.5$ のキャビティ
(図(a)のA部近傍の拡大図)

図1 解析に用いた粒界ネットワークとキャビティ

の形で与えられる^(4,5)。ここで、 F は外力を示す行列、 U は粒界での原子の堆積・流出に伴う各結晶粒の変位速度・回転速度・各粒界中点における流束を要素とする行列、 G は剛性行列である。本問題は(10)式における未知の行列 U を求めることに帰着される。 U が求められれば、粒界上の応力分布は簡単に計算することができる。本方法の詳細は、Cocks らの原論文に詳しく述べられており、 G の具体的な求め方、および、 U から応力分布の導出方法についても示されている。なお、本方法は従来より応力解析に用いられている有限要素法と類似した解法であるが、要素は各結晶粒であることが大きく異なる点であり、少ない要素で結晶粒ネットワーク形状のクリープ変形に及ぼす影響が簡単に解析できる。

3. 計算条件

図1(a)に示す262個の六角形結晶粒(粒界数: 743)よりなる粒界ネットワークの上下端に一様単位応力が y 軸方向に負荷される場合について解析した。左右端は鏡像境界とした。図1(a)中央の粒界三重点(A点)を起点(左端)として、大きさの異なる(右端の位置が異なる)キャビティを導入した。計算を行ったキャビティの粒界に沿った長さ \bar{a} (粒界長さで無次元化)は、

$$\begin{aligned} \bar{a} &= 0.2, 0.4, 0.6, 1.0, \\ &1.2, 1.4, 1.5, 1.6, 1.8, 2.0, \\ &2.2, 2.4, 2.5, 2.6, 2.8, 3.0 \end{aligned}$$

である。図1(b)~(d)は計算を行ったキャビティの例($\bar{a}=0.6, a=1.5, a=2.5$)であり、太線部分がキャビティを表す。

なお、キャビティ内では垂直応力および原子の流束は零である。また、一般にキャビティ端での応力は負荷応力と比較して低い場合が多いため⁽³⁾、本解析では零として計算した。

4. キャビティの応力分布と成長

図2は、キャビティがない場合の垂直応力分布を粒界に沿ってプロットしたものである。横軸の節点番号は図2中に示す粒界三重点を示している。負荷応力軸と垂直な粒界(例えば、節点1~2)では応力が高いが、応力軸と $\pi/6$ をなす粒界(例えば、節点2~3)では応力が低く、負になる部分も認められる。式(1)と(2)より原子は引張り応力が高くなる方向へ流れるため、原子は応力軸に垂直な粒界に向けて流れることになる。これによって、応力軸方向に伸びが生じる(粒界拡散クリープ, Coble creep)。

図3は、キャビティが存在する場合のキャビティ前方の粒界面上の垂直応力の分布を示す。図中の太線で

示した応力が零の部分がキャビティである。図2と比較すると、キャビティによる影響が現れる範囲は数結晶粒程度である。また、キャビティが長くなるとともにキャビティ前方の応力軸垂直粒界で発生する引張り応力の振幅が大きくなっており、欠陥による応力集中の影響が現れる。

さて、式(1)と(2)より

$$dV/dt = (D_b \delta_b \Omega / kT) (d\sigma/dx)_{t1p} \quad (11)$$

である。ここで、 dV/dt はキャビティ体積成長速度であり、 $(d\sigma/dx)_{t1p}$ はキャビティ端における応力勾配である。すなわち、その成長速度は $(d\sigma/dx)_{t1p}$ の大きさに比例し、 $0 < (d\sigma/dx)_{t1p}$ の場合には、キャビティは成長し、 $(d\sigma/dx)_{t1p} < 0$ の場合には収縮する。したがって、図3のキャビティ端における応力勾配より、粒界キャビティの成長に及ぼす粒界ネットワーク(粒界の応力軸に対する角度や三重点の存在)の影響がわかる。

図3(a)と(b)より、キャビティ左端隣接粒界では、 $(d\bar{\sigma}/d\bar{x})_{t1p} < 0$ であるためキャビティは粒界三重点を越えて成長できない。一方、右端は $0 < (d\bar{\sigma}/d\bar{x})_{t1p}$ であるため、キャビティは右方向へ成長する。図4は、キャビティ端における $(d\bar{\sigma}/d\bar{x})_{t1p}$ をプロットしたものである。 $\bar{a} < 1.0$ においては、左端では $(d\bar{\sigma}/d\bar{x})_{t1p} < 0$ であり、粒界三重点を越えることができない。一方、右端ではキャビティが小さい時には成長速度は大きいですが、三重点($\bar{a}=1$)に近づくとともに減速される。すなわち、粒界三重点はキャビティ成長を抑制する働きを有する。 $\bar{a}=1$ では両端は三重点にあり、その絶対値は非常に小さいため強い拘束ではないものの、両端とも

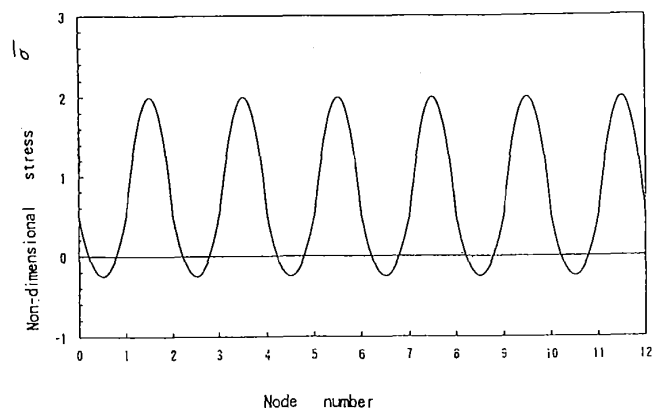
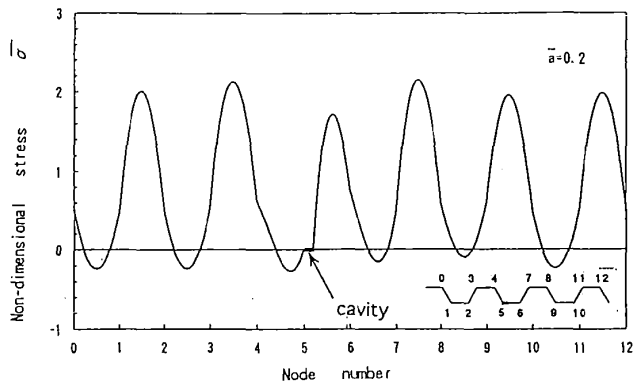
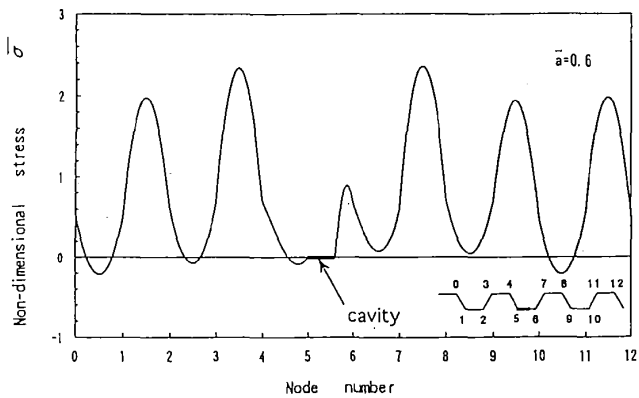


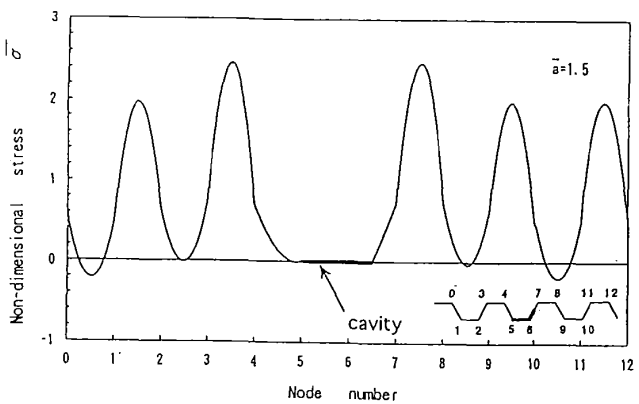
図2 キャビティがない場合の粒界に作用する垂直応力分布



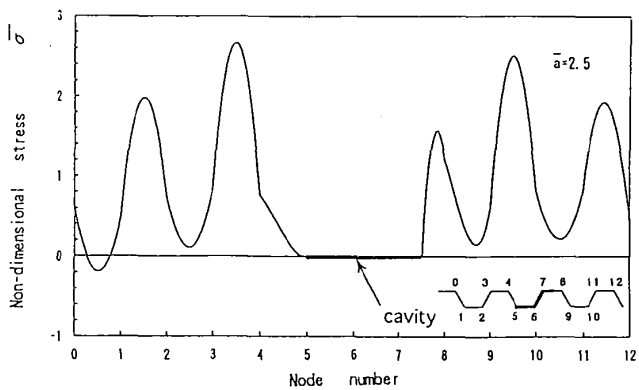
(a) $\bar{a}=0.2$ の場合



(b) $\bar{a}=0.6$ の場合



(c) $\bar{a}=1.5$ の場合



(d) $\bar{a}=2.5$ の場合

図3 キャビティ近傍粒界に作用する垂直応力分布

$(d\bar{\sigma}/d\bar{x})_{t1p} < 0$ であるためキャビティは成長しなくなる。

キャビティが一結晶粒界($\bar{a}=1$)を越えて成長した場合には(図3(c), 図4), 三重点を越えたキャビティ端(右端)では $0 < (d\bar{\sigma}/d\bar{x})_{t1p}$ であるため成長を続け, 成長とともにその成長速度が速くなる。一方, 三重点上の左端では $(d\bar{\sigma}/d\bar{x})_{t1p} < 0$ であるため, 依然として停留したままである。 $\bar{a}=2$ に至っても, キャビティの右端のみで $0 < (d\bar{\sigma}/d\bar{x})_{t1p}$ であり, キャビティは右方へ成長する。

キャビティが2結晶粒界($\bar{a}=2$)を越えると右端の成長速度は徐々に遅くなる。 $\bar{a}=2.5$ (図3(d), 図4)では左端における $(d\bar{\sigma}/d\bar{x})_{t1p}$ も正に転じ, 三重点を越えて左方へも成長し始める傾向が現れる。両端が三重点上にある $\bar{a}=3.0$ の場合には, $(d\bar{\sigma}/d\bar{x})_{t1p}$ が非常に小さく三重点の成長抑止効果が認められる。ただし, 両端とも $0 < (d\bar{\sigma}/d\bar{x})_{t1p}$ であるため停留には至らない。すなわち, キャビティが大きくなるとともに, 成長抑止効果は小さくなる。

5. 結言 省略
参考文献 省略

多結晶体の粒界拡散クリープによる応力分布解析方法
文献: (4) Cocks, A.C.F., Applied Solid Mechanics, Vol.3, Elsevier Applied Science, London & New York, pp.30-42(1989).

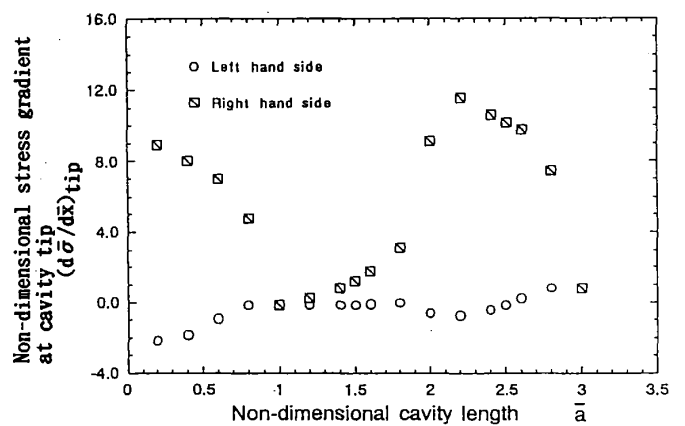


図4 キャビティ端における粒界垂直応力の勾配