破壊のメカニズム

玉川大学　工学部　　大橋一利

１。序論

四月中旬に基研の小貫先生から、基研研究会”パターン形成、運動およびその統計”において、破壊について報告して欲しいとのご依頼を受けました。その折、パターンに関する会議が世界各地において幾つも開かれているが、近年フラクチャー（破壊）を扱ったものが目立って来ているので、次の問いに答えるような内容でしゃべってほしいとの事でした。

（１）破壊において、何が問題か？
（２）何が統計力学に課せられているか？
（３）シミュレーションにおいて、何を知ろうとしているのか？。
（４）動的解析はどの程度なされているのか？

そこで最初に、問題（１）の”何が問題か？”から始めることにします。

私は物理学会の「格子欠陥分科」に所属していますが、この分科の研究課題の一つは”材料の強度”に関する研究です。材料の強度を決定している要素は何か？この問題から話を進めることにします。鋼材が持つ耐える能力（耐久力）を調べるのに、「引っ張り試験機」がよく利用されます。引っ張り試験機では単純な円筒状試料を用い、試料上の二点の印しの間の長さ　Ｌ　の内側の部分を試験します。両端の径の大きい部分を試験機で掴み、互いに反対向きの引っ張り力を加えます。引つ張り力　Ｆ　と長さ　Ｌ　を同時に繰り返し測定して、引張り力　Ｆ　と長さの変化　ΔL　の間の関係を求めるのです。ここで長さの変化（伸び）　ΔL　は変形後の長さと変形前の長さの差です。この引つ張り試験機を用いた結果を図１に示します。これより、引つ張り力が小さい場合には、伸びは引つ張り力に比例しており、いわゆるフックの法則が成立します。この領域内に入りうる程度の小さい力を加えた場合には、力を取り除くと試料は再び初めの形に戻ることができるので、変形は可逆的であると言えます。この様な性質を「弾性」と呼び、この場合の変形を「弾性変形」と呼んでいます。

更に、棒を引っ張る力を強めて行くと、点ａ　において、可逆的弾性が破れ、不可逆的な「塑性変形」が始まります。塑性変形を生じる領域では、力をわずかに増加させただけで大きい変形が生じてしまいます。この塑性領域の状態にある試料に加えている力を取り除いても、変形は消えずに残ってしまい、この消えずに残ってしまった歪みを「残留歪み」と呼びます。更に、金属棒を引っ張る力を増して行くと、試料は最後には力を支え切れずに、点ｆ　において破壊してしまいます。

一般に、塑性変形を示す物質を「延性物質」と呼んでいますが、物質の中には弾性領域からごくわずかの塑性変形で破壊に進行してしまうような材料もあります。この

様な性質を示す材料を脆性的であると呼びます。材料が脆性的振る舞いを示すからと言って、ただちに材料が力学的に弱いと判断することは適切ではありません。物体が脆性的であることは、それを構成している原子間の結合を切断するのに必要な力が、変形を生じるのに必要な力より少なくて済むという事を示し、一方、延性的であることは、原子間の結合力より弱い力で塑性変形が生じることを示しているのです。

2。転位と塑性変形

固体材料に極端に強い力を加えると、材料はその形を永久に変形してしまいますが、この変形には、（1）塑性変形と（2）破壊という二通りのものがあります。

最密六方構造であるカドミニウムや亜鉛の単結晶に外力を加えて引き伸ばすと、塑性変形によって結晶内の特定の結晶面に沿って”すべり”が生じるのがわかります。このすべりは、顕微鏡で十分に見える程度の、ﾄﾗﾝﾌﾟのｶｰﾄﾞをずらしたような無数の階段となって単結晶の表面に表われ、このすべりの模様を「すべり帯」と呼んでいます。この滑りの形は、結晶構造によって大きく影響され、一般に滑り面は原子密度が最大である最密面の面において生じます。これは、原子密度が最も密であるような面の間の間隔が、ほかの面間隔に比較して大であるためであり、この面上での滑りに対して抵抗が最も少ないためです。滑りは一原子間距離を単位として起こり、そのすべり方向は原子間隔が最も小さい最密方向に生じます。亜鉛では、最密面である基底面 (0001) がすべり面になり、そのすべり方向は最も原子間隔が狭い六角形の対角線方向 ‹1120›に一致します。

完全結晶にずれ変形を起こさせるときの抵抗力、すなわちすべり変形における完全結晶の強度を求めてみます。結晶には周期状態を破るような欠陥が含まれないので完全に均一であると仮定すると、すべり面上のある特別の個所が弱いと考えられず、滑りは滑り面の全面に渡って「同持」に進行するはずです。従って、完全結晶の臨界ずれ応力は、滑り面上に位置する原子群を一括して、滑り面の下側に位置する原子群に対して滑らせるのに必要なせん断応力に等しいと仮定できます。

すべり方向に並ぶ原子の中心間の距離を b 、すべり面に平行な原子間の間隔を a とし、すべり面の下側の原子面に対して上側の原子面をいま u だけずれ変位させたとすると、せん断歪みは $\varepsilon = u/a$ となり、これにﾌｯｸの法則を適用させると、ずれ応力は $\tau = G\varepsilon$,ここで G はずれ弾性率（剛性率）です。このせん断応力（ずれ応力）をさらに作用すると、すべり面の上側の原子は下側の原子の谷を上り、その原子の頂上に達してから再び次の原子の谷に落ちます。この結果、一原子距離の変位が生じたことになります。そして、これよりせん断応力は変位 u の周期関数となっていることがわかります。応力 の変位 u への依存性を表現している近似関数として正弦関数が考えられます：

$$\tau = \tau_c \sin\left(\frac{2\pi u}{b}\right)$$

ここで τ_c は臨界せん断応力と呼ばれています。弾性変形内では変形量が小さいために、変位 u も小さいとすると、

$$\tau = \tau_c \times \left(\frac{2\pi u}{b}\right)$$

ﾌｯｸの法則　τ =G(u/a) と比較すると、臨界せん断応力 τ_c は

$$\tau_c = \left(\frac{G}{2\pi}\right)\left(\frac{b}{a}\right)$$

で、b=a, π =3 とすると、 τ_c =G/6 となる。即ち、完全結晶の臨界せん断応力は剛性率 G の六分の一程度になります。しかし、この様にして求めた理論的せん断応力は、実測より得られる単結晶の降伏応力に比較して、四桁から五桁程度大きい値になっています（表１）。

この様な違いが生じた原因は、結晶に発生した滑りは、滑り面上の原子群が一括して滑ることにより生じると仮定したことに問題があるのです。ｵﾛﾜﾝ､ﾎﾟﾗﾆｰ､ﾃｲﾗｰ達は、1934年に、この矛盾を説明するために転位の概念を導入しました。この説は、すべりはすべり面全面で同時に起こるのではなく、滑り面の一部でまず起こり、そのすべった部分が他の部分に拡がっていき、やがてすべり面全面に及ぶという考えです。このすべり面上で、すでにすべった区域とまだ滑っていない区域の境界線を「転位線」と名ずけています。線状欠陥である転位は、刃状転位とらせん転位の二種に大別されます。そして、すべりの大きさと方向を表示する量がﾊﾞｰｶﾞｽ　ﾍﾞｸﾄﾙ　b で、転位論においては重要な物理量です。

転位は原子間距離の周期で変化するﾎﾟﾃﾝｼｱﾙの場の中を移動するので、飛び越えねばならないﾎﾟﾃﾝｼｱﾙの山があります。山の高さをﾊﾟｲｴﾙｽ ﾎﾟﾃﾝｼｱﾙ　と呼んでいます。転位の移動に伴う滑り面上での原子配置の変化に関しては、転位線から遠い部分ではその配列が変化しないので、このﾎﾟﾃﾝｼｱﾙを決定する要素は転位芯の部分（数原子長さ）における滑り面の上下の原子配列の違いと、これらの原子間の結合力の強さです。このことより、転位を動かすのに必要なせん断応力は転位芯を構成している原子を動かすのに必要な応力で、転位芯の幅が広いほど、転位を移動させるのに必要なせん断応力は低い値で済み、ﾊﾟｲｴﾙｽ応力は　$\tau_p = 2.4\times10^{-4}\,G$　で与えられます。

３。破壊の形態

破壊は、応力の存在の下に、物体が二つ以上の部分に分離する現象であるとします。破壊には。次のような種々の形式があって、これらはそれぞれ違った過程に支配されています。すなわち、

（１）脆性破壊

（２）延性破壊

延性の異なった材料の棒状試験片を、引っ張り破断させた場合の巨視的な状態を図２に示します。A-B-Cの順に延性が大きくなっています。Aは脆性破壊と呼ばれ、塑性変形を起こさずに引っ張り方向に垂直な平面で破断してしまいます。B.Cでは材料に「くびれ」が見られ、この現象は転位の発生およびその運動の過程を含んでいて塑性破壊、即ち延性破壊と言われています。延性破壊では、くびれを生じ、局部的な収縮が起こり、その後、くび

れの中心部が応力最大になるため、中心部では析出物や介在物などの微粒子が核となって、微小空洞(ﾎﾞｲﾄﾞ)が発生し、これらのﾎﾞｲﾄﾞがつながる形で亀裂が形成され、周辺に向かって伝播して、破壊に達します。

４。へき開破壊

塑性変形せずに破壊する材料を亀裂材と呼んでいますが、この様な脆性的性質を示す代表的な材料には、陶器、ｶﾞﾗｽなどがあります。材料が破壊を起こすには、破壊の核となる「亀裂（ｸﾗｯｸ)」の存在が前提条件になります。即ち、製造過程を経て部材中に生じた微細な亀裂、または初期に存在していなくとも、使用中になんらかの原因で発生した微視亀裂が、外力または環境によって暫時あるいは急速に成長した結果、破壊は起こるものです。したがって、「破壊過程」は「亀裂の発生」と「亀裂の伝播」の二つの過程から構成されています。

転位は結晶の塑性変形の実験において観測される煎断応力が理想的な値より極めて小さいことと関係しており、一方、亀裂は完全結晶の理想的な引っ張り応力より現実の材料の破壊応力が極めて小さいことの原因になっています。

結晶のある特定の面が割れ易いことをへき開と呼びますが、結晶において見られる脆性破壊は、一般にこのへき開面に沿って生じるへき開破壊を意味します。このへき開破壊は結晶の最密面に垂直に作用する応力成分によって生じ、へき開面で結晶を分離する形で進行します。塑性変形では転位が重要な役割を果たしますが、破壊では亀裂が主役となります。亀裂がいかに重要な役割を演じるかを知るために、亀裂を含まない完全結晶のへき開破壊について先ず調べることにします。”理想的へき開破壊強度”という言葉は、ある結晶面においてへき開破壊を生じさせるのに必要な応力を、微視的には結晶を構成する原子の結合が、引っ張り応力で破断されることを意味しています。

図３に示すように、格子間隔 a の立方格子が引っ張り応力 σ を受けている場合を考えます。格子面 (XX') 上でへき開破壊が生じるのに必要な応力を推定してみます。そのためには、破面上の対をなす原子間に働く力 F の単位面積当りの力、即ち応力を知る必要があります。破壊が生じるのに必要な力は、破面上の原子対を分離するのに必要な力に等しいとして、結晶中のほかの原子の影響を考慮せずに、破壊強度の大きさを推定してみます。原子対に働く力は引力と反発力の和から成り立っていて、その結合力は、波長 λ の正弦関数で近似でき、この関数の最大応力 σ_c が結合力の最大値に対応し破壊強度と呼ばれています。

引っ張り応力 σ を作用し、原子間距離が無応力状態の格子間定数 a から x= a'- a だけ拡がったとすると、応力は

$$\sigma = \sigma_c \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right)$$

原子間の変位が小さければ、上式は次式のようになります：

$$\sigma = \sigma_c \left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right)$$

応力と歪みの間にはﾌｯｸの法則が成立します、

$$\sigma = E\left(\frac{x}{a}\right)$$

ここで　E　はﾔﾝｸﾞ率です。最大応力　σ_c　は

$$\sigma_c = \frac{\lambda}{2\pi}\left(\frac{E}{a}\right)$$

理想的へき開破壊強度を与えます。式中の波長　λ　はまだ未知数です。これを消去するために、異なった二つの原子面上にある原子の結合を破断するのに必要な仕事が、へき開された上下の二つの破面のもつ表面ｴﾈﾙｷﾞｰ　γ　に等しいと仮定します：

$$2\gamma = \int_0^{\lambda/2} \sigma_c \sin\left(\frac{2\pi x}{\lambda}\right) dx = \frac{\sigma_c \lambda}{\pi}$$

従って、理想的へき開破壊強度は

$$\sigma_c = \sqrt{\frac{E\gamma}{a}}$$

多くの材料で、表面ｴﾈﾙｷﾞｰ　γ　は　Ea/100 程度ですので、理論的へき開破壊強度は　$\sigma_c = E/10$　で与えられます。この様にして計算された理想的へき開破壊強度は、実際の材料の破壊強度より2から3桁程度大きな値となります（表２）。

５.亀裂

材料の破壊強度を、破面上のすべての原子結合を切断することに必要な応力として理想的に求めた値は、実験で観測される固体材料の破壊強度より2桁程度大きくなってしまいました。この疑問に最初に答えたのが、Griffith　であり、転位理論の発表(1934)より14年前のことです。固体材料の表面や内部には小さな欠陥が多数存在していますが、これらの欠陥が存在しなければ、印加応力によって生じた力線は一様で、等間隔で並んでいます。応力は単位面積当りの力なので、力線の線間隔に逆比例し、従って、力線の間隔が狭いところ、即ち力線が密なところは応力が大きくなっています。欠陥が存在すると応力集中が生じ力線の模様が変化します（図４）。応力集中の効果の大きさを表すのに、弾性応力集中係数 K を用います：

$$K = \frac{\text{不連続部分近傍の最大応力}}{\text{応力集中を受けない領域での応力}}$$

円孔では、 K の値は3程度です。

亀裂の変形様式としては、亀裂両面の相対的変位の仕方にしたがって基本的な三種類の形に分類され、”ﾓｰﾄﾞ I”は「開口型」と呼ばれ、”ﾓｰﾄﾞ II”は「面内せん断」、”ﾓｰﾄﾞIII”は「面外せん断」と呼ばれています（図５）　。亀裂の長さが　2c の場合、亀裂先端における応力分布は

$$\sigma = \frac{K}{\sqrt{2\pi r}}$$

ここで　$k = \sigma_0 \sqrt{\pi c}$　、σ_0 は外部からの印加応力です。これが理想的破壊強度に達するのに必要な応力集中を局部的に引き起こし、破壊を生じさせるのだということです。結晶の臨界せん断強度を求めた場合と同様に、破壊においても欠陥を含まない完全結晶を想定したのが間違いでした。現実の固体材料は決して完全無欠ではなく、表面には亀裂や傷が多数存在し、これらの欠陥の近傍に局部的な応力集中が起こり、集中した応力が原子結合力まで増幅され原子結合の破断が生じるのです。

亀裂先端から r だけ離れた位置における応力は上式で与えられます。破壊が開始するとき亀裂先端に隣接している原子間の結合が最初に切断され始めるのですから、距離　r が原子間距離程度のとき、この位置における応力が理想的へき開破壊応力に一致しているはずです。従って、破壊が開始するための必要な応力は

$$\sigma_f = \sqrt{\frac{2E\gamma}{c}}$$

表面ｴﾈﾙｷﾞｰは近似的に　Ea/100　で、亀裂の長さを 1μm とすると、破壊強度は　E/1000 になって、この値は理論的なへき開強度より二桁低下して、実験値に近ずきます。

６。　亀裂と転位

Griffith の破壊理論は、本来極めて脆性的である材料の破壊強度を説明するために考え出されたものです。亀裂を含んだ延性材料の破壊応力も、一見すると Griffith の破壊理論式に従うように見えます。しかし、破壊理論式中の表面ｴﾈﾙｷﾞｰを材料固有の表面ｴﾈﾙｷﾞｰよりかなり大きい値に設定しなければなりません。例えば、低炭素鋼では表面ｴﾈﾙｷﾞｰは材料の固有の表面ｴﾈﾙｷﾞｰより実に三桁程度大きくしなければなりません。

完全脆性体では、亀裂の進展力が抵抗力として働いている固有表面ｴﾈﾙｷﾞｰより大きくなければなりません。ところが、延性材では、亀裂が進展する際に解放される表面ｴﾈﾙｷﾞｰの大部分は亀裂先端近傍における媒質の塑性変形を生じるための塑性仕事に費やされてしまうので、亀裂の進展への抵抗力を与えることになり、このことは、亀裂先端に塑性領域が存在すると、亀裂の進展に塑性の存在が大きな抵抗力として働くことを意味し、材料の「靭性」を高める結果となってしまう。延性破壊では、亀裂先端から転位が連続的に放出され、それらが前方に堆積され大きい塑性領域を形成しています。さらに、転位による亀裂の応力拡大係数の遮蔽の効果は大きく、亀裂の進展に対する抵抗力は、塑性域を破断するのに必要な力として決ります。それに対して、脆性破壊では、亀裂からの転位の放出がないために、亀裂の進展する際の抵抗力は Griffith 亀裂のような媒質の固有の表面ｴﾈﾙｷﾞｰが抵抗力として働きます。

７。破壊の重層構造

破壊を微視的に見ると、破壊は結晶を構成している原子間を切断することによっ

て実現されます。ところが、実際の金属材料を例に取ると、結晶欠陥である不純物原子や、転位などの原子、分子のｵｰﾀﾞから、多結晶材料における結晶粒径と結晶方位の分布、二相混合組織や介在物の存在などによって、決して一様ではありません。従って、破壊の原因となる要素は、この原子、分子のｵｰﾀﾞから結晶粒ｵｰﾀﾞｰのものまで極めて多様であり、即ち、一種の重層構造をなしています。そのため、破壊現象のある側面を取り上げたとき、その素過程がどの層、またはどのｵｰﾀﾞのところにあるのかが問題であり、それに応じたｱﾌﾟﾛｰﾁが必要となります。微視的方法には（１）原子論的（電子論的）方法、一方巨視的な方法としては（２）連続体ｱﾌﾟﾛｰﾁである破壊力学があります。

又、各層の影響が同時に破壊現象に混入することを考えれば、破壊現象の究明には多かれ少なかれ、確率論的ｱﾌﾟﾛｰﾁを必要とします。材料に生じる破壊が確率論的様相をおびることは明らかであり、統計力学がこの様な現象を考える場合の基礎になることは、横堀の著書「材料強度学」に述べられています。

ある材料からなる多数の試験片（何れも同一物と見なしうる）の集団が存在するとします。このいずれにも等しい一定の応力を負荷したと考えて見ます。応力を十分大きく取っておくと、一般にある時間の後には破壊が生じます。しかし、この試験片全部が同時刻に破壊するというのではなく、負荷開始後破壊が生じるまでの時間はある範囲にばらついています。試験片に一つでも亀裂が発生すれば最終的には破壊に導くものと考え、負荷を作用した瞬間を時間の原点に取り、時刻 t までは破壊が起こらず、次の微小時間 dt 内に亀裂が発生する確率を m (t) dt とします。時刻 t まで破壊せずにいる試験片の総数を N (t) とすれば、t と t+dt との間に破壊する試験片の数は、

$$-dN = N(t)\,m(t)\,dt$$

m が時間に無関係な場合には、破壊するまでの平均時間は t=1/m で、ﾎﾟｱｿﾝ分布になります。

次に、破壊確率を求める基本的な考え方として提案されている S-Sﾓﾃﾞﾙ(STRESS-STRENGTH MODEL)の概略図を考えてみます。これは荷重が強度を越えるとき破壊が生じると考えるもので、荷重および強度の確率分布が互いに重なった部分が、破壊確率を与える尺度となります。今、強度を X ,荷重を Y とし、両者は統計的に独立で、かつ X>0、Y>0 と考え、X 及び Y の確率密度関数を f (x), f (y) とすれば、破壊確率 P は次式で与えられます(図６）：

$$P = P_r[X<Y] = \int_0^\infty f_Y(x)\left[\int_0^x f_X(y)\,dy\right]dx = \int_0^\infty f_Y(x)F_X(x)\,dx$$

ここで $F_X(x)$ は強度 X の分布関数です。

このような破壊確率を知るには、機械、構造物の強度並びにそれに作用する荷重の確率分布を知る必要があり、逆に、これらがわかれば、破壊確率を計算することができます。金属材料の機械的性質の確率特性を概観すると、まず均質な延性材料の引っ張り強さや硬さなどは、材料の変形現象と密接に関連すると考えられ、この変形特性が仮に材料を構成する微細な変形要素の特性の平均値で定まるとすれば、中心極限定理により、引っ

張り強さや硬さの分布は第一近似として、その確率密度が正規分布に近くなります。

材料が多結晶で硬くなるほど強度は組織敏感となり、特に脆性材料の強度は材料に含まれるもっとも弱い欠陥によって決まることが多くなります。この様な強度を考えたﾓﾃﾞﾙを「最弱ﾘﾝｸﾓﾃﾞﾙ」と呼んでいます。この場合、個々の欠陥の強度 x の分布関数をF(x) とすると、 n 個の欠陥を含む材料の強度の分布関数 $F_R(x)$ は、 F(x) なる分布に従う確率変数の n 個の実現値の最小値の分布に等しくなり、次式で与えられます：

$$F_R(x) = 1 - \{1 - F(x)\}^n$$

一般には、 n>>1 であり、n が十分大きくなった極値として得られる分布を漸近分布と呼び。この時、 $F_R(x)$ は、

$$F_R(x) = 1 - \exp[-nF(x)]$$

となり、最小値分布の主要分布は F(x) の全体の形によらず、その裾野のみによって決まることになります。裾野の形として、 $F(x) \sim (x - x_0)^m$ とすると、上式は次式のﾜｲﾌﾟﾙ分布となります：

$$F_R(x) = 1 - \exp\left[-\left(\frac{x - x_0}{a}\right)^m\right]$$

ここで m,a,x はﾜｲﾌﾟﾙ分布を特長ずける母数であり、それぞれ形状母数、尺度母数、および位置母数と呼ばれてます。脆性材料の強度分布にはﾜｲﾌﾟﾙ分布を対応させますが、疲労強度も材料の局所の強度に支配される現象であることを考慮すると、この分布で表現されます。材料中の損傷の累積や亀裂の進展などを確率過程として捕えようとする場合、一つの状態から他の状態へ推移する確率、即ち確率過程が重要な役割を果たす。更に温度依存性は熱活性化過程が素過程であることを示しています。

8 ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝ

現実に生成する破壊は、時間的経過を必要とすることから、破壊の各段階が確率論的様相を帯びることは明らかであり、統計力学がこの様な現象を考える場合の基礎になります。なお、破壊に関連した力学的現象が時刻や拡散などに基ずく場合に、その温度依存性が熱活性過程としてよく説明できることは、重層構造がどのようなものであっても、温度の影響は基本的には構成原子の熱振動の大きさとして現わされることより、熱活性化過程が素過程であって、これがその上の重層構造を突き抜けて、巨視的現象として観測されることになります。しかし、この重層構造が混合している場合には、解析的に解決して行くことは不可能に近いので、ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝより理解の糸口をつかむことになります。

亀裂が進展するとその瞬間に先端付近の少数個の原子ﾎﾞﾝﾄﾞが破断されるので、亀裂先端を横切っている原子間の力が亀裂の進展の臨界を決めることは明らかです。そこで、原子間力と破壊のﾊﾟﾀｰﾝの相関をｺﾝﾋﾟｭｰﾀ ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝを利用して調べてみました。ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝ は二次元単純立方格子について行い、その結晶ﾓﾃﾞﾙは図７に示します。原子は格子点

上に配置していて、有限長さの亀裂がx方向に平行に位置しています。引っ張り応力が、y方向に作用し、亀裂がx方向に進展する場合を考えます。この様な場合には、原子のy方向への変位が一番重要であると考えられるので、原子はy方向への動きだけが許されるﾓﾃﾞﾙになっていて、y方向への力の成分だけを考えることとし、他の二つの方向 x および z 方向の成分を無視することにします。この様な格子ﾓﾃﾞﾙは1950年代に Montroll 達によって格子力学を研究するために導入されたものです。ｼﾐｭﾚｰｼｮﾝ は、対称性を考えて二次元格子の 1/4 について行い、この領域には３０列の 70X30=2100 個の原子を配置させています。

各原子の平衡位置からの変位が小さい場合には、各原子は主に最隣接原子と相互作用します。y方向に成分を持っている最隣接原子間の中心力を折線の形で表します。

(j,k+1)番目の原子が (j,k) 番目の原子に作用するy方向の力を f_T 、これらの原子間の相対変位を ξ_T とすると、中心力と変位の関係を図８に示します。この格子ﾓﾃﾞﾙでは、変位の各成分が分離されると仮定しているので、必然的に非中心力を導入してしまいますが、隣接している列の原子間の非中心力も又折線の形で表しました。(j、k)原子に対して (j+1,k´)原子がy方向に相対変位したために生じるy 方向の非中心力を f_S で表します。この時、非中心力と原子対の相対変位の関係を図８に示します。したがって、この原子間力では、結晶の臨界引っ張り応力は σ_T で、臨界ずれ応力は $P\gamma_S$ です。

ﾓｰﾄﾞIの亀裂の伝播について考えることにします。亀裂は完全結晶の中で原子間力を切断する方法により導入します。ここでは、 +1番目と -1番目の横列の間の原子間力を切断しました。亀裂はx軸に平行に配置していて、引っ張り応力によってx方向に拡張します。この場合の、(j.k)番目の原子の運動方程式は次式になります：

$$\ddot{x}_{j,k} = f_{j,k}^{j,k+1} + f_{j,k}^{j,k-1} + \sum_{k'} \left(f_{j,k}^{j-1,k'} + f_{j,k}^{j+1,k'} \right)$$

亀裂先端から転位が発生して伝播し、x方向の最隣接原子は次々と変わることが考えられるので、各原子の両側の縦列にあるすべての原子との相互作用を考慮しました。計算を行う上で次の対称性を考慮しました： （１）自由表面、（２）亀裂条件、（３）x軸に関して反対称、（４）y軸に関して対称。さらに、外部応力は時間の関数として

$$\sigma_0 = 0.144 + 0.0025\,t \qquad 0 < t < 25$$
$$= 0.144 + 0.00625 \qquad 25 < t$$

系を規格化するために、原子の質量、格子定数、原子振動の周期を単位に取りました。実際に計算は差分法を用いました。

原子間力、印加応力を変えることによって、亀裂がどのように進展するかを示します。図には右上の1/4に相当する部分のみが描かれていて、原子を + 記号でﾌﾟﾛｯﾄし、同じ行にある（J の値が同じ）原子同志を直線で結びました。破壊は、それに伴う塑性変形の大小により延性破壊と脆性破壊に分けられますが、ｶﾞﾗｽのような完全脆性材料は、塑性変形を全く伴わない完全な脆性破壊をします。金属では大なり小なり塑性変形を伴うの

で、通常は塑性変形の大きいものを延性破壊、小さいものを脆性破壊と呼び、区別はややあいまいです。

(A)脆性破壊(RUN 1)

原子間力を図９に示します。平衡状態にある亀裂についての理論は大部分、連続弾性体中の亀裂について考察しています。この様な状態を取り扱っているGriffithの理論においては、臨界破壊応力は唯一存在していて、この結晶ﾓﾃﾞﾙの力定数と弾性定数の関係から、ﾔﾝｸﾞ率はE=1、ずれ弾性率は G =1 であるので、亀裂長が２原子長のばあいには、Griffith の臨界応力は E/10=0.1 となります。亀裂の先端の集中応力は約0.15であるので、亀裂は外力によって進展します。脆性破壊では、塑性変形をほとんど、あるいは全く生じないうちに亀裂が非常に高速度で伝播し、普通へき開面と呼ばれる特定の結晶面に添って亀裂が進行します（図１０）。

次に、印加応力を大きくすると、先ず、亀裂は転位の発生無しに伝播し、ある程度進展した後に転位を発生します。転位は連続的に放出されずに、むしろ、放出の間には時間間隔または距離間隔が存在します（図 １１）。放出された転位は、亀裂先端から反発力を受け、一方、亀裂表面と転位間の image force による引力が存在します。従って、放出された転位は、亀裂の先端の1-2原子間距離では image force によって、亀裂に捕獲さているが、それを越すと、亀裂の反発力によって、外に向かって運動します。そして、力を受けた転位は、亀裂の切り口を開きながら、表面に向かって伝播します。この時の、転位速度は音速の0.6倍程度になっています。

(B)延性破壊(RUN 2)

非中心力をRUN 1に比較して半分程度に弱めると、転位が亀裂先端から発生して伝播します。これらの転位は、亀裂先端を鈍化し、亀裂の進展を阻みます（図１２）。

(C) 不純物の影響

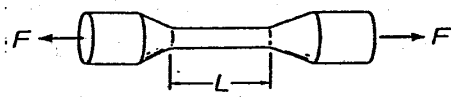
次に、(20,1)番目の母体原子を不純物に置換し、二種類の不純物を用いました。一つは、不純物による力定数が強められている場合であり、図１３に示すように、外部応力がt=0の時刻において、加えられたとき、亀裂の進展が開始する時刻は不純物がない場合に比較して遅れます。一方、不純物の力定数が弱い場合には、亀裂が進展を開始する時刻は早まります。これらの際立った結果は、硬い不純物は亀裂芯が結晶内部に浸透するのを妨げるために生じました。したがって、亀裂の進展の問題には、本質的に「巨視的」と「微視的」な問題が含まれます。

９。ﾎﾞｲﾄﾞの発生と分岐

非中心力を short range にすると（図１４）、亀裂先端から発生した転位は格子によってﾄﾗｯﾌﾟされる傾向にあります。すると、発生した転位を核として、ﾎﾞｲﾄﾞが発生し、亀裂が生じます。このようなﾊﾟﾀｰﾝは延性破壊で見られます（図１５）。この状態に比較して、非中心力を弱めると、破壊は延性的となります。一方、非中心力を強めると脆性的破壊になります。従って、ﾎﾞｲﾄﾞが発生する状態は延性的と脆性的状態の中間に位置していることになります。

亀裂先端から放出された転位が”種”になって、更に亀裂が発生し”剥離”が進行するのであれば、いわゆる亀裂の分岐が生じることになります。亀裂の分岐の巨視およびﾐｸﾛな観測は多くの材料において観測されています。この亀裂の分岐についての理論としては、Yoffeの理論があります。亀裂の進展速度が遅い場合には、先端から印加応力に直角の方向に専ら進行しますが、進展速度が増加すると、亀裂は一般に分岐する傾向にあります。即ち、亀裂面のある行路だけ進行すると、ある分岐角で分岐し、その分岐に添って再び進むと、又同様にに分岐し、ほぼ一定の亀裂長と分岐で分岐を繰り返す傾向が見られます。ところが、亀裂の進展速度が増加して音速の５割程度になると、亀裂面からの角度が50度になる方向が応力最大となります。これが、応力のより強く集中した分岐角を抱く方向に亀裂進行路の分岐をするという Yoffe の理論です。

ﾌﾗｸﾀﾙは、この語の派生語である fracture などの語から推測できるように、物が壊れて不規則な断片になった状態を表しています。媒質中の応力場はﾗﾌﾟﾗｽ方程式を充たしていますが、亀裂の種が発生する確率がそこでの局所的な応力場の勾配に比例するならば、この種の破壊は雷と同じﾊﾟﾀｰﾝを示し、破壊の道筋には細い枝別れのﾊﾟﾀｰﾝが表われると松下氏（中大）が指摘しています。大局的な立場にたった原子ﾓﾃﾞﾙによるｼﾐｭﾚｰｼｮﾝが、進む方向を示してくれそうです。



引張り試験試料

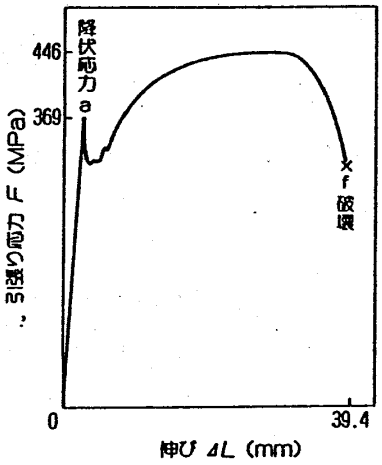
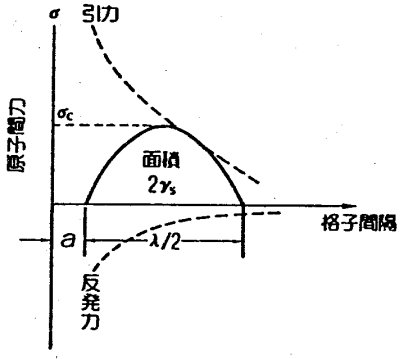


図 1 引張り応力と伸び

表 1. 単結晶の臨界せん断応力

結晶	剛性率 (GPa)	理論値 (GPa)	実測値 (MPa)	比
Cu	64	10	0.98	10^4
Zn	38	6.0	0.92	6×10^3



原子間の結合力

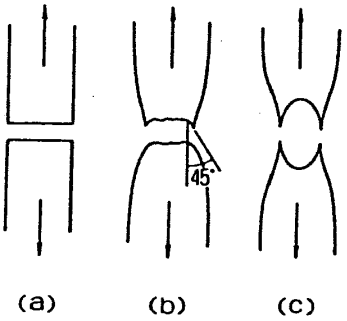


図 2 種々の引張り破壊様式

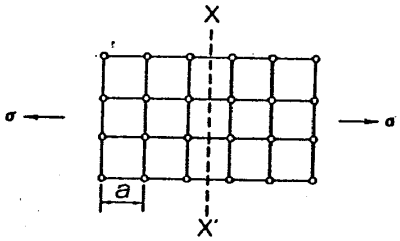


図 3 格子面 (XX') でのへき開

表 2 理想的へき開破壊応力と実験結果

物質	表面エネルギー γ_s (dyn/cm)	破壊応力 理論値 (GPa)	破壊応力 実験値 (GPa)	比
Cu	1 103	20	0.2	100
Zn	590	11	0.1	100
Fe	1 570	33	0.7	47

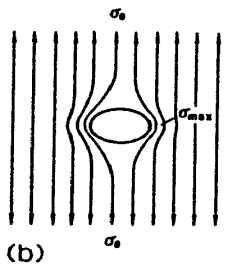


図 4 平板内の孔による力線の乱れ

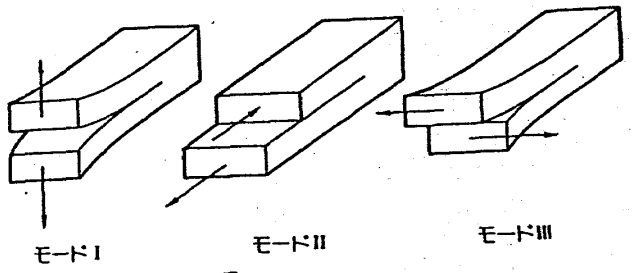


図 5 基本的な亀裂変形様式

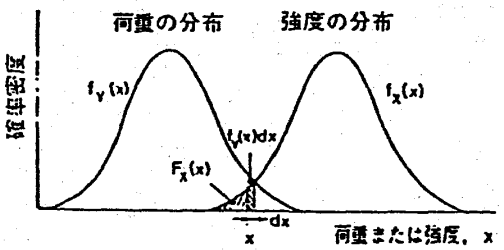


図 6 S-S モデル

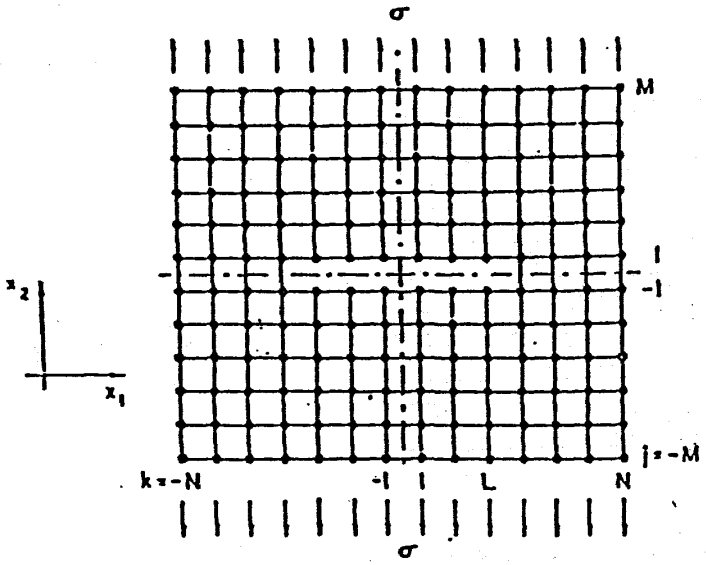


図 7 結晶のモデル

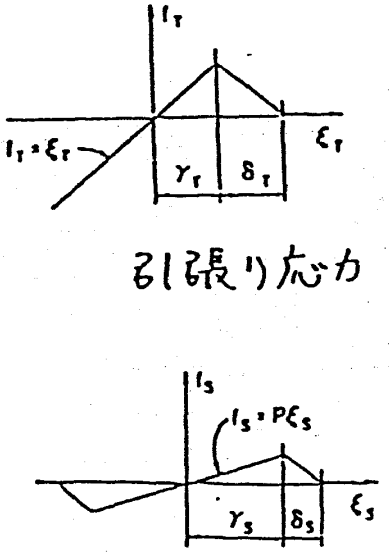
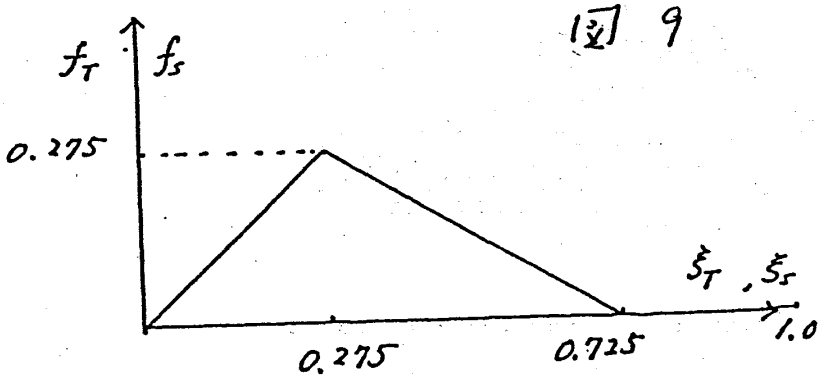
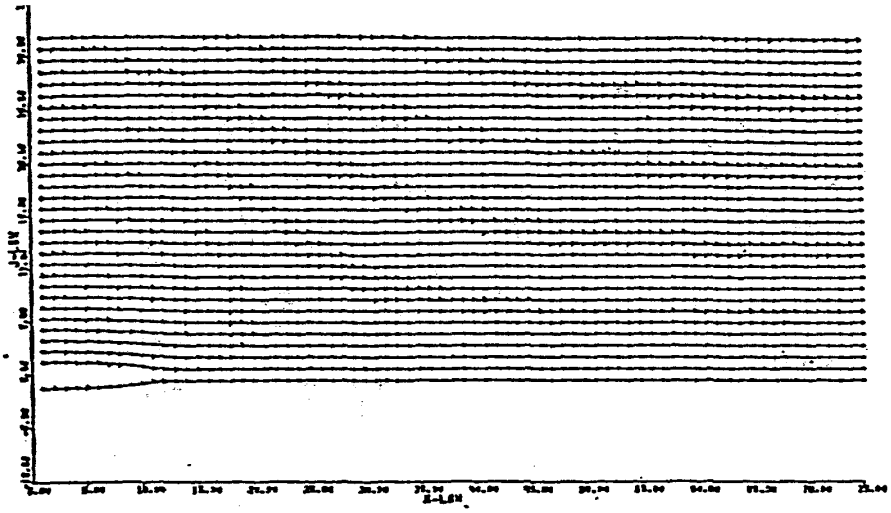


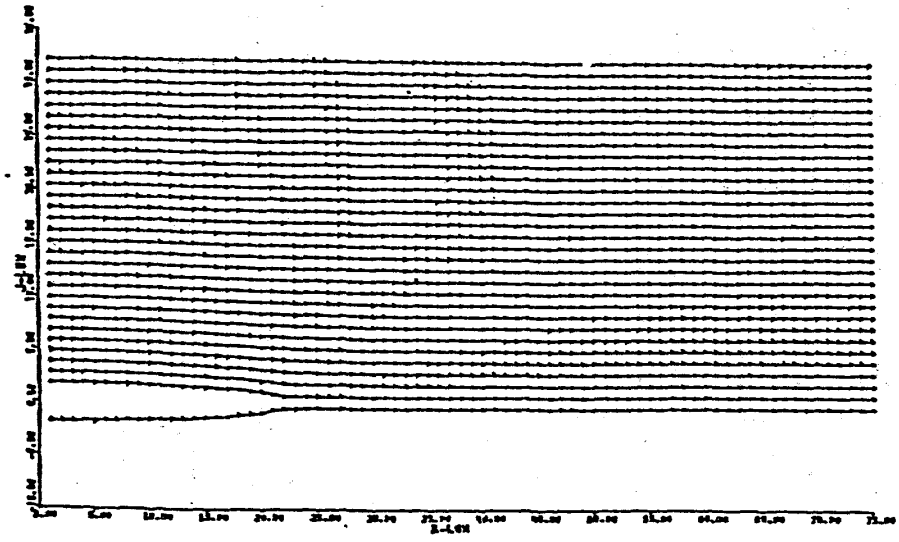
図 8 せん断応力

図 9

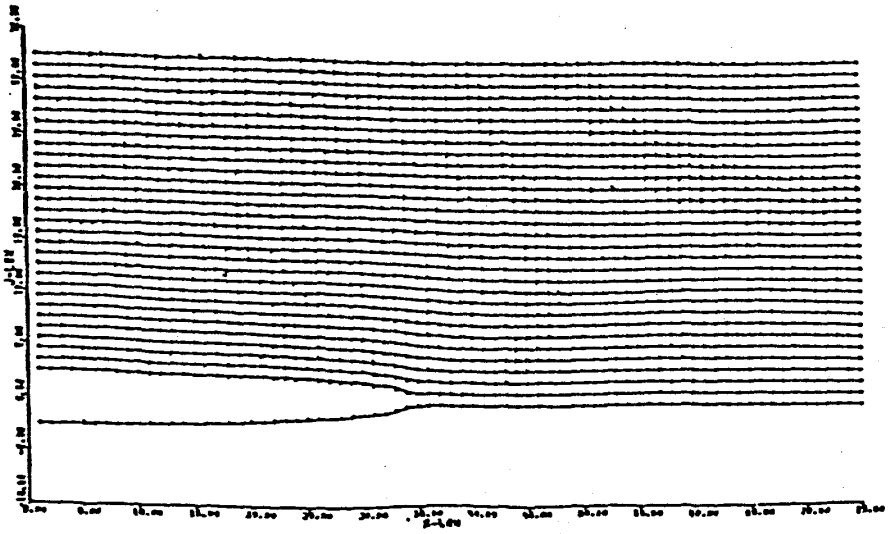




t=0

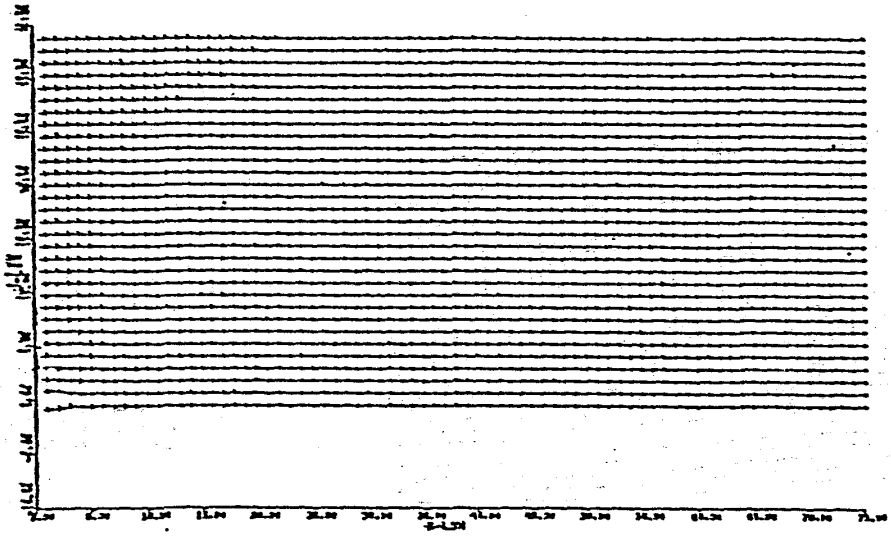


t=80

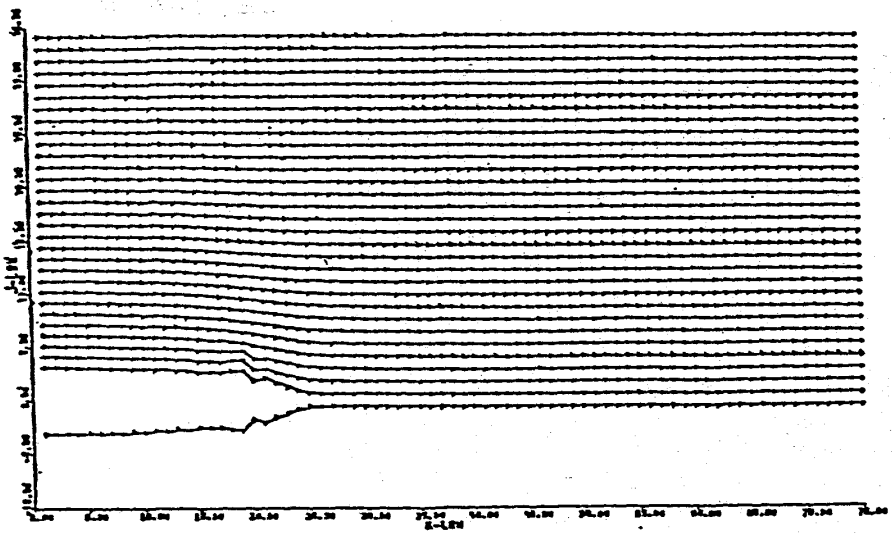


t=100

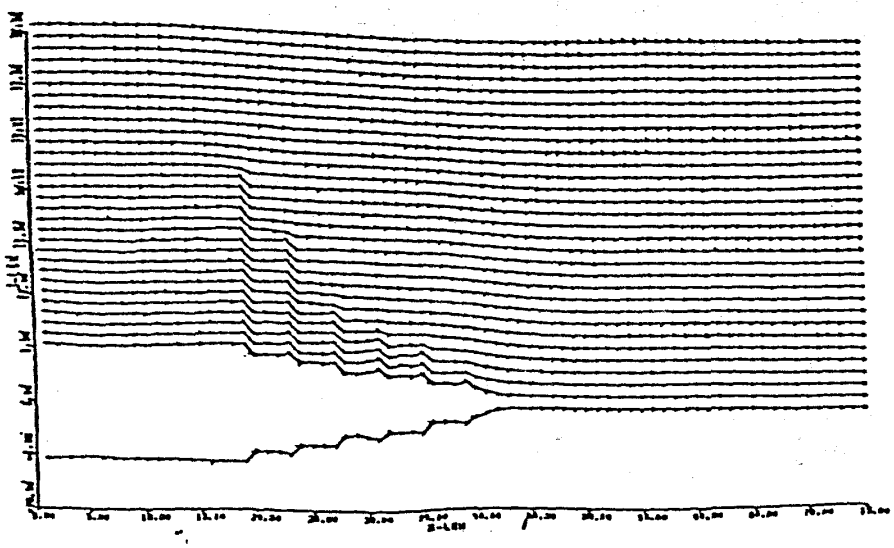
図 10. ぜい性破壊 (RUN1)



t=0

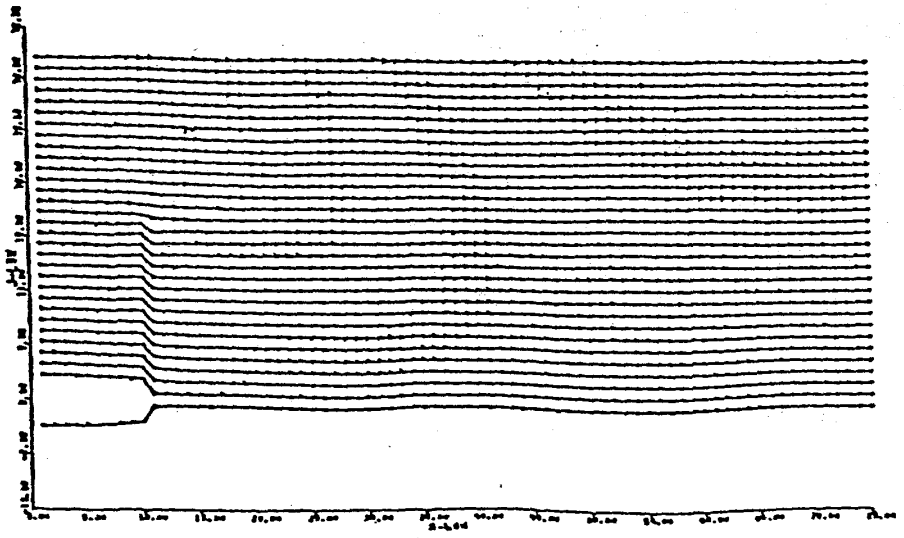


t=80



t=100

図 11



RUN2

t=100

図 12.
延性破壊

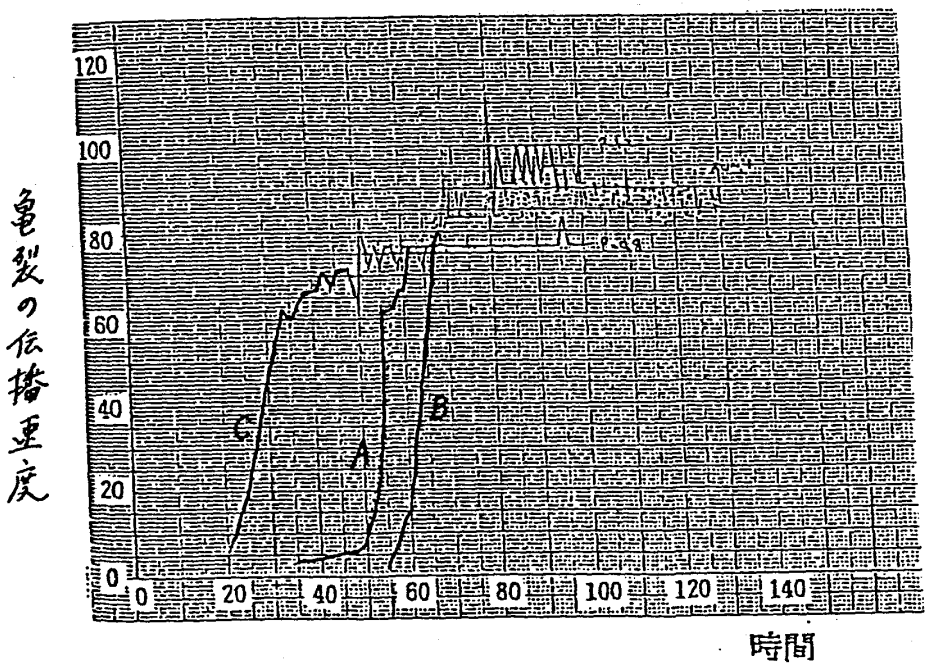
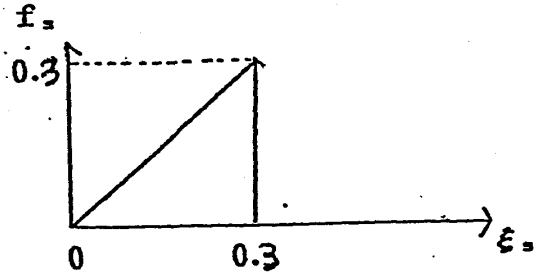
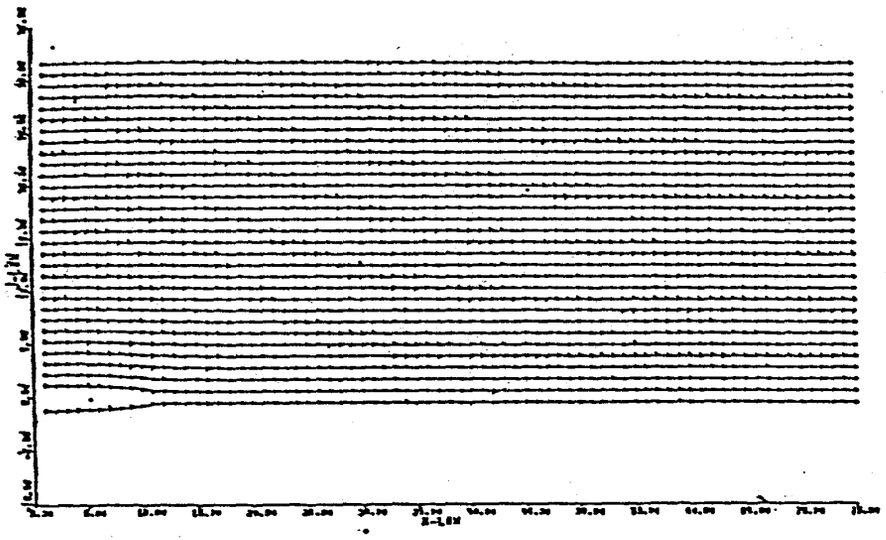


図 13

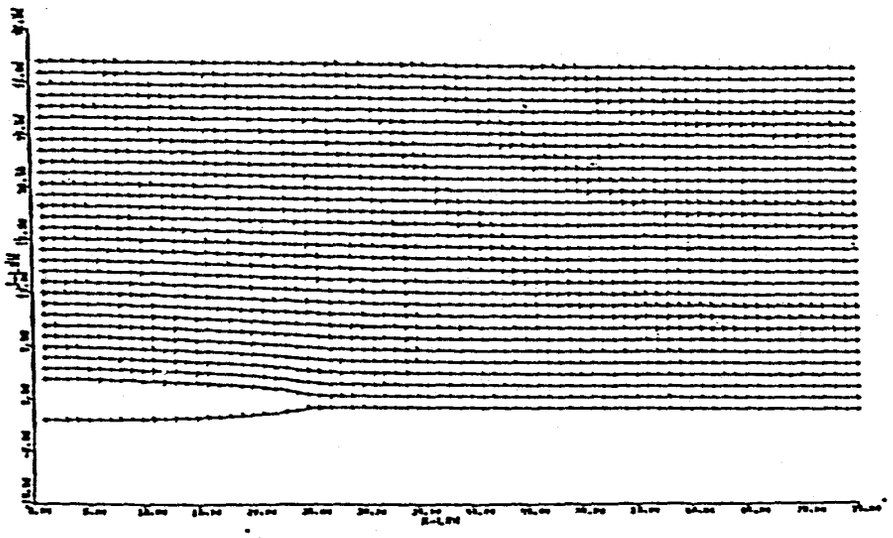
A: 不純物なし.
B: 硬い不純物
C: 軟い不純物

図 14

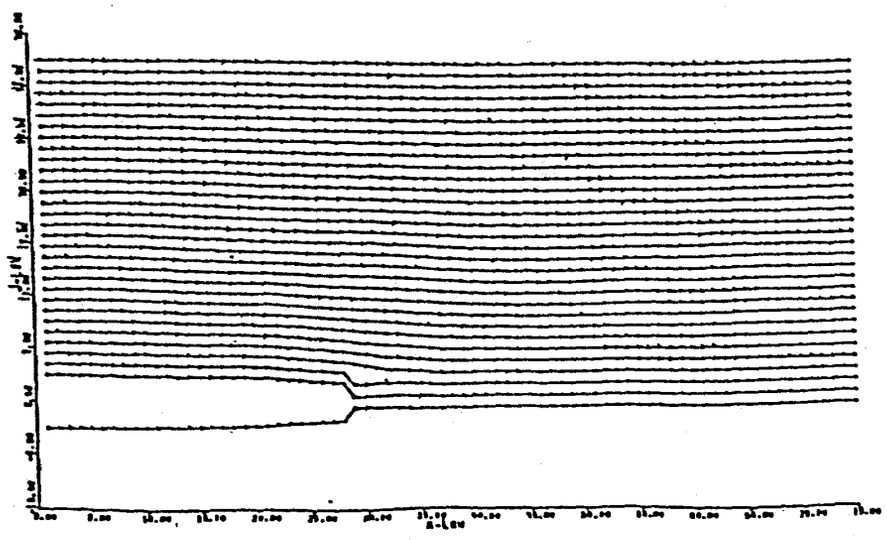




t=0

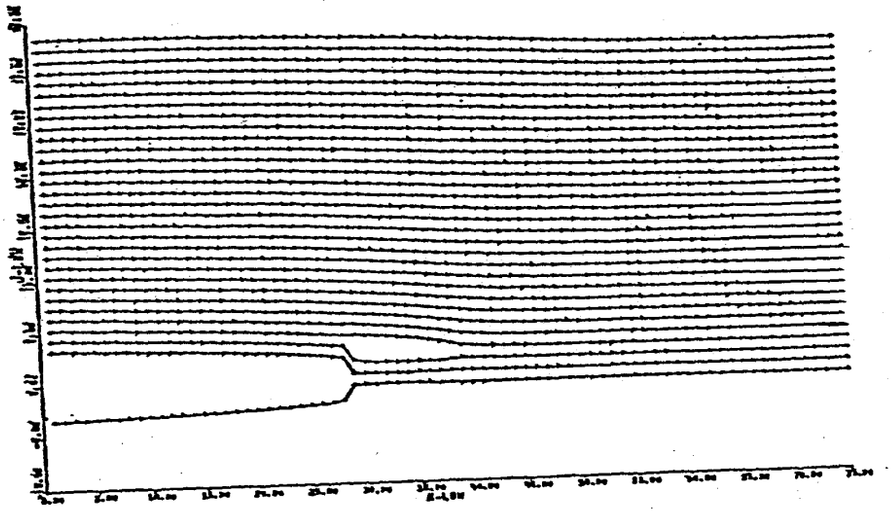


t=100

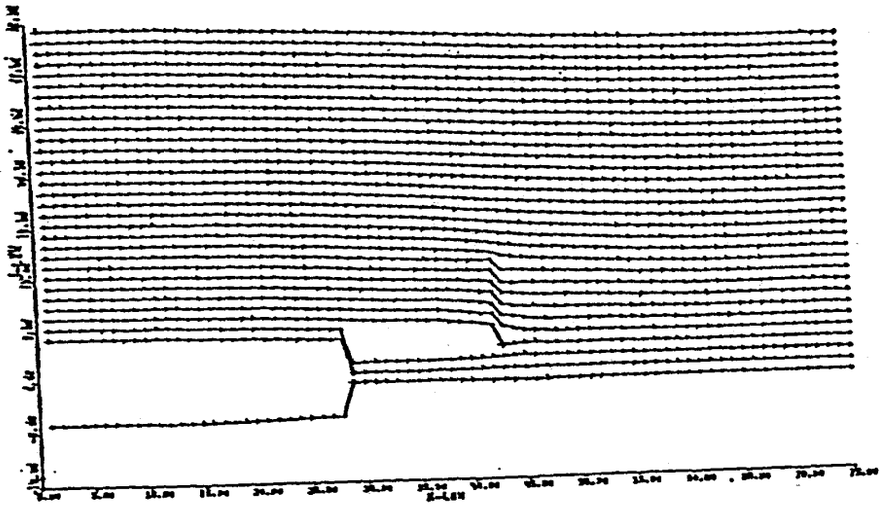


t=120

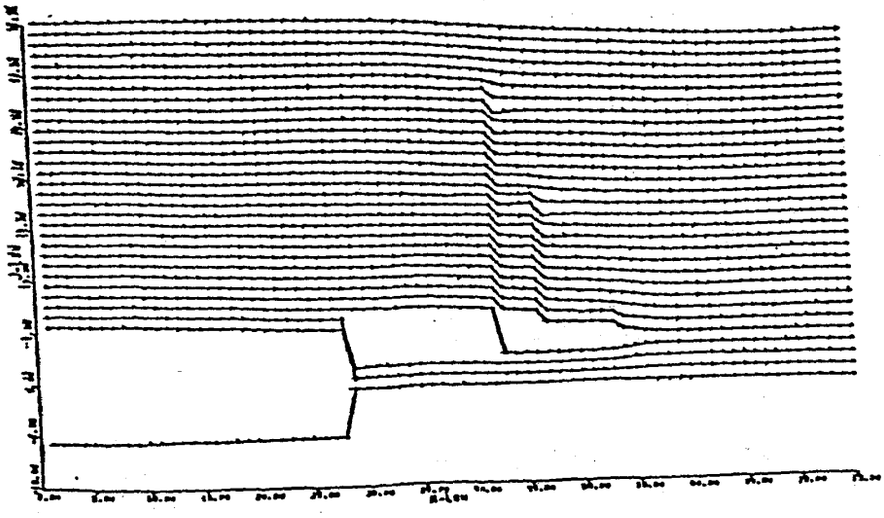
図15 (a)



t=140



t=160



t=180

図15 (b)