材料組織弾性学

by T.Koyama

１．はじめに

材料の微細組織内部の応力状態が、その材料の特性に大きく影響を与えることが近年、種々の学問分野において見出されている。例えば半導体材料における歪超格子では弾性場の解析が半導体設計に大きな役割を果たしている。ポリマーアロイの分野では、もともと相変態における組織形成が、分子間力と分子サイズのエントロピーとのバランスによって進行するために、外力による効果が大きく、形成組織が外力によって千差万別に変化することが知られている。またこのような先端研究だけでなく炭素鋼の焼き入れによって生じるマルテンサイト組織安定性における応力の役割、またNi基耐熱合金におけるγ'析出物組織の形態学などは、最近の自己組織形成の分野において、再びクローズアップされ、いわば古くかつ新しい分野である。従来、弾性理論は巨視的な物体の変形(例えば、はりの曲げや棒のねじり等)に基づき解説される場合が多いが、以上のような材料の微視的応力状態を解析するためには、より厳密な弾性論が必要である。なぜなら弾性率の非等方性や組織内の不均一性が形成組織形態に極めて大きく影響するからである。したがって、固体中に欠陥や析出物が存在することによって生じる応力場を正確に評価することは、材料組織の安定性を知る上で不可欠である。

この固体内の微視的な応力状態を算出する学問体系については、現時点において大きく３つの独立した流れが存在する。１つは「マイクロメカニックス」であり、また１つは、Khachaturyanが確立した弾性学、最後の１つはLandauの弾性学である。以上の３者は最終的に全ての弾性関連問題に対して同一の結果を与えるが、問題へのアプローチの仕方が若干異なっている。この差が各アプローチの特徴であり、同時に長所・短所ともなっている。本解説では、以上のつの流れに基づき、材料の微視的弾性場の計算方法をまとめるとともに、相互の関係を明確化することを目的とする。なお３者に区別が必要な場合には、それぞれを「マイクロメカニックス」、「Khachaturyanの弾性学」および「Landauの弾性学」と区別して記すことにする。また、以下の定式化において、以上の総合的な解説として、

・村 外志夫、森 勉 ：「マイクロメカニックス＝転位と介在物」、培風館、(1976).
・T.Mura：*Micromechanics of Defects in Solids*(*Second, Revised Edition*), Kluwer Academic Publishers, (1987).
・A.Khachaturyan : *Theory of Structural Transformations in Solids*, Wiley, New York, NY, (1983).
・ランダウ・リフシッツ（伊藤、石橋 訳）：「弾性理論(増補新版)」、東京図書、(1989).

を参照させていただいた。

２．変数および数学的関係式の定義

2-1　変数定義

本計算において使用する変数を以下のように定義する。

T	絶対温度
$\mathbf{r},\mathbf{r}'$	組織内の位置ベクトル [$\mathbf{r}=(x, y, z)$]
t	時間
V_0	組織の全体積（$=L^3$）
$c(\mathbf{r},t)$	時間 t および位置 $\mathbf{r}$ における溶質原子濃度
c_0	合金の平均組成
$q(\mathbf{r},\mathrm{t})$	濃度変動量[$q(\mathbf{r})=c(\mathbf{r})-c_0$]
G_c	化学的自由エネルギー
E_{surf}	界面エネルギー
E_{str}	弾性歪エネルギー
G_{system}	組織自由エネルギー
ε	eigen歪

η	格子ミスマッチ
k_B	ボルツマン定数
R	気体定数
N_A	アボガドロ定数
$\mathbf{k}$	フーリエ空間の波数ベクトル [$\mathbf{k}=(k_1,k_2,k_3)$]
L	計算領域の１辺の長さ
N	フーリエ変換の分割数
$Q(\mathbf{k})$	$q(\mathbf{r})=c(\mathbf{r})-c_0$のフーリエ変換
$B(\mathbf{k})$	$W_{str}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$のフーリエ変換に$L^3$を乗じた関数
σ_{ij}	析出相の内部応力
e_{kl}^T	等価変態歪(eigen歪)
e_{kl}^c	拘束歪
e_{ij}	弾性歪
u_l	変位場（基準は析出物のない純物質のマトリックス）
κ	濃度勾配エネルギー定数
C_{ijkl}	弾性定数
C_{ij}	弾性定数
C_{ijkl}^X	X金属の弾性定数
C_{ij}^X	X金属の弾性定数
α	カップリング定数
λ,μ	ラーメの定数
μ	剛性率
K	体積弾性定数

2-2　関係式の定義

任意の関数$f(\mathbf{r})$のフーリエ変換を$F(\mathbf{k})$とすると、両関数の関係は以下のように表される。

$$f(\mathbf{r})=\int_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \tag{2-1}$$

$$F(\mathbf{k})=\frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r})\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r} \tag{2-2}$$

また、ここでデルタ関数$\delta(\mathbf{k})$のフーリエ変換$D(\mathbf{r})$を導出しておこう。定義より$D(\mathbf{r})$は次式にて与えられる。

$$D(\mathbf{r})=\int_{\mathbf{k}} \delta(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \tag{2-3}$$

ところで、式(2-3)はデルタ関数の性質より次式の形に変形される。

$$D(\mathbf{r})=\delta(\mathbf{0})=1 \tag{2-4}$$

式(2-3)を逆フーリエ変換し、式(2-4)を適用すれば、

$$\delta(\mathbf{k})=\frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}} D(\mathbf{r})\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r}$$

より、デルタ関数の関係式として式(2-5)が導かれる。

$$\delta(\mathbf{k}) = \frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}} D(\mathbf{r})\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r} = \frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}} \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r} \tag{2-5}$$

この式は、例えば次式のように用いられる。

$$\begin{aligned} F(\mathbf{k}) &= \frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r})\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}}\left\{\int_{\mathbf{k}'} F(\mathbf{k}')\exp(i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r})\frac{\mathrm{d}\mathbf{k}'}{(2\pi)^3}\right\}\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r} \\ &= \int_{\mathbf{k}'} F(\mathbf{k}')\left[\frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}}\exp\{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}\}d\mathbf{r}\right]\frac{\mathrm{d}\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \\ &= \int_{\mathbf{k}'} F(\mathbf{k}')\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\frac{\mathrm{d}\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} = F(\mathbf{k}) \end{aligned} \tag{2-6}$$

次に、ガウスの発散定理は次式にて与えられる。本解説において、これは弾性歪エネルギー式の変形にしばしば使用される。

$$\int_{\mathbf{r}} f\cdot g_{,j}d\mathbf{r} = \int_{\mathbf{S}} f\cdot g\cdot n_j d\mathbf{S} - \int_{\mathbf{r}} f_{,j}\cdot g\,d\mathbf{r} \tag{2-7}$$

３．弾性論における基本定義と定理

変形前の点$\mathbf{r}$が、変形後に点$\mathbf{r}'$に移ったとすると、この時の変位$\mathbf{u}$は、$\mathbf{u}=\mathbf{r}'-\mathbf{r}$にて与えられる。また全変形勾配$u_{i,j}$は、$u_{i,j}$の空間全体における平均値が0である場合、次式にて定義される。なお添字のコンマは微分を意味する。

$$u_{i,j} \equiv \frac{\partial u_i}{\partial r_j} \tag{3-1}$$

全変形勾配$u_{i,j}$の対称成分を用いて全歪(拘束歪)e_{ij}^cは次式にて与えられる。（対称でない成分は物体の回転に関連する項であるが、本解説では物体が回転する場合は取り扱わないので、対称成分のみを考慮する。）

$$e_{ij}^c \equiv \frac{u_{i,j}+u_{j,i}}{2} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_i}{\partial r_j}+\frac{\partial u_j}{\partial r_i}\right) \tag{3-2}$$

この全歪e_{ij}^cは、一般に２種類の歪項を用いて、式(3-3)にて与えられる。１つは弾性歪e_{ij}で、もう１つはeigen歪e_{ij}^{T*}である。弾性歪e_{ij}は応力を発生させ、かつフックの法則に従う歪量であり、eigen歪e_{ij}^{T*}はstress freeの状態における歪量で、応力が発生しない場合の歪である。（例えば、実際に観察される全歪e_{ij}^cがeigen歪に等しい場合、弾性拘束は完全緩和され物体は応力状態にない。）したがって、eigen歪として最もよく知られているものは塑性歪である。またこれ以外にもeigen歪にはミスフィット歪、熱膨張歪などがある。

$$e_{ij} = e_{ij}^{c} - e_{ij}^{T*} \tag{3-3}$$

弾性歪e_{ij}はフックの法則に従うので、応力との関係は次式のように書くことが出来る。

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} e_{kl} = C_{ijkl}(e_{kl}^{c} - e_{kl}^{T*}) \tag{3-4}$$

C_{ijkl}は弾性係数で、添え字の$ijkl$はそれぞれ1,2,3の値を取る。また式(3-4)のように表記した場合、個々の指標$ijkl$に1,2および3を入れて和を取ることとする。具体的には

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} = C_{ijkl} e_{kl} &= C_{ij11} e_{11} + C_{ij12} e_{12} + C_{ij13} e_{13} \\ &+ C_{ij21} e_{21} + C_{ij22} e_{22} + C_{ij23} e_{23} \\ &+ C_{ij31} e_{31} + C_{ij32} e_{32} + C_{ij33} e_{33} \end{aligned} \tag{3-5}$$

である。さらに弾性係数C_{ijkl}には次の関係が成立する。

$$C_{ijkl} = C_{jikl} = C_{ijlk} = C_{klij} \tag{3-6}$$

特に等方等質の固体の場合、弾性係数C_{ijkl}は次式にて与えられる。

$$C_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + \mu \delta_{ik} \delta_{jl} + \mu \delta_{il} \delta_{kj} \tag{3-7}$$

ここでλとμはラーメの定数、δ_{ij}はクロネッカーのδで$i = j$の時１, $i \neq j$の時0の値を取る。

さていま固体が応力状態にあり、かつ固体は静止している場合を考えれば、固体内部において応力はつり合っていなくてはならない。応力のつり合いの方程式(平衡方程式)は次式にて与えられる。

$$\sigma_{ij,j} + P_i = 0 \tag{3-8}$$

P_iは単位体積当りの体積力である（体積力の具体例としては例えば重力を挙げることができる）。これに対し固体の表面に垂直に作用している応力は面積力X_iと呼ばれる。固体の表面に対して垂直方向の応力成分$\sigma_{ij} n_j$と面積力X_iとはつり合っていなくてはならない。したがって次式が成立する。

$$\sigma_{ij} n_j = X_i \tag{3-9}$$

一般に弾性論における多くの問題(ほとんど全て)は、微分方程式である式(3-8)を、与えられた境界条件（例えば固体内におけるeigen歪の分布や固体表面における面積力の分布）のもとに解くことに帰着される。以下の章では、固体内に整合析出物が存在するときの弾性歪エネルギーの評価法について説明する。