

4 . 弾性歪エネルギー - の評価法

本章では固体内に整合析出物が存在する場合における、固体内の弾性歪エネルギー - の評価法について説明する。通常、析出物と地相の格子定数は異なるので、地相と析出相が整合であれば析出物内部およびその周辺は弾性的に大きく歪む。この時の歪量は合金系によっては十数パーセントにも及ぶことがあり、巨視的な弾性変形の場合に比較して極めて大きいことが特徴である。

4-1 等価介在物の概念

析出物と地相の弾性定数が互いに等しい場合と異なる場合を考える。この両場合はそれぞれ、"homogeneousな場合"および"inhomogeneousな場合"と通常呼ばれている。大部分の現実の2相組織はinhomogeneousな場合に対応する。特にこの時の析出物(広義には地相と弾性定数が異なる領域)をinhomogeneityと呼ぶ。しかし弾性論ではhomogeneousな場合の方がはるかに解析し易い。これは組織全体にわたって弾性定数が均一であるならば、歪分布(もしくは応力分布)のみを考慮することによって、組織の弾性歪エネルギー - を導出することが出来るからである。したがって、inhomogeneousな歪場を、それと等価なhomogeneousな歪場に変換し、弾性場を解析しようとする試みがEshelbyによって考案されている。具体的にはinhomogeneousな応力場と全く等しい応力場を、homogeneousな応力場で再現するために、等価変態歪という概念を導入する。このことをフックの法則をもちいて表現すると次式のように書くことができる。

$$C_{ijkl}(e_{kl}^c - e_{kl}^T) = C_{ijkl}^*(e_{kl}^c - e_{kl}^{T*}) \quad (4-1)$$

C_{ijkl} と C_{ijkl}^* はそれぞれ地相と析出相の弾性定数である。 e_{kl}^{T*} は2相間のeigen歪で、析出相と地相の格子定数をそれぞれ a_p および a_m とすれば、 $e_{kl}^{T*} \equiv (a_p - a_m) / a_m$ にて与えられる。 e_{kl}^c は全歪(拘束歪)である。 e_{kl}^T は等価変態歪と呼ばれinhomogeneousな応力場をhomogeneousな応力場で表現するために導入された仮想的な歪場で、式(4-1)にて定義される。つまり実際に弾性定数 C_{ijkl}^* およびeigen歪 e_{kl}^{T*} の析出物が存在している場合、この析出物を作る応力場は弾性定数 C_{ijkl} および等価変態歪 e_{kl}^T の析出物によって再現されるのである。したがって e_{kl}^{T*} にかわって、 e_{kl}^T を用いることによってinhomogeneousな応力場をhomogeneousな応力場で記述することができるのである。

式(4-1)によってinhomogeneousな場合は、homogeneousな場合に変換することが出来るので、以下ではhomogeneousな場合のみについて議論を進める。

4-2 楕円体状析出物の弾性歪エネルギー - (E_{incl}) の評価

E_{incl} は次式にてあたえられる。

$$E_{incl} = \frac{1}{2V} \int_V \sigma_{ij}(e_{ij}^c - e_{ij}^T) d\mathbf{r} \quad (4-2)$$

σ_{ij} は内部応力を示す。積分領域は物体全体である。式(2-7)のガウスの発散定理により、式(4-2)は式(4-3)のように書き換えることが出来る。

$$\begin{aligned} E_{incl} &= \frac{1}{2V} \int_V \sigma_{ij} e_{ij}^c d\mathbf{r} - \frac{1}{2V} \int_V \sigma_{ij} e_{ij}^T d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{2V} \int_S \sigma_{ij} u_i n_j dS - \frac{1}{2V} \int_V \sigma_{ij,j} u_i d\mathbf{r} - \frac{1}{2V} \int_V \sigma_{ij} e_{ij}^T d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (4-3)$$

右辺第1項は物体の表面における面積力の総和である。いま外部から面積力が働いていない場合を考えると、外力とのつり合い条件より $\sigma_{ij} n_j = 0$ である。また体積力も0とすると内部応力のつり

あい条件より $\sigma_{ij,j} = 0$ が成立する。したがって、式(4-3)の右辺第1項と2項は、ともに0となり E_{incl} は結局次式にて与えられる。

$$E_{incl} = -\frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij} e_{ij}^T d\mathbf{r} \quad (4-4)$$

応力 σ_{ij} と弾性歪 e_{kl} ($= e_{kl}^c - e_{kl}^T$) の間には次式のフックの法則が成立する。

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} e_{kl} = C_{ijkl} (e_{kl}^c - e_{kl}^T) \quad (4-5)$$

(4-5)式を(4-4)式へ代入する。

$$\begin{aligned} E_{incl} &= -\frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij} e_{ij}^T d\mathbf{r} = -\frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} (e_{kl}^c - e_{kl}^T) e_{ij}^T d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} e_{ij}^T e_{kl}^T d\mathbf{r} - \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} e_{ij}^T e_{kl}^c d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (4-6)$$

ここで上式の第1項と第2項をそれぞれ E_1 および E_2 と置く。すなわち

$$E_1 = \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} e_{ij}^T e_{kl}^T d\mathbf{r} \quad (4-7)$$

$$E_2 = \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} e_{ij}^T e_{kl}^c d\mathbf{r} \quad (4-8)$$

式(4-7),(4-8)より弾性歪エネルギー - E_{incl} は次式にて与えられる。

$$E_{incl} = E_1 - E_2 \quad (4-9)$$

さて、ここで E_1 と E_2 の物理的意味をEshelbyサイクルに基づき考えてみよう。通常、析出物と地相は濃度に差が存在するため格子定数が異なる。したがって整合な析出物およびその周辺は無理やり格子が歪まされている事になる。具体的に析出物の格子定数が地相のそれよりも大きな場合、整合析出物の弾性歪エネルギー - は大きな析出物を小さな穴にはめ込む時に生じる弾性エネルギー - として算出される。この大きな析出物を小さな穴にはめ込む過程は以下のようにエネルギー - 的に解釈することが出来る。

まず式(4-7)の E_1 は析出物の格子定数を地相のそれと等しくなるように、外部から面積力をかけて析出物を均一に変形するのに要する仕事である。この面積力をかけた状態で析出物を地相の穴にはめ込む。次に今までかけていた面積力を取り去る。そうすると作用反作用の関係から析出物は、それまで外部からかけられていた面積力と等しい力で地相を押し返そうとする。この押し返す力が $C_{ijkl} e_{ij}^T$ である。押し返された結果、 u だけ地相が後退したとする。この時の歪 e_{kl}^c が実際に観察される全歪であり、この押し返し分の仕事量が式(4-8)の E_2 に相当する。したがって最終的に析出物中に蓄えられているエネルギー - 量は E_1 と E_2 の差として与えられ、これが析出物の弾性歪エネルギー - である。さて、この E_1 と E_2 を計算するにあたり、まず e_{ij}^T は2相の格子定数より算出できる。また弾性定数も既知とすると未知数は e_{kl}^c のみである。この未知数 e_{kl}^c は平衡方程式(応力のつり合いの方程式)から定める。いま体積力を0とすると平衡方程式は次式のように表される。

$$\sigma_{ij,j} = 0 \quad (4-10)$$

式(4-10)に式(4-5)を代入する。

$$\sigma_{ij,j} = C_{ijkl} \left(\frac{\partial e_{kl}^c}{\partial r_j} + \frac{\partial e_{kl}^T}{\partial r_j} \right) \quad (4-11)$$

ここで変位 $u(\mathbf{r})$ と eigen歪 $e_{ij}^T(\mathbf{r})$ を次式のようにフーリエ級数和にて定義する。

$$u(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{k}} U(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \quad (4-12)$$

$$e_{kl}^T(\mathbf{r}) = \eta_{kl} [c(\mathbf{r}) - c_0] = \int_{\mathbf{k}} \eta_{kl} Q(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \quad (4-13)$$

η_{kl} は格子ミスマッチで、A B 2 元系の相分解の場合、 $\eta_{kl} = (a_B - a_A) / a_A$ にて定義される。ここで、 a_A と a_B はそれぞれ A 金属と B 金属の格子定数である。 $c(\mathbf{r})$ は位置 \mathbf{r} における溶質原子濃度で、 c_0 は合金組成である。また式(4-13)においてベガ - ド則を仮定している。

さて、全歪 e_{kl}^c は変位 $u(\mathbf{r})$ を距離で微分することにより次式で与えられる。

$$e_{kl}^c(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_k}{\partial r_l} + \frac{\partial u_l}{\partial r_k} \right) = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} i \{ k_k U_l(\mathbf{k}) + k_l U_k(\mathbf{k}) \} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \quad (4-14)$$

式(4-13)と(4-14)を式(4-11)に代入し、整理すると平衡方程式は次式のように書き換えられる。

$$\frac{1}{2} \{ C_{ijkl} k_j k_k U_l(\mathbf{k}) + C_{ijkl} k_j k_l U_k(\mathbf{k}) \} = -i C_{ijmn} k_j \eta_{mn} Q(\mathbf{k}) \quad (4-15)$$

ここで、式(4-15)の右辺の添え字を kl から mn に変えている。式(4-15)は右辺および左辺で独立に $ijkl$ および $ijmn$ について総和を取った時に、両辺が等しくなるのである。もし $kl = mn$ として記述してしまうと、右辺と左辺の各項が項別に連動してしまい、式(4-15)は恒等式になってしまう。したがって、このような誤解をまねかないように右辺の添え字を kl から mn に変更した。なお ij は変更することが出来ない。これは j (もしくは i) 方向は、平衡方程式にて微分する方向であり、これは両辺とも共通であるからである。

さて、ここで関数 $\Omega_{il}^{-1}(\mathbf{k})$ を次式にて定義する。

$$\Omega_{il}^{-1}(\mathbf{k}) = C_{ijkl} k_j k_k \quad (= C_{ijk} k_j k_k = C_{ijk} k_j k_l = \Omega_{ik}^{-1}(\mathbf{k})) \quad (4-16)$$

式(4-16)の逆行列 $\Omega_{il}(\mathbf{k})$ を式(4-15)の両辺にかけると次のようになる。

$$U_l(\mathbf{k}) = -i C_{ijkl} k_j \eta_{kl} \Omega_{il}(\mathbf{k}) Q(\mathbf{k}) \quad (4-17)$$

式(4-17)を式(4-14)に代入する。なおここで見易くするため添え字 ij を pq に変えた。

$$e_{kl}^c(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} C_{pqmn} \{ k_k k_q \Omega_{pl}(\mathbf{k}) + k_l k_q \Omega_{pk}(\mathbf{k}) \} \eta_{mn} Q(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \quad (4-18)$$

次に $\Omega_{pl}(\mathbf{k})$ のフーリエ変換 $G_{pl}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ を次式で定義する。

$$G_{pl}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \equiv \int_{\mathbf{k}} \Omega_{pl}(\mathbf{k}) \exp\{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}')\} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \quad (4-19)$$

上式の両辺を r_q と r_k で微分する。

$$G_{pl,qk}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = -\int_{\mathbf{k}} k_q k_k \Omega_{pl}(\mathbf{k}) \exp\{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}')\} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \quad (4-20)$$

また、式(4-13)の \mathbf{r} を \mathbf{r}' に書き換えると次式が得られる。

$$e_{mn}^T(\mathbf{r}') = \int_{\mathbf{k}} \eta_{mn} Q(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}') \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \quad (4-21)$$

式(4-21)を逆フーリエ変換する。

$$\eta_{mn} Q(\mathbf{k}) = \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}'} e_{mn}^T(\mathbf{r}') \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (4-22)$$

式(4-20)と(4-22)を式(4-18)へ代入する。

$$\begin{aligned} e_{kl}^c(\mathbf{r}) &= \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}'} e_{mn}^T(\mathbf{r}') \left[\frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} C_{pqmn} \{k_k k_q \Omega_{pl}(\mathbf{k}) + k_l k_q \Omega_{pk}(\mathbf{k})\} \exp\{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}-\mathbf{r}')\} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \right] d\mathbf{r}' \\ &= -\frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}'} e_{mn}^T(\mathbf{r}') \left[\frac{1}{2} C_{pqmn} \{G_{pl,qk}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + G_{pk,ql}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\} \right] d\mathbf{r}' \\ &= -\frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}'} \left[C_{pqmn} e_{mn}^T(\mathbf{r}') \frac{G_{pl,qk}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + G_{pk,ql}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}{2} \right] d\mathbf{r}' \end{aligned} \quad (4-23)$$

式(4-23)を式(4-6)へ代入

$$\begin{aligned} E_{incl} &= E_1 - E_2 \\ &= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} e_{ij}^T e_{kl}^T d\mathbf{r} - \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} e_{ij}^T e_{kl}^c d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} e_{ij}^T e_{kl}^T d\mathbf{r} \\ &\quad + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} e_{ij}^T \left[-\frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}'} \left\{ C_{pqmn} e_{mn}^T(\mathbf{r}') \frac{G_{pl,qk}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') + G_{pk,ql}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}{2} \right\} d\mathbf{r}' \right] d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (4-24)$$

() \mathbf{r} と \mathbf{r}' がそれぞれ別の析出物内にあるとき、上式の第2項は弾性相互作用エネルギー - E_{int} の計算式に等しい。

式(4-24)は実空間におけるエネルギー表示であるが、次にこれをフーリエ空間における表記に書き換える。まず E_1 は次式にて計算される。

$$\begin{aligned}
E_1 &= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} e_{ij}^T e_{kl}^T d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left\{ \int_{\mathbf{k}} \int_{\mathbf{k}'} \eta_{ij} \eta_{kl} Q(\mathbf{k}) Q(\mathbf{k}') \exp\{i(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}\} \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \right\} d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2} C_{ijkl} \int_{\mathbf{k}} \int_{\mathbf{k}'} \eta_{ij} \eta_{kl} Q(\mathbf{k}) Q(\mathbf{k}') \left\{ \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \exp\{i(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}\} d\mathbf{r} \right\} \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= \frac{1}{2} C_{ijkl} \int_{\mathbf{k}} \int_{\mathbf{k}'} \eta_{ij} \eta_{kl} Q(\mathbf{k}) Q(\mathbf{k}') \delta\{-(\mathbf{k} + \mathbf{k}')\} \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} C_{ijkl} \eta_{ij} \eta_{kl} Q(\mathbf{k}) Q(-\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}
\end{aligned} \tag{4-25}$$

また同様に計算することによって、 E_2 は次式にて与えられる。

$$\begin{aligned}
E_2 &= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} e_{ij}^T e_{kl}^c d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \eta_{ij} C_{ijkl} \left[\frac{k_k \Omega_{pl}(\mathbf{k}) k_q + k_l \Omega_{pk}(\mathbf{k}) k_q}{2} \right] C_{pqmn} \eta_{mn} Q(\mathbf{k}) Q(-\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}
\end{aligned} \tag{4-26}$$

式(4-25)と(4-26)より E_{incl} は最終的に次式にて与えられる。

$$E_{incl} = E_1 - E_2 = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} B(\mathbf{k}) Q(\mathbf{k}) Q(-\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \tag{4-27}$$

ここで

$$B(\mathbf{k}) \equiv C_{ijkl} \eta_{ij} \eta_{kl} - \eta_{ij} C_{ijkl} \left[\frac{k_k \Omega_{pl}(\mathbf{k}) k_q + k_l \Omega_{pk}(\mathbf{k}) k_q}{2} \right] C_{pqmn} \eta_{mn} \tag{4-28}$$

さらに $\omega_{pl}^{-1}(\mathbf{n})$ を次式で定義する。

$$\omega_{pl}^{-1}(\mathbf{n}) \equiv C_{pqkl} n_q n_k \tag{4-29}$$

\mathbf{n} は \mathbf{k} 方向の単位ベクトルである。

式(4-16)式と(4-29)より、

$$\Omega_{pl}(\mathbf{k}) = \frac{\omega_{pl}(\mathbf{n})}{|\mathbf{k}|^2} \tag{4-30}$$

が導かれる。これを式(4-28)に代入すると $B(\mathbf{k})$ は次式のように方向のみの関数となる。

$$B(\mathbf{k}) = B(\mathbf{n}) = C_{ijkl} \eta_{ij} \eta_{kl} - \eta_{ij} C_{ijkl} \left[\frac{n_k \omega_{pl}(\mathbf{n}) n_q + n_l \omega_{pk}(\mathbf{n}) n_q}{2} \right] C_{pqmn} \eta_{mn} \tag{4-31}$$

これより E_{incl} は次式にて与えられる。

$$E_{incl} = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} B(\mathbf{n}) Q(\mathbf{k}) Q(-\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \quad (4-32)$$

式(4-31)の $B(\mathbf{n})$ は \mathbf{k} の方向のみに依存するので、固体が等方弾性体の場合には、 $B(\mathbf{n})$ は定数となり次式のように書くことが出来る。

$$B = \frac{2E}{1-\nu} \quad (4-33)$$

E はヤング率、 ν はポアソン比である。これより等方弾性体の弾性歪エネルギーは次式のように表される。

$$E_{incl} = \frac{1}{2} B \int_{\mathbf{k}} Q(\mathbf{k}) Q(-\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \quad (4-34)$$

さらにパ - シバルの公式より式(4-34)は次式のように書き換えられる。

$$E_{incl} = \frac{1}{2V} B \int_{\mathbf{r}} c(\mathbf{r}) c(-\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (4-35)$$

ここで対称な組織を仮定し、 $c(\mathbf{r}) = c(-\mathbf{r})$ と置いても一般性は失われない。したがって E_{incl} は以下の様になる。

$$E_{incl} = \frac{1}{2V} B \int_{\mathbf{r}} c^2(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (4-36)$$

式(4-36)の積分部分は相分解に伴う分解量であり、これより相分解の進行に伴い弾性歪エネルギーは増大することがわかる。