

5 . 弾性相互作用エネルギー - の評価

5-1 析出物間の弾性相互作用エネルギー - の評価

実際の2相組織内には通常数多くの析出物が存在している。個々の整合析出物の周辺は弾性的に歪んでいるので、2個の析出物が接近している場合、各々の析出物を作る歪場が干渉を起こし、析出物間に弾性相互作用エネルギー - が生じる。本章ではまず始めに最も単純な場合として等方等質かつhomogeneousな固体を例に取り、析出粒子間の弾性相互作用エネルギー - を算出する。

まず析出物の内部および外部応力場を導出する。設定条件として析出物は球状とし析出物のeigen歪は $e_{kl}^T(\mathbf{r}) = \delta_{kl}\varepsilon_0$ (\mathbf{r} :析出物内部)、 $e_{kl}^T(\mathbf{r}) = 0$ (\mathbf{r} :析出物外部)とする。 δ_{kl} はクロネッカ - のデルタである。等方等質かつhomogeneousな固体における式(4-19)のグリ - ン関数 $G_{pl}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ はすでにLoad KelvinおよびStokesによって次式のように導かれている。

$$G_{pl}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{\bar{r}_p \bar{r}_l / \bar{r}^3 + (3 - 4\nu)\delta_{pl} / \bar{r}}{16\pi(1 - \nu)\mu} \quad (5-1)$$

ここで $\bar{r}_i = r_i - r'_i$ および $\bar{r} = \sqrt{\bar{r}_i \cdot \bar{r}_i}$ である。固体内の点 r における応力 $\sigma_{ij}(\mathbf{r})$ は、式(5-1)をフックの法則に代入して次式にて与えられる。

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}(\mathbf{r}) &= C_{ijkl} \left[e_{kl}^c(\mathbf{r}) - e_{kl}^T(\mathbf{r}) \right] \\ &= C_{ijkl} \left[-\frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}'} \left\{ C_{pqmn} e_{mn}^T(\mathbf{r}') \frac{G_{pl,qk}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + G_{pk,ql}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{2} \right\} d\mathbf{r}' - e_{kl}^T(\mathbf{r}) \right] \end{aligned} \quad (5-2)$$

式(5-2)に式(5-1)を代入し整理すると、析出物の内部と外部では応力状態は異なり以下の様になる。

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r}) = -\frac{2E}{3(1 - \nu)} \varepsilon_0 \delta_{ij} \quad (\mathbf{r}: \text{析出物内部}) \quad (5-3)$$

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{E}{3(1 - \nu)} \varepsilon_0 \left(\frac{R_0^3}{r^3} \delta_{ij} - \frac{r_i r_j}{r^5} \right) \quad (\mathbf{r}: \text{析出物外部}) \quad (5-4)$$

ここで $r = |\mathbf{r}| = \sqrt{r_i \cdot r_i}$ で、 R_0 は析出物の半径である。

さて今、2個の析出物AおよびBからなる系を考える。Aの析出物に起因するeigen歪、全歪、弾性歪および応力をそれぞれ ${}^A e_{ij}^T$ 、 ${}^A e_{ij}^c$ 、 ${}^A e_{ij}$ および ${}^A \sigma_{ij}$ とし、Bの析出物によるものを ${}^B e_{ij}^T$ 、 ${}^B e_{ij}^c$ 、 ${}^B e_{ij}$ および ${}^B \sigma_{ij}$ とする。歪量はベクトルであるので重ね合わせができ、AおよびBの2析出物系全体の弾性歪エネルギー - E_{str} は次式にて与えられる。

$$\begin{aligned} E_{str} &= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} ({}^A e_{ij} + {}^B e_{ij}) ({}^A e_{kl} + {}^B e_{kl}) d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} ({}^A e_{ij}^c - {}^A e_{ij}^T) ({}^A e_{kl}^c - {}^A e_{kl}^T) d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} ({}^B e_{ij}^c - {}^B e_{ij}^T) ({}^B e_{kl}^c - {}^B e_{kl}^T) d\mathbf{r} \\ &\quad + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} ({}^A e_{ij}^c - {}^A e_{ij}^T) ({}^B e_{kl}^c - {}^B e_{kl}^T) d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} ({}^B e_{ij}^c - {}^B e_{ij}^T) ({}^A e_{kl}^c - {}^A e_{kl}^T) d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (5-5)$$

式(5-5)の始めの2項はそれぞれA, B析出物が単独に1個存在した時の弾性歪エネルギー - である。後の2項がA, B析出物間の弾性相互作用エネルギー - E_{int} であり、第3項はA析出物の応力場がB析出物の歪場に作用した時の過剰エネルギー - で、第4項が逆にB析出物の応力場がA析出物の歪

場に作用した時の過剰エネルギー - である。これより A 析出物 1 個の弾性歪エネルギー - の受持ち量は次式にて与えられる。

$${}^A E_{str} = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} ({}^A e_{ij}^c - {}^A e_{ij}^T) ({}^A e_{kl}^c - {}^A e_{kl}^T) d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} ({}^B e_{ij}^c - {}^B e_{ij}^T) ({}^A e_{kl}^c - {}^A e_{kl}^T) d\mathbf{r} \quad (5-6)$$

また、A 析出物 1 個当りの弾性相互作用エネルギー - E_{int} は次式にて与えられる。

$$E_{int} = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} {}^B \sigma_{ij} ({}^A e_{ij}^c - {}^A e_{ij}^T) d\mathbf{r} \quad (5-7)$$

ここで式(5-7)を展開し、ガウスの定理を用いると上式は次のように書き換えられる。

$$E_{int} = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} {}^B \sigma_{ij} ({}^A e_{ij}^c - {}^A e_{ij}^T) d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \int_s {}^B \sigma_{ij} {}^A u_i n_j dS - \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} {}^B \sigma_{ij,j} {}^A u_i d\mathbf{r} - \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} {}^B \sigma_{ij} {}^A e_{ij}^T d\mathbf{r} \quad (5-8)$$

いま外力は存在しない場合を考えているので外力とのつりあい条件より ${}^B \sigma_{ij} n_j = 0$ 、また内部応力のつりあい条件より ${}^B \sigma_{ij,j} = 0$ である。したがって式(5-8)の始めの 2 項は消え、弾性相互作用エネルギー - は次式で与えられる。

$$E_{int} = -\frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} {}^B \sigma_{ij} {}^A e_{ij}^T d\mathbf{r} \quad (5-9)$$

さて、上式において ${}^B \sigma_{ij}$ は B 析出物の外部応力場を表しており式(5-4)にて与えられる。また ${}^A e_{ij}^T$ は A 析出物の eigen 歪であり ${}^A e_{ij}^T = \varepsilon_0 \delta_{ij}$ (析出物内部)、 ${}^A e_{ij}^T = 0$ (析出物外部) で与えられる。結局、式(5-9)の積分は A 析出物内部のみ行えばよく、式(5-9)に式(5-4)を代入して E_{int} を算出すると以下のようなになる。

$$E_{int} = 0 \quad (5-10)$$

このように弾性相互作用エネルギー - は 0 になってしまう。 $E_{int} = 0$ となる理由は以下のように理解することができる。

まず B 析出物を作る外部応力場は式(5-4)より純せん断の応力場である。一方 A 析出物の作る内部歪場は純膨張の歪場である。したがってこの 2 種類の応力場と歪場はお互いに直交するので相互作用は存在せず、弾性相互作用エネルギー - は 0 となるのである。しかし弾性相互作用エネルギー - はどのような場合でも 0 となるとは限らない。B 析出物の外部応力場が純せん断になるのは固体を等方等質と仮定したためである。実際の材料の大部分は弾性異方性を有し、かつ inhomogeneous な状態にある。したがってこの弾性異方性および弾性定数の不均一性まで考慮すれば弾性相互作用エネルギー - は 0 にはならない。そこで以下ではこれらの点まで考慮して弾性相互作用エネルギー - を導出する。

いま、A, B 析出物の中心の位置ベクトルをそれぞれ \mathbf{R}_A と \mathbf{R}_B とする。また析出物の中心を原点に置いた場合のベクトルを \mathbf{r}' とする。これより A および B 析出物内部を表すベクトル $\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B$ は次式にて与えられる。

$$\mathbf{r}_A = \mathbf{R}_A + \mathbf{r}' \quad (5-11)$$

$$\mathbf{r}_B = \mathbf{R}_B + \mathbf{r}' \quad (5-12)$$

I (= A, B) 析出物の中心を原点に置いた場合、 $Q_I(\mathbf{k})$ を次式にて定義する。

$$Q_I(\mathbf{k}) = \int_{r'} c_I(\mathbf{r}') \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (5-13)$$

ここで $c_I(r')$ は r' が析出物内にある時にのみ1,他は0となる関数である。 $Q_I(\mathbf{k})$ はI析出物の形状関数と呼ばれる。一方、析出物の外に原点を置いた座標系にて与えられる形状関数を ${}^A Q(\mathbf{k})$, ${}^B Q(\mathbf{k})$ とすると、式(5-11)(5-12)を用いて次式にて与えられる。

$$\begin{aligned} {}^A Q(\mathbf{k}) &= \int_{r_A} c(\mathbf{r}_A) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_A) d\mathbf{r}_A = \int_{r'} c(\mathbf{R}_A + \mathbf{r}') \exp\{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_A + \mathbf{r}')\} d\mathbf{r}' \\ &= \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_A) \int_{r'} c(\mathbf{R}_A + \mathbf{r}') \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}') d\mathbf{r}' = \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_A) Q_A(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (5-14)$$

$$\begin{aligned} {}^B Q(\mathbf{k}) &= \int_{r_B} c(\mathbf{r}_B) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_B) d\mathbf{r}_B = \int_{r'} c(\mathbf{R}_B + \mathbf{r}') \exp\{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_B + \mathbf{r}')\} d\mathbf{r}' \\ &= \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_B) \int_{r'} c(\mathbf{R}_B + \mathbf{r}') \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}') d\mathbf{r}' = \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_B) Q_B(\mathbf{k}) \end{aligned} \quad (5-15)$$

析出物間の弾性相互作用エネルギー - E_{int} は式(4-27)の $Q(\mathbf{k})$ と $Q(-\mathbf{k})$ をそれぞれ ${}^A Q(\mathbf{k})$ と ${}^B Q(-\mathbf{k})$ 置き、また $B(\mathbf{k})$ を式(5-17)のように置き換えることによって次式にて計算される。

$$\begin{aligned} E_{int} &= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} B'(\mathbf{k}) {}^A Q(\mathbf{k}) {}^B Q(-\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} B'(\mathbf{k}) Q_A(\mathbf{k}) Q_B(-\mathbf{k}) \exp\{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B)\} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} B'(\mathbf{n}) Q_A(\mathbf{k}) Q_B(-\mathbf{k}) \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \end{aligned} \quad (5-16)$$

$$B'(\mathbf{n}) = -\eta_{ij} C_{ijkl} \left[\frac{n_k \omega_{pl}(\mathbf{n}) n_q + n_l \omega_{pk}(\mathbf{n}) n_q}{2} \right] C_{pqmn} \eta_{mn} \quad (5-17)$$

ここで $\mathbf{R} = \mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B$ である。

析出物のeigen歪として等価変態歪を用いれば非等方弾性体かつinhomogeneousな場合の弾性相互作用エネルギー - も計算できる。

5-2 析出物と外力との相互作用エネルギー - の評価

以上までの議論では固体の内部の弾性歪エネルギー - のみを問題にしてきたが、本項では外力を考慮した場合の弾性歪エネルギー - の評価法について説明する。外力が存在することによって新たに生じる過剰エネルギー - には2種類ある。1つは外力と内部変位場の相互作用エネルギー - F_{int} で、もう1つは地相内にinhomogeneityが存在する場合に生じる、外力と内部歪場との相互作用に起因する弾性歪エネルギー - E_{inh} である。まず F_{int} の評価法から説明する。議論を簡単にするため homogeneousな場合を考え、内部応力場を以下のように定義する。

$$e_{ij}^c = e_{ij} + e_{ij}^T \quad (5-18)$$

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} e_{kl} \quad (5-19)$$

$$\sigma_{ij,j} = 0 \quad (5-20)$$

$$\sigma_{ij} n_j = 0 \quad (5-21)$$

また、外部応力のみ存在する場合の固体内部応力場を以下のように定義する。

$$e_{ij}^{cA} = e_{ij}^A \quad (5-22)$$

$$\sigma_{ij}^A = C_{ijkl} e_{kl}^A \quad (5-23)$$

$$\sigma_{ij,j}^A + P_i = 0 \quad (5-24)$$

$$\sigma_{ij}^A n_j = X_i \quad (5-25)$$

ここで指標Aが付いている変数は全て外部応力に関係する項である。 P_i は外部からの体積力で、 X_i は外部からの面積力である。

以上より整合析出物を含む固体に外部応力が作用している状態における全自由エネルギー - F は次式にて与えられる。

$$F = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{V}} (\sigma_{ij} + \sigma_{ij}^A)(e_{ij} + e_{ij}^A) d\mathbf{r} - \int_{\mathcal{V}} P_i (u_i + u_i^A) d\mathbf{r} - \int_{\mathcal{S}} X_i (u_i + u_i^A) d\mathbf{S} \quad (5-26)$$

式(5-26)の第1項は固体内部に蓄えられたエネルギー - で第2および第3項が外力がなした仕事である。さらに式(5-26)を展開すると次式が得られる。

$$F = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{V}} \sigma_{ij} e_{ij} d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_{\mathcal{V}} \sigma_{ij}^A e_{ij}^A d\mathbf{r} - \left[\int_{\mathcal{V}} P_i u_i^A d\mathbf{r} + \int_{\mathcal{S}} X_i u_i^A d\mathbf{S} \right] - \left[\int_{\mathcal{V}} P_i u_i d\mathbf{r} + \int_{\mathcal{S}} X_i u_i d\mathbf{S} \right] \quad (5-27)$$

ここで、 $\frac{1}{2} \int_{\mathcal{V}} \sigma_{ij} e_{ij}^A d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \int_{\mathcal{V}} \sigma_{ij}^A e_{ij} d\mathbf{r} = 0$ である。なぜならばガウスの定理より $\int_{\mathcal{V}} \sigma_{ij} e_{ij}^A d\mathbf{r}$ は以下のように書けるからである。

$$\int_{\mathcal{V}} \sigma_{ij} e_{ij}^A d\mathbf{r} = \int_{\mathcal{S}} \sigma_{ij}^A u_i^A n_j d\mathbf{S} - \int_{\mathcal{V}} \sigma_{ij,j}^A u_i^A d\mathbf{r} \quad (5-28)$$

式(5-20)と(5-21)より式(5-28)は0となる。また $\sigma_{ij} e_{ij}^A = C_{ijkl} e_{kl} e_{ij}^A = \sigma_{kl}^A e_{kl} = \sigma_{ij}^A e_{ij}$ より $\frac{1}{2} \int_{\mathcal{V}} \sigma_{ij}^A e_{ij} d\mathbf{r} = 0$ も成立する。このように外部応力と析出物のみが作る内部応力とは弾性エネルギー - 的に相互作用を持たない。このことはColonnettiの定理と呼ばれている。式(5-27)の第1項は内部応力のみ存在する時の弾性歪エネルギー - で、第2と第3項が外力のみ存在した時の物体の有する力学的エネルギー - 、第4項が外力と内部応力の相互作用エネルギー - である。この4項目を改めて F_{int} と書くと以下の様になる。

$$F_{int} = - \int_{\mathcal{V}} P_i u_i d\mathbf{r} - \int_{\mathcal{S}} X_i u_i d\mathbf{S} = \int_{\mathcal{V}} \sigma_{ij,j}^A u_i d\mathbf{r} - \int_{\mathcal{S}} \sigma_{ij}^A u_i n_j d\mathbf{S} = - \int_{\mathcal{V}} \sigma_{ij}^A e_{ij}^c d\mathbf{r} \quad (5-29)$$

式(5-20)と(5-21)とColonnettiの定理およびガウスの定理より式(5-29)は次式のように書き換えることができる。($e_{ij}^c = e_{ij} + e_{ij}^T$ を利用)

$$F_{int} = - \int_{\mathcal{V}} \sigma_{ij}^A e_{ij}^T d\mathbf{r} \quad (5-30)$$

これより、式(5-30)を計算することによって F_{int} は算出される。

次にもう1つの外力との相互作用エネルギー - E_{inh} の評価法について説明する。この場合も議論を簡単化するため、格子ミスフィットが0でinhomogeneousな析出物を含む固体に面積力のみが作用している場合を考える。まず外力のみが存在した時の応力を σ_{ij}^A 、変位を u_i^A とし、inhomogeneousな析出物が存在することによる応力の変化量を τ_{ij} 、変位の変化量を u_i^c とする。これより全応力

σ'_{ij} および全変位 u'_i は以下のように表される。

$$\sigma'_{ij} = \sigma^A_{ij} + \tau_{ij} \quad (5-31)$$

$$u'_i = u^A_i + u_i \quad (5-32)$$

これより全自由エネルギー - F は次式にて与えられる。

$$\begin{aligned} F &= \frac{1}{2} \int_r \sigma'_{ij} u'_{i,j} d\mathbf{r} - \int_s X_i u'_i d\mathbf{S} \\ &= \left[\frac{1}{2} \int_r \sigma^A_{ij} u^A_{i,j} d\mathbf{r} - \int_s X_i u^A_i d\mathbf{S} \right] + \left[\frac{1}{2} \int_r \sigma^A_{ij} u'_i d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_r \tau_{ij} u^A_{i,j} d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_r \tau_{ij} u'_i d\mathbf{r} - \int_s X_i u'_i d\mathbf{S} \right] \end{aligned} \quad (5-33)$$

式(5-33)の第1項は外力のみ存在した時の弾性歪エネルギー - で、第2項が外力とinhomogeneousな析出物との相互作用エネルギー - E_{inh} である。 E_{inh} のみを改めて書くと以下ようになる。

$$E_{inh} = \frac{1}{2} \int_r \sigma^A_{ij} u'_i d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_r \tau_{ij} u^A_{i,j} d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_r \tau_{ij} u'_i d\mathbf{r} - \int_s X_i u'_i d\mathbf{S} \quad (5-34)$$

式(5-34)の第2項と第3項の和は0となる。なぜならば式(5-31),(5-32)およびガウスの定理より

$$\frac{1}{2} \int_r \tau_{ij} u^A_{i,j} d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_r \tau_{ij} u'_i d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \int_r (\sigma'_{ij} - \sigma^A_{ij}) u'_{i,j} d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \int_s (\sigma'_{ij} - \sigma^A_{ij}) u'_i n_j d\mathbf{S} - \frac{1}{2} \int_r (\sigma'_{ij,j} - \sigma^A_{ij,j}) u'_i d\mathbf{r}$$

ここで $(\sigma'_{ij} - \sigma^A_{ij}) n_j = X_i - X_i = 0$ および $\sigma'_{ij,j} = \sigma^A_{ij,j} = 0$ であるので結局、上式は0となる。したがって E_{inh} は次式にて与えられる。

$$E_{inh} = \frac{1}{2} \int_r \sigma^A_{ij} u'_i d\mathbf{r} - \int_s X_i u'_i d\mathbf{S} \quad (5-35)$$

さらに式(5-35)にガウスの定理を適用すると E_{inh} は以下ようになる。

$$\begin{aligned} E_{inh} &= \frac{1}{2} \int_r \sigma^A_{ij} u'_i d\mathbf{r} - \int_s X_i u'_i d\mathbf{S} = \frac{1}{2} \int_s \sigma^A_{ij} u'_i n_j d\mathbf{S} - \frac{1}{2} \int_r \sigma^A_{ij,j} u'_i d\mathbf{r} - \int_s X_i u'_i d\mathbf{S} \\ &= \frac{1}{2} \int_s X_i u'_i d\mathbf{S} - \int_s X_i u'_i d\mathbf{S} = -\frac{1}{2} \int_s X_i u'_i d\mathbf{S} \end{aligned} \quad (5-36)$$

ところで、 $-\int_s X_i u'_i d\mathbf{S}$ は式(5-30)の外力と内部変位場の相互作用エネルギー - F_{int} に相当している。したがって、式(5-30)より $-\int_s X_i u'_i d\mathbf{S} = -\int_r \sigma^A_{ij} e^{Th}_{ij} d\mathbf{r}$ となり、結局、式(5-36)は、

$$E_{inh} = -\frac{1}{2} \int_r \sigma^A_{ij} e^{Th}_{ij} d\mathbf{r} \quad (5-37)$$

のように書き換えることができる。 e^{Th}_{ij} はinhomogeneousな応力場をhomogeneousな応力場で再現するための等価変態歪である。