マイクロメカニクス

(第3回)

もり
森つとむ
勉*

IV. エネルギーと力

転位を扱う際、それに働く力をどう定義するか一寸とまどうこともある。極論すると、それが単なる原子の configuration にすぎないからである。寸法の大きな介在物ならまだいいが、弾性論モデルで点欠陥を扱うときも、点欠陥に働く力とは何だろうと思ったりする。こういうとき、適当なエネルギーを決め、われわれの対象(転位とか点欠陥とか)とするものを少し $\delta\alpha$ だけ動かし、適当なエネルギーの変化分 δF を算えて、

$$f_\alpha = -(\delta F / \delta \alpha) (= -\partial F / \partial \alpha) \quad (\text{IV} \cdot 1)$$

をもって、われわれの対象したものに働く、 α 方向の力と定義する。 α のとりようによっては、 f_α はときにはモーメントにもなる。適当なエネルギーとは何だろうか。釣合のとれていないときはゼロとなってくれ、釣合っていないときは変化の進む向きに正となる f_α が出るものが都合がよい。そこで「われわれの対象としたものを含む物体(系)の釣合や、その増減によって変化の起る方向が議論できる、熱力学的ポテンシャルを F ととる」ということは、ごく自然なことであろう。たとえば、転位を含む物体(系)が、一定の外力、一定の温度のもとにあるという拘束を受けているなら、転位に働く力を考えるとき、 F として、その物体(系)のギブス自由エネルギーをとる。また、たとえば、転位を含む物体(系)が単に一定の温度にさらされているという条件下にあるなら、 F として、その物体(系)のヘルムホルツ自由エネルギーをとる。これに関連して、昔、転位1モルは何グラムであるかとたずねられたことを、いつもなつかしく思い出す。一定の温度という制限を加えると、ある物体が弾性的に歪んでいることのみによるエネルギーの上昇分(=弾性エネルギー)は、ヘルムホルツ自由エネルギーであることはすでに述べた。他の原因に基づくヘルムホルツ自由

エネルギーをこれに加え、外力のポテンシャルをさらに加えると、その物体のギブス自由エネルギーとなることもすでに述べた。本質論ではないが、何故そうなるか、そして適当なエネルギー量から(IV・1)を通じて定義される力は、ごく自然な量になっていることを、易しい例をもって調べることにする。

図 IV・1 のように、断面積 A のシリンダーに理想気体を入れ、ふたをし、質量 m の錘りをおく。このシリ

図 IV・1

ンダー(と思考上は地球と錘り)を温度 T の恒温浴につけて、理想気体を一定温度 T に保つ。われわれの着目しているものとして、(重さのない)ふたをとり、その位置を、シリンダーの底からの距離 x で表す。ふたに働いている力は、 x の正方向に

$$f = -mg + RT/x \quad (\text{IV} \cdot 2)$$

である。 $x = x_0 = RT/(mg)$ で釣合(安定)が生じる。これを、(IV・1)のような形で表現してみるには、 F として、

$$F = mgx - RT \log(V/V_0), \quad V = Ax \quad (\text{IV} \cdot 3)$$

をとればよいだろう。 V は理想気体の体積である。 V_0 は定数と思えばよい。 mgx は錘り(と地球)のポテンシャルエネルギーなので、これは、錘り(と地球)のヘルムホルツ自由エネルギーである。理想気体なので、 $-RT \log(V/V_0)$ は、この理想気体の温度 T におけるヘルムホルツ自由エネルギーである。そこで(IV・3)は、ふたを含

* 東京工業大学教授; 総合理工学研究科
Introduction to Micromechanics; Tsutomu Mori (Tokyo
Institute of Technology, Tokyo)
1978年7月28日受理

む, 「理想気体と錘り(と地球)」なる物体(系)のヘルムホルツ自由エネルギーである. ところが, この物体(系)は一定温度に保たれており, こういう物体(系)の釣合と変化の起こる向き(ふたが上がるか下がるか)は, ヘルムホルツ自由エネルギーが極値をとることや, その増減によって論じられると熱力学の本にある. そこで, 単に力だけをとり出して(Ⅳ・2)を書き, それを少し面倒だが(Ⅳ・3)を導入して(Ⅳ・1)を使って見直したことは, 熱力学の教えをうまく利用したことになっていることを知る. なお, $x=x_0$ は F の極小を与えるので, 安定な釣合である. ここで, (Ⅳ・3)をもう1回書き変えてみる. 理想気体に外からかかっている圧力 P は, $P=mg/A$ で与えられるので, (Ⅳ・3)は

$$F=PV-RT \log(V/V_0) \quad (\text{Ⅳ} \cdot 3')$$

としても変わらない. PV というなじみのある量がでてきた. $-RT \log(V/V_0)$ が温度 T での理想気体のヘルムホルツ自由エネルギーなので, これに PV を加えたものは, 理想気体のギブス自由エネルギーとなっている. すなわち, (Ⅳ・3')またはこれと中味の同じ(Ⅳ・3)は, ふたを含む「理想気体」のギブス自由エネルギーでもあることを知る. そしてこの「理想気体」なる物体(系)は, 一定の力(圧力)を外から受け, 一定の温度に保たれているのである. ここで熱力学の教えを馬鹿みたいに繰返す. 「一定の温度, 一定の外力なる束縛を受けている物体(系)の釣合は, その物体(系)のギブス自由エネルギーの極値をとる状態で生じ, その物体が自然に起こす変化は, ギブス自由エネルギーの減少する向きに生じる.」してみると, (Ⅳ・3')で F を定義し, この極値($x=x_0$)で釣合を調べ, 力を(Ⅳ・1)で算え(変化がどう進むかを調べたことと等価である)たことも, 熱力学の教えを馬鹿みたいに実行したに過ぎないことになっている. そしてその結論は, 一見熱力学とは関係なく, 単なる力を算えて出した(Ⅳ・2)のいっていることと, まったく同じなのである.

以上の易しい問題を少しややこしく調べたわけは2つある. 第1は, $PV (=mgx)$ は, 外力のポテンシャルにすぎないことを見るためである. 第2は, 釣合や力を出すには, われわれの目をつけているものを含む物体(系)がいかなる束縛条件を受けているかを明確にし, その束縛条件のもとでの釣合や変化の起こる向きを議論するとき用いるその物体の熱力学ポテンシャルを使えば, 力が(Ⅳ・1)を介して無理なく算えられることを知るためである. そしてこの熱力学ポテンシャルは, 物体(系)の大きさ(範囲)を変えると, 中味は変わらないが, 名前が変わってくることを実例をもって理解するためである. 試みに, 「理想気体と恒温浴」を1つの物体(系), 「理想気体と恒温浴と錘り(地球)」を1つの物体(系)とみたとき,

(Ⅳ・3)で定義されたエネルギー量がどういう名前になるかを調べそしてそれは, その物体(系)の釣合や変化の起こる向きを議論するときに使う熱力学ポテンシャルになっていることを各自確かめて欲しい.

前にも述べたが, 本講は主として, 塑性的な歪の導入によって生じる, 弾性的な歪の発生を調べることを目的としている. このようなことをする楽しみの1つは, 変化の起こる向きの推定や, 釣合状態の検討が行える点にある. そこで以下では, こんな議論を行うに当たって必要な, 歪んでいることに起因するエネルギーを算える方法を調べることにしよう.

Ⅳ.1 弾性エネルギー

単位体積当りの弾性エネルギーは, 応力および弾性歪を使って, $\sigma_{ij} \epsilon_{ij}/2$ で定義される. 弾性歪のかわりに弾性 distortion を使って, $\sigma_{ij} \beta_{ji}/2$ としてもよい. 外部応力のみ存在する場合は他の書籍等にゆずるとして, 本講では内部応力が存在するときを扱うことにする. そして簡単化のため, 運動は無視できる場合(静的問題)に話を限ろう. 最初は, 内部応力のみ存在する問題を扱ってみる. eigen distortion を β_{ji}^* , 変位を u_i , 応力を σ_{ij} とする. これらは,

$$\begin{cases} u_{i,j} = \beta_{ji} + \beta_{ji}^* \\ \sigma_{ij} = C_{ijkl} \beta_{lk} \\ \sigma_{ij,j} = 0 \\ \sigma_{ij} n_j = 0 \quad (|D| \text{上}) \end{cases} \quad (\text{Ⅳ} \cdot 4)$$

のような式を満足している. ただし, 物体を D , その表面を $|D|$, 表面に外向きにたてた単位の法線を $\mathbf{n}$ としている. 定義により, 物体全体に含まれる弾性エネルギー E は,

$$E = \frac{1}{2} \int_D \sigma_{ij} \beta_{ji} d\mathbf{x} \left(= \frac{1}{2} \int_D \sigma_{ij} \epsilon_{ij} d\mathbf{x} \right) \quad (\text{Ⅳ} \cdot 5)$$

であり, これに(Ⅳ・4)を入れて,

$$E = \frac{1}{2} \int_D \sigma_{ij} u_{i,j} d\mathbf{x} - \frac{1}{2} \int_D \sigma_{ij} \beta_{ji}^* d\mathbf{x}$$

とする. 第1項にガウスの定理†を適用すると,

$$E = \frac{1}{2} \int_{|D|} \sigma_{ij} u_i n_j ds - \frac{1}{2} \int_D \sigma_{ij,j} u_i d\mathbf{x} - \frac{1}{2} \int_D \sigma_{ij} \beta_{ji}^* d\mathbf{x}$$

となる. この第1項, 第2項は, (Ⅳ・4)によってゼロ. したがって

$$E = -\frac{1}{2} \int_D \sigma_{ij} \beta_{ji}^* d\mathbf{x} \quad (\text{Ⅳ} \cdot 6)$$

あるいは等価な

† $\int_{|D|} f g n_i ds = \int_D (f g)_{,i} d\mathbf{x}$ または, $\int_D f g_{,i} d\mathbf{x} = \int_{|D|} f g n_i ds - \int_D f_{,i} g d\mathbf{x}$ のことで, 後の方の表現から, ガウスの定理を適用することを, 部分積分するとよくいう.

$$E = -\frac{1}{2} \int_D \sigma_{ij} \epsilon_{ij}^* d\mathbf{x} \quad (\text{N} \cdot 7)$$

を得る。(N・6),(N・7)を見て,(N・5)から単に符号が変わり,星印がついただけではないかと思う人がいたら,その人は,これまで内部応力状態にある物体の弾性エネルギーを算えたことがなかった人であると想像する。(N・6),(N・7)は非常に便利な表現なのである.すなわち, ϵ_{ij}^* または β_{ji}^* はたいてい物体Dの一部 Ω に局在するので,(N・6),(N・7)の積分範囲をDの代わりに Ω と書いてよく,計算が簡便となるからである.たとえば,一様な eigen 歪を持つた円体介在物 Ω による内部応力なら,その中の応力の一様性を使って,

$$E = -\sigma_{ij} \epsilon_{ij}^* \Omega / 2 \quad (\text{N} \cdot 8)$$

となり,掛算で計算がすんでしまう.

もしかしたら,周期解を使って内部応力を求めるのがふざかしい問題では,(N・6)または(N・7)の積分範囲が ∞ になってしまい,具合が悪いと思う人がいるかも知れぬ.しかし,実戦上,これは問題ではない.そういう問題では,単位体積当りに含まれる弾性エネルギーまたは,1周期の中にある1つの ϵ_{ij}^* を含む領域当りの弾性エネルギーを求めれば十分である.このときは次のように算えればよい.1つの周期の領域を D_0 とすれば,1周期当りの弾性エネルギー E_0 は,次のようになる.

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{1}{2} \int_{D_0} \sigma_{ij} \beta_{ji} d\mathbf{x} = \frac{1}{2} \int_{D_0} \sigma_{ij} u_{i,j} d\mathbf{x} \\ &\quad - \frac{1}{2} \int_{D_0} \sigma_{ij} \beta_{ji}^* d\mathbf{x} = \frac{1}{2} \int_{|D_0|} \sigma_{ij} u_i n_j ds \\ &\quad - \frac{1}{2} \int_{D_0} \sigma_{ij,j} u_i d\mathbf{x} - \frac{1}{2} \int_{D_0} \sigma_{ij} \beta_{ji}^* d\mathbf{x} \end{aligned}$$

第2項は釣合条件よりゼロ.周期解だから, $|D_0|$ 上で u_i と σ_{ij} が等しく, $\mathbf{n}$ が逆向きのところが必ずある.そこで第1項もゼロ.したがって

$$E_0 = -\frac{1}{2} \int_{D_0} \sigma_{ij} \beta_{ji}^* d\mathbf{x} = -\frac{1}{2} \int_{D_0} \sigma_{ij} \epsilon_{ij}^* d\mathbf{x}$$

となり,(N・6),(N・7)と同じようになってしまう.

[問題 IV.1]

等方質物質中の刃状転位, $\nu = (b, 0, 1)$, $\mathbf{b} = (b, 0, 0)$ による弾性エネルギーを求めよ.

刃状転位を x_3 軸に一致させると, $\beta_{21}^* = b \delta(x_2) H(-x_1)$,他の β_{ji}^* はゼロである.教科書を見るか,(III・40)で $V \rightarrow 0$ として, $\sigma_{21} = \{\mu b / [2\pi(1-\nu)]\} x_1(x_1^2 - x_2^2) / (x_1^2 + x_2^2)^2$ がわかる.そこで,(N・6)を使い

$$\begin{aligned} E &= -\frac{1}{2} \int_D \sigma_{ij} \beta_{ji}^* d\mathbf{x} = -\frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \int_{-\infty}^{\infty} dx_3 \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} H(-x_1) dx_1 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x_1(x_1^2 - x_2^2)}{(x_1^2 + x_2^2)^2} \delta(x_2) dx_2 \end{aligned}$$

となる.デルタ関数とHeaviside関数の性質を使って,

$$E = -\frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \int_{-\infty}^{\infty} dx_3 \int_{-\infty}^0 \frac{1}{x_1} dx_1$$

とする.これは ∞ の代わりに R ,0の代わりに r と書くと

$$E = \frac{\mu b^2}{4\pi(1-\nu)} \log \frac{R}{r} \int_{-\infty}^{\infty} dx_3$$

と直る.これより,刃状転位は単位長さ当り $\mu b^2 / \{4\pi(1-\nu)\} \cdot \log(R/r)$ だけの弾性エネルギーを持つと表現する.至極当然だろうが,ここに言葉のすりかえがあることに注意したい.つまり,弾性エネルギーは,転位を含む物体全体に含まれているが,その原因を作っている転位にしわ寄せして,転位の持つ弾性エネルギーというのである.ときには自己エネルギーといったりし,それを強調する意味で, E_S と書いたりする.

内部エネルギーを作っている原因がいくつあっても,(N・6),(N・7)は成立する.たとえば,領域 Ω_1 に eigen 歪 ϵ_{ij}^1 (原因1)があり,これが単独に存在するとき, σ_{ij}^1 なる内部応力を作るとする.また,領域 Ω_2 に eigen 歪 ϵ_{ij}^2 (原因2)があり,これが単独に存在するとき, σ_{ij}^2 なる内部応力を作るとする.両者が共に存在するときの弾性エネルギー E は,

$$E = -\frac{1}{2} \int_{\Omega_1 + \Omega_2} \sigma_{ij} \epsilon_{ij}^* d\mathbf{x}$$

と算えればよい. σ_{ij} は σ_{ij}^1 と σ_{ij}^2 の和であり,領域 Ω_1 では $\epsilon_{ij}^* = \epsilon_{ij}^1$,領域 Ω_2 では $\epsilon_{ij}^* = \epsilon_{ij}^2$ とする.ただ,多くの場合,このようなどんぶり勘定的なことはしないで,相互作用という言葉を使って,2つの原因が共存しているときの状況を表し,それに応じた表現式を使う.相互作用という言葉はまったく重宝なもので,濫用されているように思う.私は,よく,「わからなくなったら,相互作用があるためだといえ」と学生にいうくらいである.本講では,まさか自分自身をごまかすわけには行かないので,次のように定義することにする.

原因1のみ存在したとき,ある量 A が $A(1)$ なる値をとり,原因2のみが存在したとき,その量が $A(2)$ なる値をとるとする.原因1と原因2が共存したとき,その量が $A(1,2)$ となって,

$$A(1,2) \equiv A(1) + A(2)$$

ならば, A に関し,1と2は相互作用を持つといい,

$$A_I = A(1,2) - \{A(1) + A(2)\} \quad (\text{IV} \cdot 9)$$

を, A に関する,1と2の相互作用または,1と2の相互作用の A という.もし,

$$A(1,2) = A(1) + A(2)$$

なら, A に関し,1と2は相互作用を持たないという.

内部応力を作っている2つの原因と,それに基づく力学量を次のように書く.

$$\text{原因1} \begin{cases} u_{i,j}^1 = \beta_{ji}^1 + \beta_{ji}^{1*} \\ \sigma_{ij}^1 = C_{ijkl} \beta_{lk}^1 \\ \sigma_{ij,j}^1 = 0 \\ \sigma_{ij}^1 n_j = 0 \quad (|D| \text{上}) \end{cases} \quad (\text{N} \cdot 10)$$

$$\text{原因2} \begin{cases} u_{i,j}^2 = \beta_{ji}^2 + \beta_{ji}^{2*} \\ \sigma_{ij}^2 = C_{ijkl} \beta_{lk}^2 \\ \sigma_{ij,j}^2 = 0 \\ \sigma_{ij}^2 n_j = 0 \quad (|D| \text{上}) \end{cases} \quad (\text{N} \cdot 11)$$

これから、原因 1 と原因 2 が共存しているときの全弾性エネルギー E は、

$$E = \frac{1}{2} \int_D (\sigma_{ij}^1 + \sigma_{ij}^2) (\beta_{ji}^1 + \beta_{ji}^2) d\mathbf{x} \quad (\text{IV} \cdot 12)$$

となり、これは

$$E = \frac{1}{2} \int_D \sigma_{ij}^1 \beta_{ji}^1 d\mathbf{x} + \frac{1}{2} \int_D \sigma_{ij}^2 \beta_{ji}^2 d\mathbf{x} + \frac{1}{2} \int_D (\sigma_{ij}^1 \beta_{ji}^2 + \sigma_{ij}^2 \beta_{ji}^1) d\mathbf{x}$$

と直る。第 1 項は原因 1 のみ存在しているときの弾性エネルギー、第 2 項は原因 2 のみ存在しているときの弾性エネルギーである。したがって、定義により、原因 1 と 2 の相互作用の弾性エネルギーは、

$$E_I(1, 2) = \frac{1}{2} \int_D (\sigma_{ij}^1 \beta_{ji}^2 + \sigma_{ij}^2 \beta_{ji}^1) d\mathbf{x} \quad (\text{IV} \cdot 13)$$

となる。これは簡便な表現に直る。まず、

$\sigma_{ij}^1 \beta_{ji}^2 = C_{ijkl} \beta_{ik}^1 \beta_{jl}^2 = C_{klij} \beta_{ji}^2 \beta_{ik}^1 = \sigma_{ki}^2 \beta_{lk}^1 = \sigma_{ij}^2 \beta_{ji}^1$ に注意して、

$$E_I(1, 2) = \int_D \sigma_{ij}^1 \beta_{ji}^2 d\mathbf{x}$$

とし、これに (IV・11) を入れて、

$$E_I(1, 2) = \int_D \sigma_{ij}^1 u_{i,j}^2 d\mathbf{x} - \int_D \sigma_{ij}^1 \beta_{ji}^2 d\mathbf{x}$$

とする。第 1 項を部分積分して、

$$E_I(1, 2) = \int_{|D|} \sigma_{ij}^1 u_i^2 n_j ds - \int_D \sigma_{ij,j}^1 u_i^2 d\mathbf{x} - \int_D \sigma_{ij}^1 \beta_{ji}^2 d\mathbf{x}$$

とし、(IV・10) に注意すると、

$$E_I(1, 2) = - \int_D \sigma_{ij}^1 \beta_{ji}^2 d\mathbf{x} \quad \left(= - \int_D \sigma_{ij}^1 \varepsilon_{ji}^2 d\mathbf{x} \right) \quad (\text{IV} \cdot 14)$$

が得られる。あるいはこれと等価な

$$E_I(1, 2) = - \int_D \sigma_{ij}^2 \beta_{ji}^1 d\mathbf{x} \quad \left(= - \int_D \sigma_{ij}^2 \varepsilon_{ji}^1 d\mathbf{x} \right) \quad (\text{IV} \cdot 15)$$

でもよい。原因 1 は領域 Ω_1 に ε_{ij}^1 があって生じ、原因 2 は領域 Ω_2 に ε_{ij}^2 があって生じ、 Ω_1 と Ω_2 が重なってなければ、(IV・14) の積分範囲を Ω_2 、(IV・15) の積分範囲を Ω_1 としてもよい。

[問題 IV・2]

[問題 I・1] に登場した変態生成物による弾性エネルギーを求めよ (等方等質)。

まず、2 つの互いに重ならない球状領域 Ω_1 と Ω_2 をとり、双方に $\varepsilon_{ij}^* = \varepsilon \delta_{ij}$ を与える。[問題 III・4] で見たように、 Ω_1 による、 Ω_1 の外側の応力 σ_{pq}^1 は、

$$\sigma_{pq}^1 = \frac{2\mu(1+\nu)}{3(1-\nu)} \varepsilon a^3 \left(\frac{\delta_{pq}}{x^3} - 3 \frac{x_p x_q}{x^5} \right)$$

である。したがって、

$$\sigma_{pq}^1 \varepsilon_{pq}^2 = \frac{2\mu(1+\nu)}{3(1-\nu)} \varepsilon^2 a^3 \left(\frac{\delta_{pq} \delta_{pq}}{x^3} - 3 \frac{x_p x_q \delta_{pq}}{x^5} \right) = 0$$

となり、領域 1 と 2 は、弾性エネルギーに関して相互作用

を持たないことがわかる。また、領域 1 の中のそれ自身による応力は、 $\sigma_{pq}^1 = -4\mu(1+\nu)\varepsilon \delta_{pq}/\{3(1-\nu)\}$ なので、領域 1 の自己エネルギーは

$$E_S^1 = 2\mu(1+\nu)\varepsilon^2 \Omega_1 / (1-\nu) \quad (\text{IV} \cdot 16)$$

となる。領域 1 と 2 が弾性エネルギーに関して相互作用を持たなかったことは、(IV・16) が領域 1 の形に関係なく成立することを意味し、 Ω の中に $\varepsilon_{ij}^* = \varepsilon \delta_{ij}$ があるときの弾性エネルギーは

$$E_S = 2\mu(1+\nu)\varepsilon^2 \Omega / (1-\nu) \quad (\text{IV} \cdot 17)$$

で与えられることになる。

この結論は、変態生成物(析出物)の弾性係数を母相と等しくしたこと、および弾性係数を等方等質としたことによる。析出物の弾性係数が母相と異なると、後に議論する別の原因による相互作用(による付加的な弾性エネルギー)が発生する。また、弾性係数に異方性があると、外側の応力が純粋剪断から少しずれ、領域 1 と 2 が相互作用を持ち得る。これらの結果、析出物による弾性エネルギーは、析出物の形や方向にも依存することになる。なお、析出物が沢山あるときは、表面効果(有限体補正)も効いてきて、(IV・17) とは少しく異なる表現となる。

次に、内部応力 (IV・4) と外部応力

$$\begin{cases} u_{i,j}^A = \beta_{ji}^A \\ \sigma_{ij}^A = C_{ijkl} \beta_{kl}^A \\ \sigma_{ij,j}^A + P_i = 0 \\ \sigma_{ij}^A n_j = X_i \quad (|D| \text{上}) \end{cases} \quad (\text{IV} \cdot 18)$$

が共存している場合を考えよう。これからわかるように、外部応力は、 P_i なる体力と、 X_i なる表面に加えた面力で生じているとしている。全弾性エネルギーは、

$$E = \frac{1}{2} \int (\sigma_{ij} + \sigma_{ij}^A) (\beta_{ji} + \beta_{ji}^A) d\mathbf{x} \quad (\text{IV} \cdot 19)$$

だが、これをまず

$$E = \frac{1}{2} \int_D \sigma_{ij} \beta_{ji} d\mathbf{x} + \frac{1}{2} \int_D \sigma_{ij}^A \beta_{ji}^A d\mathbf{x} + \frac{1}{2} \int_D (\sigma_{ij} \beta_{ji}^A + \sigma_{ij}^A \beta_{ji}) d\mathbf{x}$$

と書き変える。第 1 項は内部応力のみ存在するときの弾性エネルギー、第 2 項は外部応力のみ存在するときの弾性エネルギーである。したがって、第 3 項が、内部応力と外部応力の相互作用の弾性エネルギー、 $E_I(\text{内}, \text{外})$ である。これは、 $\sigma_{ij} \beta_{ji}^A = \sigma_{ij}^A \beta_{ji}$ に注意すると、

$$E_I(\text{内}, \text{外}) = \int_D \sigma_{ij} \beta_{ji}^A d\mathbf{x} \quad (\text{IV} \cdot 20)$$

または

$$E_I(\text{内}, \text{外}) = \int_D \sigma_{ij}^A \beta_{ji} d\mathbf{x} \quad (\text{IV} \cdot 21)$$

と書いてよい。(IV・20) は、簡単な形となる。(IV・20) に (IV・18) を入れて、

$$E_I(\text{内}, \text{外}) = \int_D \sigma_{ij} u_{i,j}^A d\mathbf{x}$$

とし、ガウスの定理を使うと、

$$E_I(\text{内, 外}) = \int_{|D|} \sigma_{ij} u_i^A n_j ds - \int_D \sigma_{ij,j} u_i^A dx$$

となるが、これは (IV・4) によってゼロである。すなわち

$$E_I(\text{内, 外}) = 0 \quad (\text{IV} \cdot 22)$$

である。このように、内部応力と外部応力が、弾性エネルギーに関して相互作用を持たないということを、コロネッティの定理という。

たとえば転位を考えよう。外力が働いていると、転位は力を受けそうである。つまり外力と転位の間には相互作用がありそうである。しかし、コロネッティの定理は、外力と転位の間には、弾性エネルギーに関しては相互作用がないことを主張している。このことは、一見、具合が悪そうである。しかし、冷静に考えると、そういうことはないのである。内部応力がある物体に外力が働いているとき、役に立つエネルギー量は、弾性エネルギー(ヘルムホルツ自由エネルギー)だけではすまない。役に立つというのは、その極値、増減を調べると、釣合や変化の進む向きが議論できるものという意である。弾性エネルギーに外力のポテンシャルを加えて、物体のギブス自由エネルギーにして、そういう役に立つ量が生れるのである。そこで、次に役に立つエネルギーについては外力は内部応力と相互作用を持ち、それはまた簡便な表現となることを示そう。

IV・2 外力と内部応力の相互作用

内部応力 (IV・4) と外部応力 (IV・18) が共存する物体の持つギブス自由エネルギー F は、

$$F = \frac{1}{2} \int_D (\sigma_{ij} + \sigma_{ij}^A) (\beta_{ji} + \beta_{ji}^A) dx - \int_D P_i (u_i + u_i^A) dx - \int_{|D|} X_i (u_i + u_i^A) ds \quad (\text{IV} \cdot 23)$$

である。コロネッティの定理に注意してこれを書き換えると、

$$F = \frac{1}{2} \int_D \sigma_{ij} \beta_{ji} dx + \left\{ \frac{1}{2} \int_D \sigma_{ij}^A \beta_{ji}^A dx - \int_D P_i u_i^A dx - \int_D X_i u_i^A ds \right\} - \left\{ \int_D P_i u_i dx + \int_{|D|} X_i u_i ds \right\}$$

となる。第1項は、外力がなく、内部応力のみあるときの弾性エネルギー(=ヘルムホルツ自由エネルギー。外力がないときのギブス自由エネルギーでもある)、第2項は、外力のみ存在するときに物体の持つギブス自由エネルギーである。したがって、定義により、第3項の

$$F_I = - \int_D P_i u_i dx - \int_{|D|} X_i u_i ds \quad (\text{IV} \cdot 24)$$

が、外力と内部応力の、相互作用の(物体の持つ)ギブス自由エネルギーとなる。これは簡単な

$$F_I = - \int_D \sigma_{ij}^A \beta_{ji}^A dx \quad \left(= - \int_D \sigma_{ij}^A \varepsilon_{ji}^A dx \right) \quad (\text{IV} \cdot 25)$$

なる、計算に便利な表現に直せることを次に示そう。

(IV・25)の右辺に、コロネッティの定理によって、ゼロとなる項 (IV・21) を加え、形を変える。

$$F_I = - \int_D \sigma_{ij}^A (\beta_{ji}^A + \beta_{ji}) dx$$

これに (IV・4) を入れて、

$$F_I = - \int_D \sigma_{ij}^A u_{i,j} dx$$

とし、ガウスの定理を使って

$$F_I = - \int_{|D|} \sigma_{ij}^A u_i n_j ds + \int_D \sigma_{ij,j}^A u_i dx$$

と直す。(IV・18)により、これは

$$F_I = - \int_D P_i u_i dx - \int_D X_i u_i ds$$

であり、定義 (IV・24) と同一である。すなわち、役に立つ(どんな変化が起きるか、釣合はいつ生じるかを調べるという実戦に役に立つという意味)エネルギーに関しては、内部応力と外力は相互作用を持ち、それは (IV・25) のような簡単な形となる。なお、内部応力が領域 Ω のみ ε_{ij}^A が発生して生じているなら、(IV・25)の積分領域は Ω と書いておけばよい。なお、内部応力と外力は、弾性エネルギーに関しては相互作用を持たない(コロネッティの定理)ことがよく知られている一方、上で見たように、役に立つエネルギーに関しては相互作用を持ち、しかも F_I をしばしば単に内部応力と外力の相互作用エネルギーと呼ぶので、よく混乱が生じる。気をつけたいことである。

[問題 I・1] の F の第4項、 $-\Omega \sigma \varepsilon$ は、(IV・25)のようにして算えたものである。

[問題 IV・3]

自分自身の作る内部応力が σ_{ij} なる転位を含む物体に、他の原因に基づく内部応力 σ_{ij}^A と外部応力 σ_{ij}^A が働いている。この転位に働く力を求めよ (Peach-Koehler の式)。

この問題は各自にやってももらうことにして、以下にやり方を示す。転位線の一部(segment, 長さ l) を δx_m だけ動かす。転位を含む物体のギブス自由エネルギーは、転位の自己エネルギーに δE_S 、他の内部応力との相互作用の弾性エネルギーに δE_I 、外力と転位の相互作用のギブス自由エネルギーに δF_I だけの変化を生じる。これらを計算すればよい。たとえば、

$$\delta E_S = \delta \left\{ \frac{1}{2} \int_D \sigma_{ij} \beta_{ji} dx \right\} = \int_D \sigma_{ij} \delta \beta_{ji} dx$$

となり、これはさらに

$$\delta E_S = - \int_D \sigma_{ij} \delta \beta_{ji}^A dx$$

となる。 $\delta \beta_{ji}^A$ がゼロでないのは、転位が動いた面上のみで、そこに新たに、 $\beta_{ji}^A = -b_i n_j \delta(\mathbf{x} - \mathbf{s})$ が発生したのである。 $\mathbf{s}$ は、 l の掃いた面で、それに符号を持たせると、 $s n_j = \epsilon_{jmn} \delta x_m \nu_n l$ である(ν は転位線に沿った長さ方向の

単位ベクトル, $\epsilon_{123}=\epsilon_{231}=\epsilon_{312}=1$, $\epsilon_{213}=\epsilon_{132}=\epsilon_{321}=-1$, 他の $\epsilon_{jmn}=0$). したがって, $\delta E_S=\epsilon_{jmn}\delta x_m\nu_n b_i\sigma_{ij}l$ となる. δE_I , δF_I も同様に求まる. そこで (N・1) により, x_m 方向に働いている力は, 単位長さ当り

$$f_m=-\epsilon_{jmn}\nu_n b_i(\sigma_{ij}+\sigma_{ij}^A) \text{ となる.}$$

(N・24) と (N・25) が同一であることに注意すると, 内部応力場を求める基本式の 1 つである (III・45) を, 物理的思考で導くことができる. まず, 外力は, 点 x に単位の集中力を x_m 方向にかけて発生させたとする. また, 内部応力は領域 Ω に様な ϵ_{ij}^* が発生して生じ, それによる変位の点 x における値を $u_m(x)$ とする. (N・24) により,

$$F_I=-u_m(x)$$

である. 一方, この集中外力によって, 点 x' に生じる変位は, グリーン関数の意味づけから, $G_{km}(x'-x)$ である. したがって外部応力は $C_{ijkl}\partial(G_{km})/\partial x'_l$ となる. そこで (N・25) より

$$F_I=-\int_{\Omega} C_{ijkl}\left\{\frac{\partial}{\partial x'_l} G_{km}(x'-x)\right\}\epsilon_{ij}^* d x'$$

を得る. 上 2 式より,

$$u_m(x)=\int_{\Omega} C_{ijkl}\left\{\frac{\partial}{\partial x'_l} G_{km}(x'-x)\right\}\epsilon_{ij}^* d x'$$

となる. $G_{km}(x-x')=G_{km}(x'-x)$ および $\frac{\partial}{\partial x'_l} G_{km}=-\frac{\partial}{\partial x_l} G_{km}=-G_{km,l}$ より,

$$u_m(x)=-\int_{\Omega} C_{ijkl} G_{km,l}(x'-x)\epsilon_{ij}^* d x'$$

となる. ここまで, 簡単化のため, Ω の中で ϵ_{ij}^* は一様としたが, ϵ_{ij}^* が一様でなかったら, 重ね合わせの原理より,

$$u_m(x)=-\int_{\Omega} C_{ijkl} G_{km,l}(x-x')\epsilon_{ij}^*(x') d x' \quad (\text{N} \cdot 26)$$

とすればよい. これは, (III・45) と内容が同じである. なお, (III・46) は, (III・45) と, (II・8) から作られる.

実は, (N・24), (N・25) は, 今までであからさまに述べなかった面白いことを示しているのである. (N・24) は, 一定の外力の, ϵ_{ij}^* によるポテンシャル変化である. そこで簡単のため, 半径 R の等方等質物体の中心に半径 a の球領域 Ω をとり, ここに $\epsilon_{ij}^*=\epsilon\delta_{ij}$ を発生させたとする. 試みに, この ϵ_{ij}^* による変形を, 物体を無限大とみなした答を使って調べてみる. [問題 III・4] で調べたように, Ω の外側では変位は

$$u_m^{\infty}=\frac{\epsilon(3\lambda+2\mu)}{4\pi(\lambda+2\mu)}\Omega\frac{x_m}{x^3} \quad (\text{N} \cdot 27)$$

である. 外力は表面に $\sigma_{ji}^A=P\delta_{ij}$ になるようにかける. すなわち, $X_i=Pn_i$ とする. (N・24) はこの u_m^{∞} を使うと,

$$F_I=-P\epsilon\frac{(3\lambda+2\mu)}{(\lambda+2\mu)}\Omega \quad (\text{N} \cdot 28)$$

となる. 一方, (N・25) を使うと,

$$F_I=-3P\epsilon\Omega \quad (\text{N} \cdot 29)$$

となり, (N・28) と異なってくる ($\nu=1/3$ とすると, (N・28) は (N・29) の $2/3$ 倍である). このおかしさは, (N・24) を使って (N・28) を求めたとき, (N・27) のような物体を無限体を見た答を使ったことによって, 表面では面力なしという条件によって, 有限体補正を行うと, 正解は

$$u_m=u_m^{\infty}+u_m^{\text{im}} \quad (\text{N} \cdot 30)$$

$$u_m^{\text{im}}=\mu\epsilon\Omega x_m/\{\pi(\lambda+2\mu)R^3\} \quad (\text{N} \cdot 31)$$

となり, (N・30), (N・24) を使うと

$$F_I=-3P\epsilon\Omega \quad (\text{N} \cdot 32)$$

となって, (N・29) と一致している. つまり, F_I を (N・25) によって算えることは, 自由表面効果をきちんと入れた表現となっているのである.

このように, 無限体を仮定して得た答に, 自由表面の効果を取り入れてつけ加えて正解とする項, u_m^{im} およびそれから出る応力 $\sigma_{pq}^{\text{im}}=C_{pqmn}u_{m,n}^{\text{im}}$ を, image 項と呼ぶ. 上の例のように簡単な場合には, image 項はすぐ求まるが, 一般には簡単でない. よく知られた例は, 自由表面近くの転位, 円柱状領域にある転位による image 項である. 力学者は, きちんとした解が出ないことは問題として扱わない. しかし, 金属の世界では, 単に平均的な量が求まれば十分なこともあるので, 次に, けっこう役に立つことを自由表面効果が現れている例としてとり上げてみることにする. これをエネルギーの章の中に入れるのは少し奇異であるが.

IV.3 表面効果と巨視的平均

内部応力状態にある物体をある面で 2 つの領域に分けてみる. 力は釣合っていないといけないので, その面の面力を合計 (積分) したものはゼロとなっていることは当然である. 面白いのは, 内部応力状態にある物体の応力 σ_{ij} の, 物体全体にわたる平均または積分もゼロになることである. これは

$$\int_D \sigma_{ij} d x = \int_D \sigma_{ik} \delta_{kj} d x = \int_D \sigma_{ik} \frac{\partial x_j}{\partial x_k} d x$$

とし, ガウスの定理を使って

$$\int_D \sigma_{ij} d x = \int_{|D|} \sigma_{ik} x_j n_k ds - \int_D \sigma_{ik,k} x_j d x$$

と直し, 釣合 $\sigma_{ik,k}=0$ と, 表面 $|D|$ で面力なしという $\sigma_{ik} n_k=0$ を使って理解することができる. すなわち

$$\int_D \sigma_{ij} d x = 0 \quad (\text{N} \cdot 33)$$

である. これを使うと, 弾性係数が一様な物体の中に, 体積比が f となるいくつか (沢山) の領域 Ω に, 均一な ϵ_{ij}^* が発生したときの, 物体全体の示す歪の平均 $\langle \gamma_{mn} \rangle_D$ が求まる (実は, (N・25) から出るのだが).

$$\begin{aligned}
\langle \gamma_{mn} \rangle_D &= \frac{1}{D} \int_D \gamma_{mn} d\mathbf{x} = \frac{1}{D} \int_D \varepsilon_{mn} d\mathbf{x} + \frac{1}{D} \int_D \varepsilon_{mn}^* d\mathbf{x} \\
&= \frac{1}{D} \int_D C_{mnij}^{-1} \sigma_{ij} d\mathbf{x} + \frac{1}{D} \int_D \varepsilon_{mn}^* d\mathbf{x}
\end{aligned}$$

(C_{mnij}^{-1} は, elastic compliance)

弾性係数の均一性から, 第1項の C_{mnij}^{-1} は外に出て, (IV・33)から第1項はゼロとなる. 第2項の積分範囲は Ω としてよく, Ω の中で ε_{ij}^* を一様としていること, および $\Omega/D=f$ なので,

$$\langle \gamma_{mn} \rangle_D = f \varepsilon_{mn}^* \quad (\text{IV} \cdot 34)$$

となる. これも当り前の表現であり, これから, 転位の速さを V として, $\rho b V$ が巨視的な歪速度になるということや, 置換型合金原子のミスフィットパラメーター ε (合金原子を $\varepsilon_{ij}^* = \varepsilon \delta_{ij}$ なる eigen 歪を持つ領域とモデル化したときに要する量)を

$$\varepsilon = \frac{1}{a} \frac{da}{df} \quad (a \text{ は格子定数})$$

から決めるということも本講の立場で理解できるのである.

相変態生成物がどんな形, 向きをとって出るかを議論するには, 生成物1個を考えればすむだろう. ただこういう場合, 電顕でのぞくと(のぞかなくても)沢山の生成物があることに気づく. もしかしたら, 他の沢山の生成物との相互作用(うまい言葉であろう)によって, たとえばエネルギー量に変化を生じるかも知れぬ. こんな問題をまっとうに解くのは多分できないだろう. まず生成物の位置を指定し(生成物が何個あるだろうか), 無限体中の答えを出し, それに image 項を入れて補正するということを行わねばならぬ. とてもできそうにもない相談である. しかし, ある平均量だけは, 正確に求めることができるのである. 簡単のため, 同じだ円体形状 Ω をした沢山の領域(介在物と呼ぶ)に, 一様な eigen 歪 ε_{ij}^* があったとしよう. そしてこのような領域は, 巨視的には一様だが, 各々はでたらめに分布しているとする. 発生した内部応力を σ_{ij} とし, これを母相でやみくもに平均した量を $\langle \sigma_{ij} \rangle_M$, 介在物の中だけでやみくもに平均した量を $\langle \sigma_{ij} \rangle_I$ とする. 介在物の体積比を f とすると, (IV・33)により

$$f \langle \sigma_{ij} \rangle_I + (1-f) \langle \sigma_{ij} \rangle_M = 0 \quad (\text{IV} \cdot 35)$$

である. さて, ここで介在物1個を新しく導入しよう. すでに同じ介在物がものすごく沢山ある. また, この介在物から見れば, 物体全体は十分に大きく, それ自身の作る応力は, image 項を入れなくても, 無限体中の応力で十分である(たとえば, (IV・31)で a を R に比べて十分小さくした状況である). したがって, その介在物の中に, それ自身の作る応力は, 無限体を仮定して,

$$\sigma_{ij}^{I\infty} = C_{ijkl} (S_{klmn} \varepsilon_{mn} - \varepsilon_{kl}^*) \quad (\text{IV} \cdot 36)$$

としてよい. この介在物を導入できる場所は, 未だ他の介在物で占められてない母相の中である. 介在物がでたらめに分布していることを考えると, この介在物を入れる場所を色々でたらめに変えて平均してやれば, 自分自身以外(他の介在物とそれらの表面効果)からその中に生じる応力の平均は $\langle \sigma_{ij} \rangle_M$ になっているはずである. すなわち, 介在物1つが平均として感じる応力は, $\sigma_{ij}^{I\infty} + \langle \sigma_{ij} \rangle_I$ となっているはずである. これは $\langle \sigma_{ij} \rangle_I$ に等しくなくてはいけない. すなわち

$$\langle \sigma_{ij} \rangle_I = \sigma_{ij}^{I\infty} + \langle \sigma_{ij} \rangle_M \quad (\text{IV} \cdot 37)$$

である. (IV・35) (IV・37) より,

$$\begin{aligned}
\langle \sigma_{ij} \rangle_M &= -f \sigma_{ij}^{I\infty} \\
\langle \sigma_{ij} \rangle_I &= (1-f) \sigma_{ij}^{I\infty}
\end{aligned} \quad (\text{IV} \cdot 38)$$

が出る. こんな当り前のことになったのは, 弾性係数の一様性を仮定したこと, および介在物にでたらめ分布を行わせたことによる. もし, 介在物が規則正しく(周期的に)分布しているなら, こんな簡単にはならず, 周期解を使って計算しなくてはならない. 実際, そういう計算をし, 鉄の格子の中で窒素原子がどう周期的に並ぶと弾性エネルギーが小さくなるかを調べた仕事もある. なお, (IV・38)を使えば, 単位体積当りの物体に含まれる弾性エネルギーは,

$$E_0 = -\frac{1}{2} f(1-f) \sigma_{ij}^{I\infty} \varepsilon_{ij}^* \quad (\text{IV} \cdot 39)$$

となることもわかる.

(IV・38)を見ると, 沢山の介在物があり, 自由表面もあるという効果は, 母相に $-f \sigma_{ij}^{I\infty}$ なる平均応力があるということに表れていることを知る. これは, 電磁気の分野によく登場する, 分子場近似に現れる量に対応する. 面白いのは, 物体の形と, 介在物の形を相似のだ円体にとる場合で, $-f \sigma_{ij}^{I\infty}$ なる母相の平均は, すべての介在物の image 項の平均となっていることである. そこで, まちがって $\langle \sigma_{ij} \rangle_M = -f \sigma_{ij}^{I\infty}$ を image 応力といつも言っている人もいるが, 一般には正しくない. 一般には無限体を仮定した答えと image 項を重ねて, 平均をとった量である. 介在物と物体が相似のだ円体なら, 無限体を仮定した答えの母相中の平均がゼロになるだけなのである.

〔問題 IV・4〕

Fe マルテンサイトの正方晶化

この問題は本会報の講義の中ですでに取り扱われており⁽¹³⁾, 巨匠 Zener によって30年も前にすで議論されてしまっていることである⁽¹⁴⁾. また, 里⁽¹⁵⁾, Khachaturyan⁽¹⁶⁾, Hoffman⁽¹⁷⁾もこの問題に関与している. しかし Zener の形式化はいつもむずかしく, 他のもの, よくわからぬことが多い. 以下に述べる定性的な説明からもわかるように, この問題は多分に力学的である. そこで多少長くなるが演習問題としてとり上げてみることに

した。なお、近頃は、Fe の中に格子間原子が入り得る位置についてもそう簡単でなくなっているが、ここでは古くさく古典的に演習問題として解こうというのである。

図 IV・2 に模型的に示すように、鉄の格子の中に侵入型不純物(たとえば炭素原子)が入る場所は、A, B, C の 3 種である。A (およびその等価点、以下同様)を x_1 位置、B を x_2 位置、C を x_3 位置と呼ぶ。たとえば、ある不純物が x_3 位置に入ったとする。このため、そのそばの横方向では、 x_3 方向に格子が伸びることになる。すると、別の不純物をそばに持ってくると、 x_3 位置の方へ入り易くなりそうである。この議論を繰り返すと、不純物は次から次へと x_3 位置を占めるようになり、Fe は全体として、 x_3 方向に特に伸びることが結論される。つまり、不純物が互いの影響のもとに x_3 位置に入って、Fe の格子は正方晶的になることが説明される。しかし、じっくり考えてみると、この範囲の定性的議論は、決して正方晶化を説明しているのではなく、知恵の進んでいる近ごろの学部学生をごまかすことはできないことがわかる。たとえば、ある不純物が x_3 位置に入ると、その上下では格子は x_3 方向に縮んでいそうで、その近くでは、他の不純物は x_3 位置に入るのが苦しそうに見えるからである。したがって、前の説明は、不純物原子が偏析するなら板状領域に偏析し、そこでは、板面に垂直な方向を特に格子を伸ばす位置に不純物が入っていることをいったにすぎないことがばれてしまう。

図 IV・2

そこで以下に、沢山の不純物の影響(定量的には相互作用のエネルギーを扱うこと)をまとめて考えることにする。格子間不純物原子があることを、ある球領域(鉄原子の大きさにとる)に eigen 歪が入ったと表現する。つまり、不純物を elastic dipole として扱おうというのである。そして、格子の対称性から、 x_1, x_2, x_3 位置に入るに応じて、それぞれ

$$\begin{aligned} \epsilon_{ij}^*(1) &= \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_2' \end{pmatrix}, \quad \epsilon_{ij}^*(2) = \begin{pmatrix} \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_1 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}, \\ \epsilon_{ij}^*(3) &= \begin{pmatrix} \lambda_2 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{IV} \cdot 40)$$

なる eigen 歪を持つとする。こうすると、たとえば、無限体中に 1 つだけ x_1 位置に入ると、その中に

$$\begin{aligned} \sigma_{11}^{\infty}(1) &= A \lambda_1 + 2 B \lambda_2 \\ \sigma_{22}^{\infty}(1) &= \sigma_{33}^{\infty}(1) = A \lambda_2 + B(\lambda_1 + \lambda_2) \end{aligned} \quad (\text{IV} \cdot 41)$$

$$A = (S_{1111} - 1) C_{1111} + 2 S_{1122} C_{1122}$$

$$B = (S_{1111} - 1) C_{1122} + S_{1122} (C_{1111} + C_{1122})$$

なる応力を生じることになる。他の位置に入ったときは、(IV・41)の指標を適当に変えれば求まる。この結果、(IV・38)より、 x_1, x_2, x_3 位置に、それぞれ f_1, f_2, f_3 だけの体積比を持つように不純物原子が入ると、母相には平均として、

$$\begin{aligned} \langle \sigma_{11} \rangle_M &= -f_1 (A \lambda_1 + 2 B \lambda_2) \\ &\quad - (f_2 + f_3) (A \lambda_2 + B \lambda_1 + B \lambda_2) \\ \langle \sigma_{22} \rangle_M &= -f_2 (A \lambda_1 + 2 B \lambda_2) \\ &\quad - (f_3 + f_1) (A \lambda_2 + B \lambda_1 + B \lambda_2) \\ \langle \sigma_{33} \rangle_M &= -f_3 (A \lambda_1 + 2 B \lambda_2) \\ &\quad - (f_1 + f_2) (A \lambda_2 + B \lambda_1 + B \lambda_2) \end{aligned} \quad (\text{IV} \cdot 42)$$

だけの応力が存在することになる。なお、単位体積中の不純物原子の総数を N 、 x_1 位置に入った不純物原子数を n_1 等とすると、Fe の原子体積を Ω として、 $N = n_1 + n_2 + n_3$ 、 $f_1 = n_1 \Omega$ 、 $f_2 = n_2 \Omega$ 、 $f_3 = n_3 \Omega$ であり、

$$f = f_1 + f_2 + f_3 \quad (\text{IV} \cdot 43)$$

とおく。IV・3 で述べたように、この問題のように、不純物原子がでたらめにある場合、平均としては、1 つの不純物のところにある応力はそれ自身が無限体中にあるときそれ自身の作る応力(たとえば (IV・41))と、(IV・42)で与えられる母相の平均応力の和である。したがって、単位体積に含まれる弾性エネルギーを

$$E_0 = -\frac{1}{2} \int_{D_0} \sigma_{ij} \epsilon_{ij}^* dx$$

(D_0 は単位体積を意味する)をもって算えると、(IV・40) ~ (IV・43) より、

$$\begin{aligned} E_0 &= -\frac{1}{2} f \{ A \lambda_1^2 + 4 B \lambda_1 \lambda_2 + 2 (A + B) \lambda_2^2 \} \\ &\quad + \frac{1}{2} f^2 \{ B \lambda_1 + 2 (A + B) \lambda_1 \lambda_2 + (A + 3 B) \lambda_2^2 \} \\ &\quad + \frac{1}{2} (f_1^2 + f_2^2 + f_3^2) (A - B) (\lambda_1 - \lambda_2)^2 \end{aligned} \quad (\text{IV} \cdot 44)$$

が得られる。第 1 項は、(IV・42)なる、表面効果と他の不純物原子の存在によって生じる項を無視したときに生じるもので、自己エネルギー(不純物原子 1 つを導入したときの弾性エネルギーに不純物原子の数をかけた量)である。第 2 項と第 3 項が、表面効果と他の不純物原子の存在を考えて出てくるもので、表面と他の不純物との相互作用の弾性エネルギーである。余談だが、elastic dipole の外側の応力は、距離の 3 乗に逆比例するという典型的長範囲応力であるが、自由表面を導入すると、上のようによく収束してくれるのである。また、自己エネルギーを弾性論で算えるのが多少無理の場合でも、

相互作用エネルギーの計算は、弾性論で十分算えられることを、Eshelby がたくみに論証している⁽⁸⁾。したがって、読めばわかるように(Ⅳ・44)の第3項のみが主役を演じる以下の議論は、数値についても健全な結論を与えることになる。弾性係数の持つ性質からも一般論として結論できるものと予想するが、Fe の弾性係数($C_{1111}=2.37 \times 10^{11}$ N/m², $C_{1122}=1.41 \times 10^{11}$ N/m², $C_{1212}=1.16 \times 10^{11}$ N/m²)と(Ⅲ・71)を使うと、 $S_{1111}=S_{2222}=S_{3333}=0.4491$, $S_{1122}=S_{2211}=S_{2233}=S_{3322}=S_{3311}=S_{1133}=0.0845$ となり、

$$A-B=-0.609 \times 10^{11} \text{ N/m}^2 < 0 \quad (\text{Ⅳ} \cdot 45)$$

となっている。したがって、一定の f のもとでは、 $f_1=f$ か、 $f_2=f$ か、 $f_3=f$ となると、弾性エネルギーが一番小さくなる。ところがエントロピーという魔物がいて、弾性エネルギーがいつも極小になる状態が生じるとは限らない。しかし、このエントロピーも、うすい固溶体とみなすと、単位体積当り

$$S = -k N_0 (f_1 \log f_1 + f_2 \log f_2 + f_3 \log f_3) \quad (\text{Ⅳ} \cdot 46)$$

(N_0 は単位体積中の Fe 原子の数, k はボルツマン定数)と簡単に書いて、次なる議論が可能となる。

歪んだことによるヘルムホルツ自由エネルギーが(Ⅳ・44)であり、単に混っていることによるエントロピー変化が(Ⅳ・46)なので、単位体積当りのヘルムホルツ自由エネルギー F は、

$$F = F_0 + \frac{1}{2} (f_1^2 + f_2^2 + f_3^2) (A-B) (\lambda_1 - \lambda_2)^2 + k T N_0 (f_1 \log f_1 + f_2 \log f_2 + f_3 \log f_3) \quad (\text{Ⅳ} \cdot 47)$$

となる。 F_0 は、弾性係数、 λ_1, λ_2, f にのみ依存する項である。一定温度、一定の f (Ⅳ・43) のもとで(Ⅳ・47)を極小にするのが釣合である。条件(Ⅳ・43)を眺めると、自由度は2つあることになる。しかし、極値のみを調べるためには、自由度を1つにとってよいことが次のようにしてわかる。(Ⅳ・43)のもとで(Ⅳ・47)が極値をとる状態は、ラグランジュの未定係数を λ として、

$$\begin{aligned} f_1(A-B)(\lambda_1 - \lambda_2)^2 + k T N_0 (\log f_1 + 1) - \lambda &= 0 \\ f_2(A-B)(\lambda_1 - \lambda_2)^2 + k T N_0 (\log f_2 + 1) - \lambda &= 0 \\ f_3(A-B)(\lambda_1 - \lambda_2)^2 + k T N_0 (\log f_3 + 1) - \lambda &= 0 \end{aligned} \quad (\text{Ⅳ} \cdot 48)$$

なる、3つの同形の方程式の根を f_1, f_2, f_3 がとるとき達成される。 $y = x(A-B)(\lambda_1 - \lambda_2)^2$, $y = k T N_0 (\log x + 1) - \lambda$ なる2つの曲線は最大2点でしか交わらない。このことは、(Ⅳ・48)が満されるなら、 f_1, f_2, f_3 のうち、何れか2つが等しいことを意味する。そこで、(Ⅳ・47)の極値のみを論じるためには、

$$f_1 = f_2 = f(1-z)/3, \quad f_3 = f(1+2z)/3 \quad (\text{Ⅳ} \cdot 49)$$

とおいて、 z のみによる変化を調べてもかまわない。(Ⅳ・49)を(Ⅳ・47)に入れると、

$$\begin{aligned} F = F_0 + \frac{1}{6} f^2 (1+3z^2) (A-B) (\lambda_1 - \lambda_2)^2 \\ + k T N_0 f \left\{ \log \frac{f}{3} + \frac{2(1-z)}{3} \log(1-z) \right. \\ \left. + \frac{(1+2z)}{3} \log(1+2z) \right\} \end{aligned} \quad (\text{Ⅳ} \cdot 50)$$

となる。あとは単純な計算をして、冷却時には、

$$T_c = \frac{f(B-A)(\lambda_1 - \lambda_2)^2}{2kN_0} \quad (\text{Ⅳ} \cdot 51)$$

で、 $z=0$ ($f_1=f_2=f_3=f/3$, 格子は平均として立方晶)から $z=0.717$ ($f_1=f_2=0.094f$, $f_3=0.811f$, 格子は正方晶)の状態にジャンプすることがわかる。なお、この議論をするとき、(Ⅳ・50)にしたがって、 F と z の絵を画くとよい。そうすると、Zener の勘違いにも気づくはずである。

温度が T_c から下ると、(Ⅳ・50)の極小値は、ほとんど $z=1$ で生じる。このとき、(Ⅳ・34)により、格子間不純物を含む Fe は、巨視的に、

$$\begin{aligned} \langle \gamma_{11} \rangle_D = \langle \gamma_{22} \rangle_D = f \lambda_2 \\ \langle \gamma_{33} \rangle_D = f \lambda_1 \end{aligned} \quad (\text{Ⅳ} \cdot 52)$$

だけ歪む。つまり平均格子定数が、 x_3 方向に $f\lambda_1$, x_1, x_2 方向に $f\lambda_2$ だけ変わり正方晶となる。このことから、定数 λ_1, λ_2 が決定できる。なお、正方晶となる理由で忘れていけないことに、(Ⅳ・47)が極値をとるとき、 f_1, f_2, f_3 のどれか2つが等しいということがある。

ついでに、 x_3 方向に σ^A なる引張の外力をかけた場合を考えよう。外力のポテンシャルを考えると単位体積当りのギブス自由エネルギーは、(Ⅳ・50)と(Ⅳ・25)、(Ⅳ・49)より、

$$\begin{aligned} F = F_0 + \frac{1}{6} f^2 (1+3z^2) (A-B) (\lambda_1 - \lambda_2)^2 \\ + k T N_0 f \left\{ \log \frac{f}{3} + \frac{2(1-z)}{3} \log(1-z) \right. \\ \left. + \frac{(1+2z)}{3} \log(1+2z) \right\} - \frac{f}{3} (\lambda_1 + 2\lambda_2) \sigma^A \\ - \frac{2}{3} f (\lambda_1 - \lambda_2) z \sigma^A \end{aligned} \quad (\text{Ⅳ} \cdot 53)$$

となる。 σ^A の絶対値を小さくすると、 $T > T_c$ の範囲では、(Ⅳ・53)の極小値は

$$z = \frac{(\lambda_1 - \lambda_2) \sigma^A}{3kN_0(T - T_c)} \quad (\text{Ⅳ} \cdot 54)$$

で生じることがわかる。 $T \gg T_c$ (f が小さいとき) では $z = (\lambda_1 - \lambda_2) \sigma^A / (3kN_0T)$ としてよいだろう。 σ^A がゼロのときは $z=0$ だったので、不純物を含まないときを基準にとってすべての方向に $f(\lambda_1 + 2\lambda_2)/3$ だけ伸びていた。 σ^A をかけて時間を十分かけて釣合が達成されたときには、 x_3 方向に $f\{ (1+2z)\lambda_1 + 2(1-z)\lambda_2 \}/3$ だけ伸びているので、 σ^A をかけたことにより、 $2fz(\lambda_1 - \lambda_2)/3$ だけ、すなわち、

$$\varepsilon_a = \frac{2(\lambda_1 - \lambda_2)^2 f \sigma^A}{9 k N_0 T} \quad (\text{N} \cdot 55)$$

だけ伸びることになり、これが不純物原子の再分布(応力誘発規則化)による伸び、すなわち擬弾性歪となって現れる。 σ^A をかけた直後に生じる x_3 方向の弾性伸び歪が $(C_{1111} + C_{1122}) \sigma^A / \{(C_{1111} - C_{1122})(C_{1111} + 2C_{1122})\}$ なので、緩和強さ Δ は

$$\Delta = \frac{2(\lambda_1 - \lambda_2)^2 (C_{1111} - C_{1122})(C_{1111} + 2C_{1122}) f}{a k N_0 T (C_{1111} + C_{1122})} \quad (\text{N} \cdot 56)$$

となる。 Δ は、たとえばスネークピークの高さから求まる。そこで、内耗実験からも $(\lambda_1 - \lambda_2)$ が決定できることになる。これでおしまい。

IV.4 不均一介在物と外力との相互作用

まわり(母相、弾性係数 C_{ijkl})と異なった弾性係数 C_{ijkl}^* を持つ領域 Ω を不均一介在物と呼んだ。不均一介在物を含む物体に外力をかけると、それがいないときとは異なった弾性状態を生じることはすでに述べた。弾性状態が異なるので、エネルギーも変ってくる。そこで、定義さえちゃんとすれば、IV.2 で定義したのとは別の相互作用が考えられそうである。これを扱うのが本節である。

まず外力は、表面 $|D|$ で一定の面力 X_i をかけて作ると考える。不均一介在物がなかったとき(弾性係数が一様であったとき)に生じる外部応力とその変化を σ_{ij}^A, u_i^A とし、これらが不均一介在物のために変った後の値の値を $\sigma_{ij}^{A'} = \sigma_{ij}^A + \tau_{ij}$, $u_i^{A'} = u_i^A + u_i^*$ とする。不均一介在物を含む物体の持つギブス自由エネルギーは、定義により

$$F = \frac{1}{2} \int_D \sigma_{ij}^{A'} u_{i,j}^{A'} d\mathbf{x} - \int_{|D|} X_i u_i^{A'} ds \quad (\text{N} \cdot 57)$$

であるが、書き直して

$$\begin{aligned} F = & 0 + \left\{ \frac{1}{2} \int_D \sigma_{ij}^A u_{i,j}^A d\mathbf{x} - \int_{|D|} X_i u_i^A ds \right\} \\ & + \left\{ \frac{1}{2} \int_D (\sigma_{ij}^{A'} u_{i,j}^{A'} - \sigma_{ij}^A u_{i,j}^A) d\mathbf{x} \right. \\ & \left. - \int_{|D|} (X_i u_i^{A'} - X_i u_i^A) ds \right\} \quad (\text{N} \cdot 58) \end{aligned}$$

とする。第1項0は、外力がなく、不均一介在物のみあったとき(まったく歪んでない)に物体の持つギブス自由エネルギー、第2項は、不均一介在物がなく、外力のみあったときに物体の持つギブス自由エネルギーである。したがって、第3項

$$\begin{aligned} F_I^M = & \frac{1}{2} \int_D (\sigma_{ij}^{A'} u_{i,j}^{A'} d\mathbf{x} - \sigma_{ij}^A u_{i,j}^A d\mathbf{x}) \\ & - \int_{|D|} (X_i u_i^{A'} - X_i u_i^A) ds \quad (\text{N} \cdot 59) \end{aligned}$$

が、外力と不均一介在物の(物体の持つ)、相互作用のギブス自由エネルギーとなるのは、前に述べた定義の通りである。 F_I^M の第1項は、不均一介在物存在のために生じた弾性エネルギーの変化

$$\Delta E = \frac{1}{2} \int_D (\sigma_{ij}^{A'} u_{i,j}^{A'} - \sigma_{ij}^A u_{i,j}^A) d\mathbf{x} \quad (\text{N} \cdot 60)$$

であり、 F_I^M の第2項は、不均一介在物の存在のために生じた外力のポテンシャルの変化

$$\Delta V = - \int_{|D|} (X_i u_i^{A'} - X_i u_i^A) ds \quad (\text{N} \cdot 61)$$

である。これらは別々に算える必要がなく、一方を算えてことがすむ。たとえば(N.60)を部分積分し、

$$\begin{aligned} \Delta E = & \frac{1}{2} \int_{|D|} (\sigma_{ij}^{A'} u_i^{A'} n_j - \sigma_{ij}^A u_i^A n_j) ds \\ & - \frac{1}{2} \int_D (\sigma_{ij,j}^{A'} u_i^{A'} - \sigma_{ij,j}^A u_i^A) d\mathbf{x} \end{aligned}$$

とする。表面 $|D|$ 上では、 $X_i = \sigma_{ij}^{A'} n_j = \sigma_{ij}^A n_j$ であること、釣合条件より $\sigma_{ij,j}^{A'} = \sigma_{ij,j}^A = 0$ であることに注意すると、

$$\Delta E = \frac{1}{2} \int_{|D|} (X_i u_i^{A'} - X_i u_i^A) ds \quad (\text{N} \cdot 62)$$

となる。これと(N.61)を比べると、

$$\Delta E = -\Delta V / 2 \quad (F_I^M = \Delta E + \Delta V) \quad (\text{N} \cdot 63)$$

となっていることがわかる。

不均一介在物 Ω がだ円体形状をしているとき、 ΔE , ΔV , F_I^M は算え易い形となる。まず、(N.60)は、

$$\Delta E = \frac{1}{2} \int_D (\sigma_{ij}^A u_{i,j}^{A'} - \sigma_{ij}^{A'} u_{i,j}^A) d\mathbf{x} \quad (\text{N} \cdot 64)$$

としてよいことに注意する。何故なら(N.64)を部分積分し、釣合条件 $\sigma_{ij,j}^{A'} = \sigma_{ij,j}^A = 0$ と、表面 $|D|$ 上では $X_i = \sigma_{ij}^{A'} n_j = \sigma_{ij}^A n_j$ であることを使うと、(N.62)とまったく同じになるからである。面白いことに、(N.64)にすると、積分範囲は Ω としてよいことになってしまうのである。 Ω の外では弾性係数は一様(C_{ijkl})なので、そこでは $\sigma_{ij}^A u_{i,j}^A = C_{ijkl} u_{k,l}^A u_{i,j}^A = C_{klij} u_{i,j}^{A'} u_{k,l}^A = \sigma_{kl}^{A'} u_{k,l}^A = \sigma_{ij}^{A'} u_{i,j}^A$ となるからである。すなわち

$$\Delta E = \frac{1}{2} \int_\Omega (\sigma_{ij}^A u_{i,j}^{A'} - \sigma_{ij}^{A'} u_{i,j}^A) d\mathbf{x} \quad (\text{N} \cdot 65)$$

である。 Ω の中では、

$$\sigma_{ij}^A = C_{ijkl} u_{k,l}^A, \quad \sigma_{ij}^{A'} = C_{ijkl}^* u_{k,l}^{A'} \quad (\text{N} \cdot 66)$$

を使うと、(N.65)はさらに

$$\Delta E = \frac{1}{2} \int_\Omega (C_{ijkl} - C_{ijkl}^*) u_{k,l}^A u_{i,j}^{A'} d\mathbf{x} \quad (\text{N} \cdot 67)$$

と変わる。ところが、 Ω がだ円体なら、応力の乱れ、変位の乱れは、弾性係数が母相のそれと同じのだ円体介在物が適当な eigen 歪 ε_{ij}^* を持つことで再現されることをIII章で述べた。この ε_{ij}^* は、

$$C_{ijkl} (u_{k,l}^{A'} - \varepsilon_{kl}^*) = C_{ijkl}^* u_{k,l}^{A'} \quad (\text{N} \cdot 68)$$

$$u_{k,l}^{A'} = u_{k,l}^A + u_{k,l}^* \quad (\text{N} \cdot 69)$$

を解いて求められる。 $u_{k,l}^*$ は、だ円体介在物の性質により、 ε_{kl}^* の結合によって表される。たとえば σ_{ij}^A が Ω の中で一様なら

$$(u_{k,l}^* + u_{k,l}^*) / 2 = S_{klmn} \varepsilon_{mn}^* \quad (\text{N} \cdot 70)$$

である。(N.67)と(N.68)を使うと、

$$\Delta E = -\frac{1}{2} \int_{\Omega} C_{ijkl} \epsilon_{ki}^A u_{i,j}^A d\mathbf{x} \quad (\text{IV} \cdot 71)$$

となり, $C_{ijkl} u_{i,j}^A = C_{klij} u_{i,j}^A = \sigma_{kl}^A$ に注意すると,

$$\Delta E = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \sigma_{ij}^A \epsilon_{ij}^A d\mathbf{x} \quad (\text{IV} \cdot 72)$$

となる. これは, σ_{ij}^A が Ω の中で均一でなくても使える表現であり, その場合, σ_{ij}^A を座標のべき級数に展開し, ϵ_{ij}^A を座標のべき級数で表せばよい. σ_{ij}^A が Ω の中で一様なら

$$\Delta E = \sigma_{ij}^A \epsilon_{ij}^A \Omega / 2 \quad (\text{IV} \cdot 73)$$

とすればよい. このとき, (IV・63)により

$$\Delta V = -\sigma_{ij}^A \epsilon_{ij}^A \Omega \quad (\text{IV} \cdot 74)$$

$$F_I^M = -\sigma_{ij}^A \epsilon_{ij}^A \Omega / 2 \quad (\text{IV} \cdot 75)$$

となる. なお, σ_{ij}^A が Ω の中で一様とみなせないときは,

$$F_I^M = -\frac{1}{2} \int_{\Omega} \sigma_{ij}^A \epsilon_{ij}^A d\mathbf{x} \quad (\text{IV} \cdot 76)$$

と書いておかねばならぬ. なお以上で定義した F_I^M をよく, modulus 効果による相互作用という.

(IV・75) または (IV・76) とまったく同じような表現を, ある内部応力と, 不均一介在物の間の相互作用の場合に使ってもよいことが証明される. ただし, F_I^M の代わりに E_I^M と書き, これは不均一介在物の存在のために生じた, 弾性エネルギーの変化分と理解する. また, σ_{ij}^A の代わりに, 内部応力 σ_{ij} を使うことは勿論のことである.

〔問題 IV・5〕

〔問題 III・9〕で得た結果を使って〔問題 I・2〕で書き上げたエネルギー表現を求めよ.

$\sigma_{21}^A = \sigma^A$ のみであり, $\epsilon_{21}^A = (1-\nu)\sigma^A(a/a_2)/(2\mu)$ である. エネルギー量を, x_3 方向の単位長さ当りで書き上げるなら, (IV・73), (IV・74)により,

$$\Delta E = \pi a a_2 (\sigma_{21}^A \epsilon_{21}^A + \sigma_{12}^A \epsilon_{12}^A) / 2$$

$$= \pi a^2 (1-\nu) (\sigma^A)^2 / (2\mu)$$

$$\Delta V = -\pi a^2 (1-\nu) (\sigma^A)^2 / \mu$$

となる.

〔問題 IV・6〕

〔問題 III・10〕の結果を使って, 半径 a の円板状クラックは, クラック面に垂直に

$$\sigma^A = \sqrt{\frac{\pi \gamma E}{2(1-\nu)a}}$$

以上の引張応力がかかるなら, 成長することを示せ.

ところで, たいていの析出物等は, eigen 歪 ϵ_{ij}^* を持

つだけでなく, 母相と弾性係数を異にすることが多く, その作る応力, 変位は等価介在物の eigen 歪を使えば求まることをすでに述べた. このような析出物等と外力または内部応力の相互作用はどうなるかも知っていた方がよい. 導出法は省略するが,

$$F_I = F_I^M + F_I^E \quad (\text{IV} \cdot 77)$$

$$F_I^E = - \int_{\Omega} \sigma_{ij}^A \epsilon_{ij}^* d\mathbf{x} = - \int_{\Omega} \sigma_{ij}^A \epsilon_{ij}^* d\mathbf{x} \quad (\text{IV} \cdot 78)$$

とすれば, こういう析出物と外力の, 相互作用のギブス自由エネルギーが算えられる. ϵ_{ij}^* は, たとえば (III・105) で求まる量である. 他の内部応力との相互作用の弾性エネルギーも, (IV・77), (IV・78) と同型で算えられる.

V. お わ り に

こんなことも書いた方がよい, あれも加えておこうとしているうちに編集委員会から指定されましたページ数をすでに越してしまいました. 編集委員会の目論んだことでないことを多分に書いてしまったせいでありましょう. たとえば, 理想気体, ふた, 錘り, 地球を使って, ふたに働く力を調べたことです. しかし, 自分自身がかつて講義を聞き, 本を読み, そして授業をやった経験から, こんなことが役に立つと考えているのです. 私自身, こんな問題をやってみて, なんとなく理解できた気になりましたし, 学生さんにも, へーと思ってもらった気がしますので.

演習問題は, すでに教科書に答がのっているようなものばかりになってしまいました. お許し下さい. でも, もしかしたら, 答の導出法, 計算法に, 面白さ, 簡便さがあることを認めていただけるのではないかと思います. 言いわけをさせていただきますと, 新しい演習問題を考えるのは, けっこう大変なことなのだということです. 新しい演習問題は, ときには論文にもなります. 論文をひねり出すというのはそれほど簡単ではないというのが正直なところです. 本講をお読みにになった学生さんが, 教科書に答しかのっていない問題を自分でごちゃごちゃやって解いてみたり, 新しい問題を考えてみて, 論文作りの一助にしてくれれば, うれしいのであります.

文 献

- (13) 西沢泰二: 日本金属学会会報, **12**(1973), 321.
- (14) C. Zener: Trans. AIME, **197**(1946), 550.
- (15) 里 洋: 日本金属学会誌, **17**(1953), 601.
- (16) A. G. Khachaturyan: Phys. Metals and Metallog., **19**, 3, (1965), 23.
- (17) D. W. Hoffman: Acta Met., **18**(1970), 819.

(7)