

カルサイト双晶変形の力学モデルに関する基礎的研究

○東北大学工学部	学生員	渋谷 慎兵
東北大学大学院	正 員	寺田 賢二郎
東北大学大学院	正 員	京谷 孝史
東北大学大学院	正 員	久田 真
東北大学大学院	正 員	皆川 浩
海洋研究開発機構	正 員	坂口 有人
海洋研究開発機構	正 員	坂口 秀

概 要

本研究ではカルサイト双晶変形の幾何学的性質を調べるとともに、応力負荷時における力学的挙動について熱力学的な枠組みでのモデル化を行い、その検証を行った。具体的には、変形双晶の各パターンについて自由エネルギーを仮定して、エネルギー散逸が出やすいような熱力学モデルにすれば、実験で報告されている双晶変形のパターンを予測可能であることを示した。

1. 序論

ひずみを測る時点ですでに物体が弾性回復してしまっていると、構造物が最終的にどのような応力状態になって壊れたのかを測定することはできない。しかし様々な強度の鉱物からなる岩石全体が弾性変形するときに、一部の弱く微小な鉱物が塑性変形して微小な応力計の役割を担うならば、試料全体がひずみを解消した後でも最大応力を推定し得る。この微小な応力計の役割をする鉱物として、図-1のように応力履歴を双晶として残すカルサイトに着目した。

本研究ではカルサイトを応力計として用いるための予備的検討として、カルサイト双晶変形の幾何学的性質を調べるとともに、応力負荷時における力学的挙動について熱力学的な枠組みでのモデル化を行い、その検証を行った。具体的には、変形双晶の各パターンについて自由エネルギーを仮定して、エネルギー散逸が出やすいような熱力学モデルにすれば、実験で報告されている双晶変形のパターンを予測可能であることを示した。

2. カルサイト双晶変形の幾何学

2.1 双晶変形

双晶変形概念図を図-2に示す。双晶変形とは、ある結晶構造を持つ物体が応力を印加されたとき、その応力を緩和するために、結晶構造は同じであるが配向の異なる“双晶”を生じる変形のことを言う。図-2では、双晶面である K_1 面を境にして、母相格子と鏡面对称の関係にある双晶格子の領域が生じている。

2.2 カルサイトの結晶構造

カルサイトの構造を図-3に示す。カルサイトは(a)のような六方晶を持つことが一般に知られているが、本研究では六方晶ではなく(b)のような偽立方晶(菱面体晶)を単位格子としてカルサイトの幾何学的考察を行うことにする。この偽立方晶と六方晶との対応関係を示したのが(c)

である。

2.3 カルサイトで起こる双晶変形

カルサイトで起こる主要な双晶変形にはr双晶とe双晶がある。このうちr双晶は地中奥深くの高温・高圧下で発生しうが、本研究ではコンクリート構造物中の常温・常圧下での利用を目的としているため、r双晶については考慮しない。一方、e双晶は常温・常圧下でも発生する。e双晶の変形図を図-4に示す。この場合(a)がtype II, (b)がtype III, (c)がtype IVに対応する。e双晶はカルサイトの場合c軸引張方向で、c軸方向に伸びるように発生する。

3. カルサイト双晶変形の熱力学モデル

3.1 カルサイトの強弾性

強弾性とは、初期状態において自発的にひずんでいて、外力を加えるとひずみ方向を変化させ、外力を取り除いてもひずみが残る性質である。この性質はカルサイトや長石等の一部の主要鉱物に見られる。結晶内でひずみ方向がそろっている領域はドメインと呼ばれ、異なる配向状態にあるドメイン間を隔てる面をドメイン壁と呼ぶ。この面は双晶面として観察される。

3.2 双晶ひずみの発展則

カルサイトの初期状態(母相)をtype Iとすると、e双晶の発生する面は互いに等価な3種類があり、それぞれをtype II, type III, type IVとする。これらの双晶の、type Iからのひずみを $\epsilon_t^{(p)}$ ($p = 2, 3, 4$) とする。このひずみ量を用いてカルサイト双晶変形を定式化する。母相からの変形についてのみ考えるため、 $X^{(p1)}(\sigma)$ ($p = 2, 3, 4$) を双晶変形駆動力、 $\psi_t^{(a)}$ を活性化エネルギーとして、

$$X^{(p1)}(\sigma) := \sigma : \bar{\epsilon}_t^{(p)} - \bar{\psi}_t^{(p)} \quad (p = 2, 3, 4)$$

とする。この駆動力が正の値を持つとき、双晶変形が発生するものとする。

4. 計算例

x 軸圧縮、 z 軸圧縮および $x-y$ せん断応力を印加する条件で、散逸エネルギー $D^{(p)} := \sigma : \bar{\epsilon}_t^{(p)}$ ($p = 2, 3, 4$) (J) を求める解析を行った。横軸を応力 σ (N/mm²)、縦軸を散逸エネルギー $D^{(p)}$ ($p = 2, 3, 4$) (J) として、結果を図-4の(d), (e), (f)に示す。

4.1 x 軸圧縮

カルサイトモデルを x 軸で圧縮した場合、図-4の(d)のようにtype IIIを発生させる $D^{(3)}$ の値が最も高く、type II,



図-1 カルサイトの変形双晶

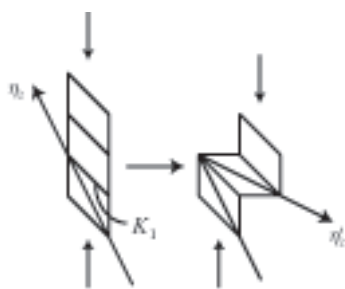


図-2 双晶変形概念図

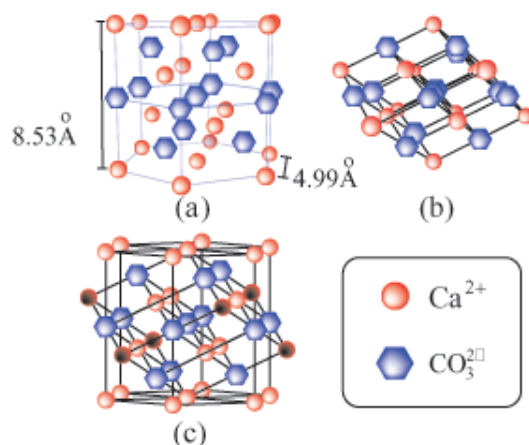


図-3 (a) 六方晶；(b) 偽立方晶；(c) 六方晶と偽立

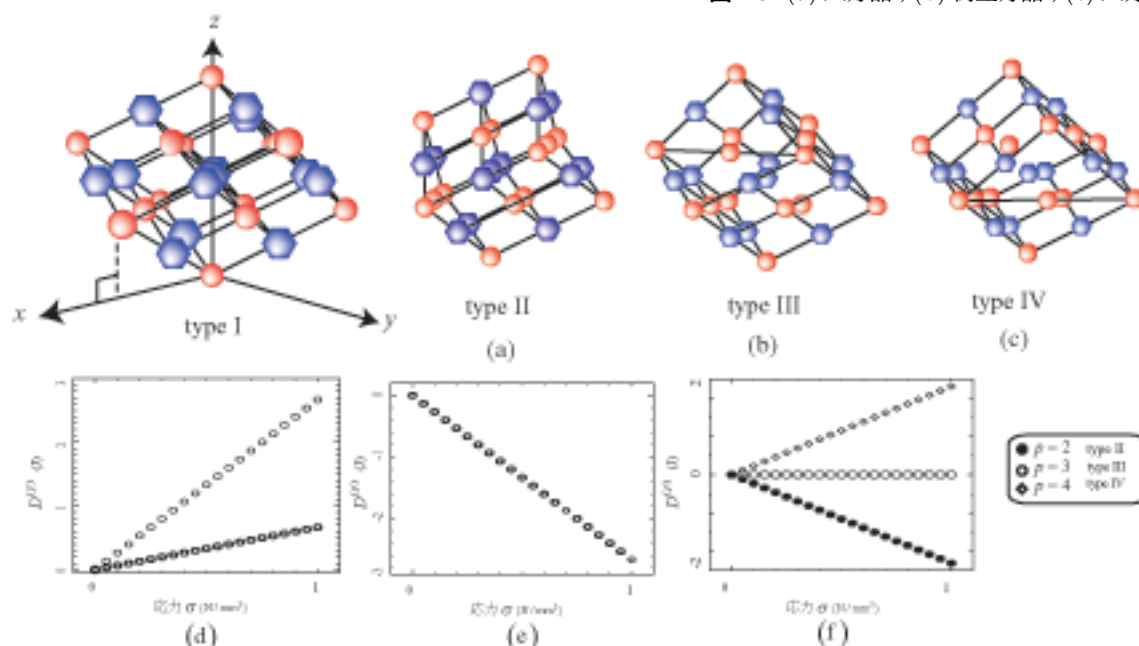


図-4 (a), (b), (c) 変形図；(d)x 軸圧縮；(e)z 軸圧縮；(f)x-y せん断。

type IV を発生させる $D^{(2)}$, $D^{(4)}$ の値が等しいという結果が得られた。この結果は、 $y-z$ 平面に各双晶面を投影するとき、type II に対応する双晶面と type IV に対応する双晶面が等価で、type III に対応する双晶面の面積が他の 2 面と比べて大きいという事実と関連する可能性がある。

4.2 z 軸圧縮

カルサイトモデルを z 軸で圧縮した場合、図-4 の (e) のように type II を発生させる $D^{(2)}$, type III を発生させる $D^{(3)}$, type IV を発生させる $D^{(4)}$ の値が負であり、双晶変形が発生しないという結果が得られた。この結果は、 c 軸方向に伸びるように変形し、 c 軸圧縮では発生しないという e 双晶の機械的性質および実験的事実と整合する。

4.3 x-y せん断応力

カルサイトモデルに $x-y$ せん断応力を印加した場合、図-4 の (f) のように type IV を発生させる $D^{(4)}$ の値が最も高く、 $D^{(2)}$, $D^{(3)}$ とともに正の値を持たないため、type II

と type III は発生し得ないという結果が得られた。この結果は、 c 軸方向に伸びるという e 双晶の機械的性質を考慮すると、 $x-y$ せん断応力によって c 軸方向に伸びるのは type IV のみであるという事実と整合する。

5. 結論

カルサイト双晶変形についての熱力学モデルを構築して、各応力状態で発生し得る各双晶 type を判定することができた。今後の展望としては、実験を行って活性化エネルギー等の詳細な値を得て、印加された応力による双晶変形発生メカニズムの解析を行い、最終的にはカルサイトで発生した変形双晶から、応力状態を逆解析で予測することなどが挙げ

参考文献

- 1) S.Bueble, W.W.Schmahl: Mechanical twinning in calcite considered with the concept of ferroelasticity, Phys Chem Minerals, No.26, pp.668-672, 1999.
- 2) Aizu K: Possible species of "ferroelastic" crystals and of simultaneously ferroelastic and ferroelastic crystals, J Phys Soc Japan, No.27, pp.387-596, 1969.

(2010 年 2 月 10 日提出)