

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

1. はじめに

日本では地震による被害が多いため、耐震のための技術が発展しているといえる。しかし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、地震によってどのような応力状態になるのが実際に測定することはできていない。なぜなら、物体中の応力状態を知るにはその物体がどの程度ひずんでいるのか測定する必要があるが、ひずみを測る時点ですでにその物体は弾性回復してしまっているからである。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、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も最大応力を推定し得る。

本研究では、応力履歴を残しつつ、微小な応力計の役割をする鉱物としてカルサイトに着目した。カルサイトはモース硬度3のやわらかい鉱物で、天然では蝶型双晶や矢筈型双晶等の”双晶”という形状で発掘されることが多い。カルサイト双晶とは、結晶方向の違うカルサイト同士が結晶面を共有している状態であるが、一つのカルサイト結晶にある方向から圧力を加えていくと、応力を解放するようにカルサイト結晶中に双晶ができる。このカルサイト変形双晶の発生する仕組みやそのときの応力状態が解明できれば、カルサイトを応力計として用いることができるはずである。本研究ではその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、応力を与えたときの力学的挙動について熱力学的な枠組みでのモデル化を試みる。

2. カルサイト双晶変形の幾何学

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

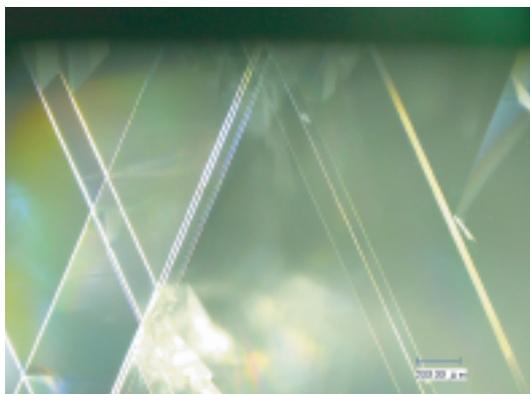


図-1 カルサイトの変形双晶

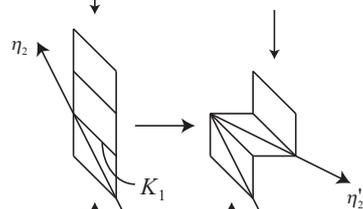


図-2 双晶変形概念図

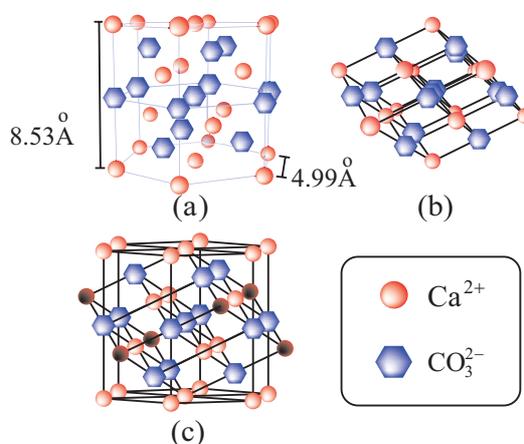


図-3 (a) 六方晶; (b) 偽立方晶; (c) 六方晶と偽立方晶との対応。

の応力をリラックスするために、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。

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)を持つものとしてカルサイトを扱うことにする。六方晶と偽立方晶の対応関係を示したのが(c)である。

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。

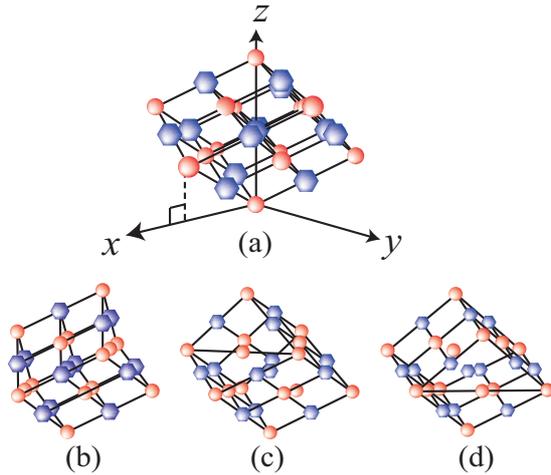


図-4 (a) 変形前 (type I); (b) type II; (c) type III; (d) type IV .

表-1 各ドメイン状態での自発ひずみ $\bar{\epsilon}_t^{(a)}$ ($a = I, II, III, IV$)

I	$\mathbf{0}$
II	$\frac{e}{6} \begin{pmatrix} -4 & 4\sqrt{3} & -2\sqrt{2} \\ 4\sqrt{3} & 12 & 2\sqrt{6} \\ -2\sqrt{2} & 2\sqrt{6} & 16 \end{pmatrix}$
III	$\frac{e}{6} \begin{pmatrix} -16 & 0 & 4\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ 4\sqrt{2} & 0 & 16 \end{pmatrix}$
IV	$\frac{e}{6} \begin{pmatrix} -4 & -4\sqrt{3} & -2\sqrt{2} \\ -4\sqrt{3} & -12 & -2\sqrt{6} \\ -2\sqrt{2} & -2\sqrt{6} & 16 \end{pmatrix}$

3. カルサイト双晶変形の熱力学モデル

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 からのひずみを表 1 に示す. 表 1 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, $X^{(p1)}(bm\sigma)$ ($p = 2, 3, 4$) 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.

4. 計算例

x 軸圧縮および $x-y$ せん断応力を印加するの条件で, 散逸エネルギー $\sigma : \bar{\epsilon}_{rmt}^{(p)}$ を求める解析を行った. 横軸を応力 σ (N/mm^2), 縦軸を散逸エネルギー $\sigma : \bar{\epsilon}_t^{(p)}$ ($p = 2, 3, 4$) (J), 各双晶 type を発生させる駆動力を $X^{(p1)}(\sigma)$ ($p = 2, 3, 4$) (J) として, 結果を図-5 と図-6 に示す.

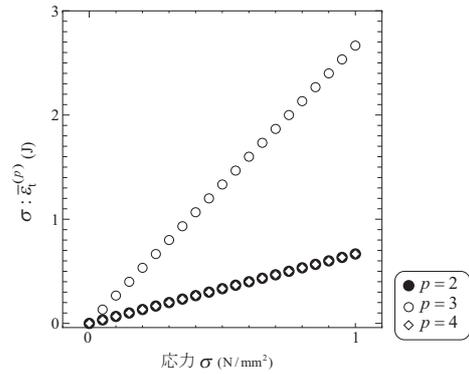


図-5 x 軸圧縮

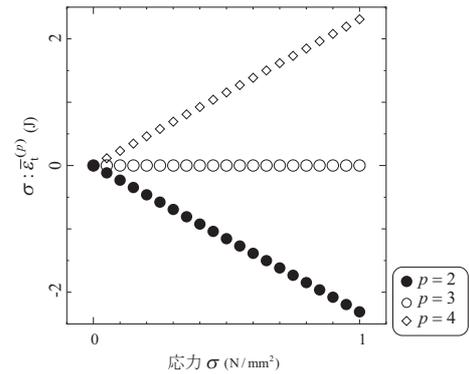


図-6 $x-y$ せん断応力

x 軸圧縮 カルサイトモデルを x 軸で圧縮した場合, 図-5 のように type III を発生させる $X^{(31)}$ の値が最も高く, type II, type IV を発生させる $X^{(21)}, X^{(41)}$ 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合致し得る.

$x-y$ 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-6 のように type IV を発生させる $X^{(41)}$ の値が最も高く, $X^{(21)}, X^{(31)}$ 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. 終わりに

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, カルサイトで発生した変形双晶から, 応力状態を逆解析することが挙げられる.

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.