

序 文

材料の微細組織内部の応力状態が、その材料の特性に大きく影響を与えることが近年、種々の学問分野において見出されている。例えば半導体材料における歪超格子では弾性場の解析が半導体設計に大きな役割を果たしている。ポリマーアロイの分野では、もともと相変態の化学的駆動力が小さいので、外力による効果が組織形成に大きく影響することが知られている。また炭素鋼の焼き入れによって生じるマルテンサイト組織の安定性に対する応力の役割、またNi基耐熱合金における整合析出物の形態学などは、最近の自己組織形成の分野において再びクロズアップされ、いわば古くて新しい分野となっている。したがって、固体中に欠陥や析出相などが不均一に存在することによって生じる応力場を正確に解析し材料組織の安定性を理解することは、近年の材料設計における重要課題の一つである。従来、弾性論は巨視的な物体の変形（例えば、はりの曲げや棒のねじり等）を題材に解説される場合が多いが、以上のような材料の微視的応力状態を解析するためには、より精緻な弾性論が必要である。なぜなら弾性率の非等方性や組織内の不均質性、さらに格子歪の不均一性が形成組織形態の安定性に大きく影響するからである。

以上のような、不均一な材料組織内における微視的弾性場を解析する体系として、これまでに「マイクロメカニクス」と呼ばれる分野が発展している。さらに近年、計算組織学におけるフェーズフィールド法の登場によって、マイクロメカニクスと材料組織形成の分野が融合し、不均一な材料組織内における弾性場の直接計算（これは「フェーズフィールド微視的弾性論」と呼ばれている）と、組織形成ダイナミクスとの練成計算が可能となった。フェーズフィールド法は連続体モデルに基づく材料組織形成過程の現象論的なシミュレーション法で、現在、種々の材料科学・工学分野を横断的に進展しており、具体的な計算対象は、デンドライト成長、拡散相分解、規則-不規則変態、各種ドメイン成長（誘電体、磁性体）、結晶変態、マルテンサイト変態、形状記憶、結晶成長・再結晶、転位ダイナミクス等々、材料組織学を中心にほぼ材料学全般に

広がっている。

マイクロメカニクスの応用である「フェーズフィールド微視的弾性論」は、実用的な重要性にもかかわらず、これまで入門から専門までをカバーする解説書が存在しなかった。著者の一人は以前、当出版社の「材料学シリーズ」材料設計計算工学（計算組織学編）内の第4章にて、当該分野における入門編を執筆させていただいたが、基礎的な教科書であるために、計算例は全て等方弾性体の範囲に留まった。しかし現実の材料設計に役立てるためには、実用的な観点から、結晶の非等方性や弾性不均質性まで扱った、入門を補う解説書が必要と考えられる。そこで本書では、大学院修士課程から博士課程および研究者・技術者を対象に、フェーズフィールド微視的弾性論を詳細に説明した。なお書名の「材料組織弾性学」は、材料組織内の弾性場をフェーズフィールド微視的弾性論に基づき解析する学問分野を意味している。

本書の構成は以下のようにまとめられる。第1章は本書で用いる各種記号の意味、および数学的基礎についての説明であり、読者は必要に応じて1章を参照することによって式展開の規則や数学的要点を確認することができる。第2章は本書の中心の章であり、フェーズフィールド微視的弾性論の定式化について説明している。第3章は、従来のマイクロメカニクスとフェーズフィールド微視的弾性論の対応を念頭に等価介在物問題を扱った章である。従来のマイクロメカニクスとフェーズフィールド微視的弾性論がどのように対応しているかを理解していただきたい。第4章と第5章では、それぞれ純膨張（収縮）および純せん断のアイゲン歪場を例に、不均一組織内の弾性場を解析するフェーズフィールド微視的弾性論の理論式とその計算例を示した。フェーズフィールド微視的弾性論における各種関係式の具体的な書き下しの例題として活用していただけたらと考えている。第6章は弾性不均質系（組織内の場所によって弾性率が異なる系）の理論的取り扱いに関する解説である。この部分は近年、フェーズフィールド微視的弾性論において大きく発展した部分であり、3章の等価介在物法の一般化にもなっている。第7章がフェーズフィールド微視的弾性論を用いた組織形成シミュレーション例であり、ここではNi基超合金における組織形成について最近の計算を紹介した。本書の中心は2章であり、後の章はその応用および拡張編である。

なお本書では、フェーズフィールド法自体の詳細については紙面の関係上ふれなかった。興味のある読者は、巻末参考文献の「フェーズフィールド法に関するもの」を参照願いたい。また各種のデモプログラムや、より進んだ計算理論の詳細については著者のホームページ (http://tkoyama.web.nitech.ac.jp/Phase-Field_Modeling.htm) にて公開しているので、興味ある方は参照していただきたい(本書の計算プログラムの一部も、このページにて公開している)。本書をきっかけとして一人でも多くの方々に、材料組織の弾性学へ興味をお持ちいただければ望外の喜びである。

最後に、当分野を研究する直接のきっかけを作っていただいた恩師、宮崎亨先生に心から感謝する。森永正彦先生、土井 稔先生、小坂井孝生先生、ならびに村田純教先生には、折にふれて種々ご議論いただいた。また内田老鶴圃の内田学氏からは、常に暖かい激励をいただいた。あらためて各氏に感謝する次第である。

2012 年 4 月

小山敏幸 塚田祐貴