第７章　弾性歪エネルギー評価法（１）

7-1 はじめに

本稿では相分解組織の有する弾性歪エネルギーの定式化について説明する。基本的には整合相分解における弾性歪エネルギーをマイクロメカニクス[1-3]に基づき定式化する。この種の理論では、理論式の変形に応用数学を多用するために、結構、式の導出が長く複雑になり、何が既知量で、どの法則を利用して、何を導こうとしているのかが不明確になる場合が多い。しかし、マイクロメカニクスの論理は非常に洗練された体系を持っており、やっていることは至極単純である。つまり、eigen歪[1]の空間分布が与えられた時に、平衡方程式（力の釣り合い方程式）とフックの法則を用いて、応力場、歪場、および弾性歪エネルギー場を計算しているだけである。

以下では、まず Eshelby サイクルについて説明し、続いて秩序変数が濃度場のみの場合を例に取り、析出相が薄い板状である特殊な場合について、弾性歪エネルギーの計算方法を説明する。

7-2 Eshelby サイクル

γ 相内に α 相がマルテンサイト変態によって形成される場合を考えよう。$\gamma \to \alpha$ 変態によって、格子は膨張すると仮定する。この時の eigen 歪を ε_{ij}^0 と置く。図 7-1 が Eshelby サイクルの説明図である。求めたい量は、γ 相母相内に α 相が存在する時に材料内にため込まれている弾性歪エネルギー E_{str} である。図 7-1 の Eshelby サイクルに従い、E_{str} を計算する方法について定性的に説明する。

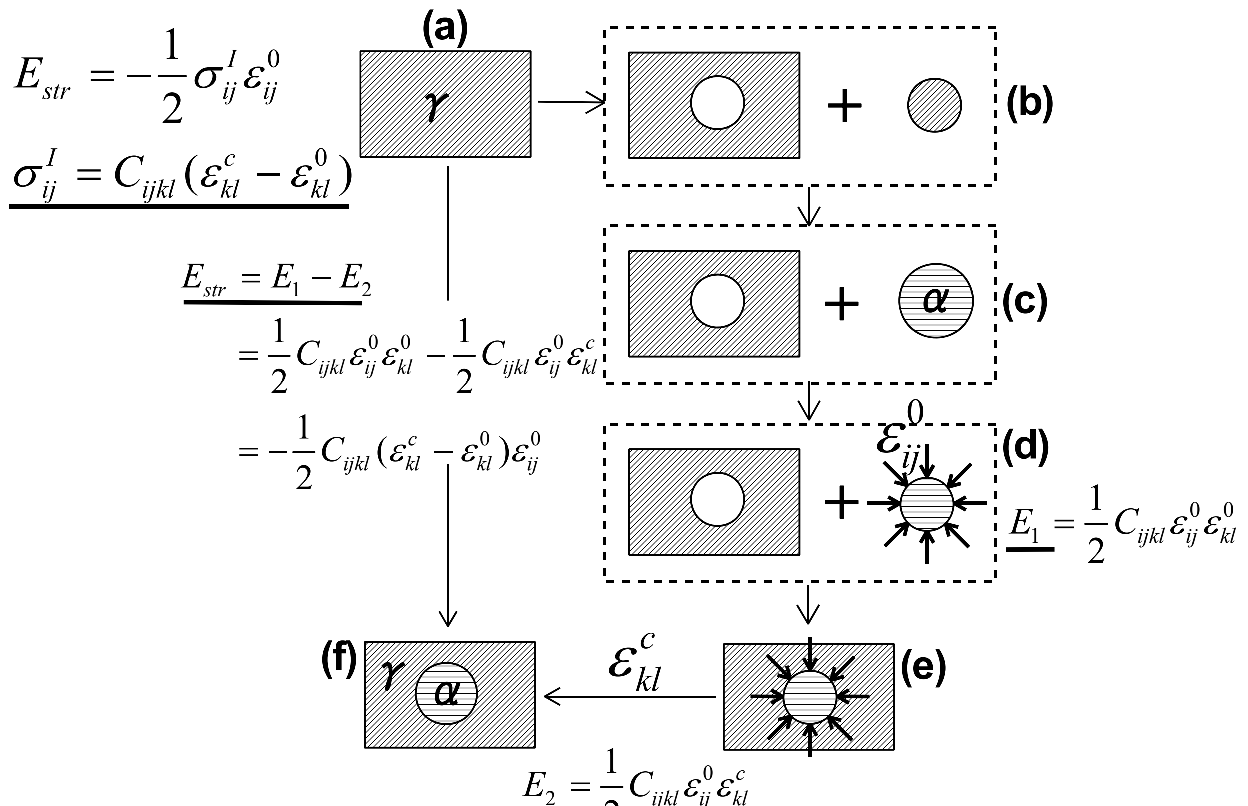

図 7-1 Eshelby サイクルの説明図（積分記号は省略している）

まず初期状態は γ 単相状態(a)である。この状態から中央の部分を切り出す（b）。この切り出した領域がマルテンサイト変態によって α 相に変化する（c）。α 相に変態することによって、格子が膨張すると仮定したので、図のように α 相のサイズは切り出した γ 相よりも大きくなる。さらにこの場合、切り出した状態でのマルテンサイト変態であるので、α 相の周囲に拘束はない。次にこの変態した α 相に外力を加えて eigen 歪 ε_{ij}^0 分だけ変形させ、元の γ 相のサイズに戻す(d)。この変形に要する弾性歪エネルギーを E_1 とすると、E_1 は、

$$E_1 = \int_V \frac{1}{2} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^0\varepsilon_{kl}^0 dV$$

にて与えられる。C_{ijkl} は弾性定数である。図(d)の応力のかかった状態を維持しながら γ 相の切り出した穴に α 相を入れる(e)。最後にかけていた外力を取り去る(f)。外力を取り去ったので、α 相は図(c)のサイズに向かって膨張しようとするが、今度は周囲に γ 相が存在するので、(c)のサイズまでは膨張できずに途中で止まる。この時の α 相が γ 相へなした歪が全歪（拘束歪）ε_{ij}^c である。この時の仕事 E_2 は、反作用の応力 $C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^0$ で ε_{kl}^c だけ歪ませたのであるから、

$$E_2 = \int_V \frac{1}{2} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^0\varepsilon_{kl}^c dV$$

と表現できる。結局、最終的に材料に蓄えられている弾性歪エネルギー E_{str} は、E_1 だけ拘束して E_2 だけ緩和した後の残量に対応するので、

$$E_{str} = E_1 - E_2 = \int_V \frac{1}{2} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^0\varepsilon_{kl}^0 dV - \int_V \frac{1}{2} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^0\varepsilon_{kl}^c dV = -\frac{1}{2}\int_V C_{ijkl}(\varepsilon_{kl}^c - \varepsilon_{kl}^0)\varepsilon_{ij}^0 dV$$

と与えられることになる。特に最終的な応力場は

$$\sigma_{ij}^I = C_{ijkl}(\varepsilon_{kl}^c - \varepsilon_{kl}^0)$$

となる（$\varepsilon_{ij}^{el} = \varepsilon_{ij}^c - \varepsilon_{ij}^0$ が弾性歪である）ので、E_{str} は、

$$E_{str} = -\frac{1}{2}\int_V \sigma_{ij}^I \varepsilon_{ij}^0 dV$$

となる。通常、弾性歪エネルギーは、

$$\begin{aligned} E_{str} &= \frac{1}{2}\int_V C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{el}\varepsilon_{kl}^{el} dV = \frac{1}{2}\int_V C_{ijkl}(\varepsilon_{ij}^c - \varepsilon_{ij}^0)(\varepsilon_{kl}^c - \varepsilon_{kl}^0) dV \\ &= \frac{1}{2}\int_V \sigma_{ij}^I(\varepsilon_{ij}^c - \varepsilon_{ij}^0) dV \\ &= \frac{1}{2}\int_V \sigma_{ij}^I \varepsilon_{ij}^c dV - \frac{1}{2}\int_V \sigma_{ij}^I \varepsilon_{ij}^0 dV \end{aligned}$$

にて表現されるが、この右辺第 1 項をガウスの発散定理を用いて変形すると、

$$\frac{1}{2}\int_V \sigma_{ij}^I \varepsilon_{ij}^c dV = \frac{1}{2}\int_S \sigma_{ij}^I u_i n_j dS - \frac{1}{2}\int_V \sigma_{ij,j}^I u_i dV = 0$$

を得る。ここで、平衡方程式 $\sigma_{ij,j}^I = 0$（体積力は考慮していない）と、物体表面における力の釣り合い $\sigma_{ij}^I n_j = 0$（物体表面には圧力などの外力は 0 と仮定している）を用いた。したがって E_{str} は

$$E_{str} = -\frac{1}{2}\int_V \sigma_{ij}^I \varepsilon_{ij}^0 dV$$

となり、Eshelby サイクルの帰結と一致する。図 7-1 ではマルテンサイト変態を想定したが、整合における拡散相分解においても同様の式となる。切り出した領域内の原子数は固定されるので、図 7-1 の状態は、整合における拡散相分解では、析出相の格子定数が濃度変化に伴い大きくなる場合に対応していることになる。なお拡散相変態で、界面が非整合である場合は、切り出した領域内の原子数は固定されず、最終的に物体全体が膨張（収縮）する（拡散相変態であるので原子は動ける）ことによって、弾性歪エネルギーが緩和される。

7-3 Cahn のスピノーダル分解理論おける弾性歪エネルギー

ここでは Cahn のスピノーダル分解理論[4]にて用いられている弾性歪エネルギーにおける弾性定数の関数 $Y_{<hkl>}$ を、斜方晶について導出してみよう。整合析出物の形状を、(hkl) 面上にのった非常に薄い板形状と仮定し、結晶構造は斜方晶とする。eigen 歪場は純膨張・収縮(pure dilatation)とし、eigen 歪の値を ε_{ij}^0 と置く。以上の仮定から、歪テンソルは以下のように与えられる。

$$\varepsilon_{ij}^0 = \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix} \tag{1}$$

ε は濃度 c（A-B2 元系を想定し、B 成分の濃度）の関数で、格子定数にベガード則が成立する場合、$\varepsilon = \eta(c - c_0)$ にて与えられる[4]。η は格子ミスマッチで、c_0 は合金の平均 B 成分濃度である。本来、eigen 歪の基準は純物質の格子定数が基準となるが、ここでは基準を組成 c_0 の固溶体にしている。これは、物体全体の応力の総和が 0 になるように鏡像応力を考慮することによって、弾性歪の基準が純物質から組成 c_0 の固溶体に移行するためである（つまり組成 c_0 の固溶体を歪の基準に取らなくては、全応力の積分が 0 にならない)。また弾性定数は斜方晶を想定して以下のように置く。

$$\begin{aligned} C_{ijkl} &= \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1123} & C_{1131} & C_{1112} \\ * & C_{2222} & C_{2233} & C_{2223} & C_{2231} & C_{2212} \\ * & * & C_{3333} & C_{3323} & C_{3331} & C_{3312} \\ * & * & * & C_{2323} & C_{2331} & C_{2312} \\ * & * & * & * & C_{3131} & C_{3112} \\ * & * & * & * & * & C_{1212} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & 0 & 0 & 0 \\ C_{1122} & C_{2222} & C_{2233} & 0 & 0 & 0 \\ C_{1133} & C_{2233} & C_{3333} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{2323} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{3131} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{1212} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{2}$$

先の場合と同様、図 7-2 で示した Eshelby サイクルの考え方に基づき弾性歪エネルギーを計算する（なお図 7-2 ではわかりやすいように板状析出物をかなり厚く表現している）。(A)の状態は相分離前の固溶体で、(B)は(A)より、これから析出相となる板状部分を切り抜いた状態である（図は板状析出物の断面を表示している）。(C)は相分離が生じて板状析出相の格子定数が大きくなり（格子定数は濃度の関数で、析出相の格子定数の方が母相の格子定数よりも大きいとする）、析出相全体が

膨張した状態を示している。この時の歪がeigen 歪ε_{ij}^0である。特にこの場合は純膨張になるので、eigen 歪テンソルは、式(1)のように$\varepsilon_{ij}^0 = \delta_{ij}\varepsilon$と表現される。$\delta_{ij}$はクロネッカーのデルタで、$i = j$の時$\delta_{ij} = 1$、および$i \neq j$の時$\delta_{ij} = 0$である。(D)は析出相に外から外力をかけて eigen 歪分だけ弾性収縮させて元のサイズにもどす操作である。これに要する弾性歪エネルギーE_1は、式(1)と(2)より以下のように計算される。なお添え字に関して総和規約を採用している。

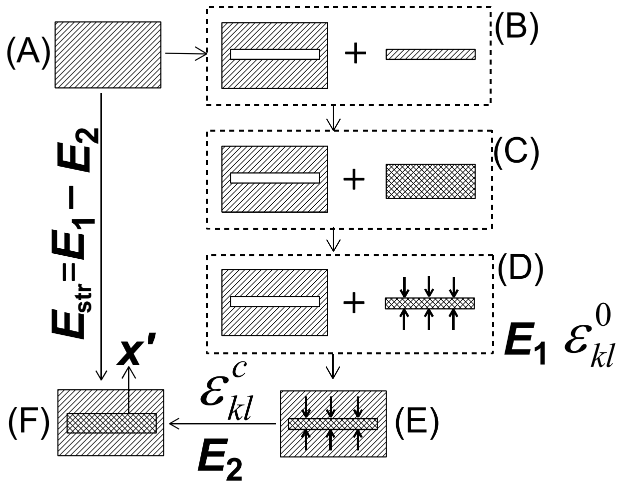

図 7-2　Eshelby サイクルの説明図（板状物の場合）

$$
\begin{aligned}
E_1 = \frac{1}{2}C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^0\varepsilon_{kl}^0 &= \frac{1}{2}C_{1111}\varepsilon_{11}^0\varepsilon_{11}^0 + \frac{1}{2}C_{1122}\varepsilon_{11}^0\varepsilon_{22}^0 + \frac{1}{2}C_{1133}\varepsilon_{11}^0\varepsilon_{33}^0 \\
&\quad + \frac{1}{2}C_{2211}\varepsilon_{22}^0\varepsilon_{11}^0 + \frac{1}{2}C_{2222}\varepsilon_{22}^0\varepsilon_{22}^0 + \frac{1}{2}C_{2233}\varepsilon_{22}^0\varepsilon_{33}^0 \\
&\quad + \frac{1}{2}C_{3311}\varepsilon_{33}^0\varepsilon_{11}^0 + \frac{1}{2}C_{3322}\varepsilon_{33}^0\varepsilon_{22}^0 + \frac{1}{2}C_{3333}\varepsilon_{33}^0\varepsilon_{33}^0 \\
&= \frac{1}{2}\left(C_{11} + C_{22} + C_{33} + 2C_{12} + 2C_{13} + 2C_{23}\right)\varepsilon^2
\end{aligned}
\tag{3}
$$

(D)の状態の析出物を左の母相にもどした状態が(E)である。いま非常に薄い板状析出物を想定しているので、(E)の状態から矢印で示した外力を取り去ると、板面に垂直方向にのみ応力の緩和が生じる（面内は母相の格子定数に完全に一致する）。この緩和後の状態を表した図が(F)である。この板面に垂直方向をx'方向（(F)参照）とし、その方向を表すミラー指数を$< hkl >$としよう（(hkl)面は板状析出物の板面）。またx'方向に垂直な２方向（つまり板面内）をy'およびz'とし、$x'\,y'\,z'$座標系における弾性定数と応力をそれぞれ$C_{ij}^{'}$および$\sigma_{ij}^{'}$とする。完全拘束状態(E)における応力は、

$$
\begin{aligned}
&\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}^0 = (C_{ij11} + C_{ij22} + C_{ij33})\varepsilon \\
&\quad \sigma_{11} = (C_{1111} + C_{1122} + C_{1133})\varepsilon = (C_{11} + C_{12} + C_{13})\varepsilon \\
&\quad \sigma_{22} = (C_{2211} + C_{2222} + C_{2233})\varepsilon = (C_{12} + C_{22} + C_{23})\varepsilon \\
&\quad \sigma_{33} = (C_{3311} + C_{3322} + C_{3333})\varepsilon = (C_{13} + C_{23} + C_{33})\varepsilon \\
&\quad \sigma_{12} = \sigma_{13} = \sigma_{23} = 0
\end{aligned}
$$

にて与えられる。(xyz)および$(x'\,y'\,z')$両座標間の方向余弦をl_{ij}とすると、応力における座標変換の公式$\sigma_{ij}{}' = l_{ip}l_{jq}\sigma_{pq}$を用いて

$$
\sigma_{11}^{'} = l_{1p}l_{1q}\sigma_{pq} = l_{11}l_{11}\sigma_{11} + l_{12}l_{12}\sigma_{22} + l_{13}l_{13}\sigma_{33} = n_1^2\sigma_{11} + n_2^2\sigma_{22} + n_3^2\sigma_{33}
$$

を得る。ここで$l_{11} \equiv n_1$, $l_{12} \equiv n_2$, $l_{13} \equiv n_3$と置いた。これよりx'方向への(反作用の)応力$\sigma_{11}^{'}$は次式にて与えられる。

$$\sigma'_{11} = n_1^2\sigma_{11} + n_2^2\sigma_{22} + n_3^2\sigma_{33}$$
$$= \varepsilon\{n_1^2(C_{11}+C_{12}+C_{13}) + n_2^2(C_{12}+C_{22}+C_{23}) + n_3^2(C_{13}+C_{23}+C_{33})\} \tag{4}$$

さて、σ'_{11}の応力が加わって、x'方向にのみ歪の緩和が生じた場合、その時の緩和による歪量ε'_{11}は、応力の釣合い条件から以下のように導かれる。すなわち、$\sigma'_{11} = C'_{11}\varepsilon'_{11} + C'_{12}\varepsilon'_{22} + C'_{13}\varepsilon'_{33} = C'_{11}\varepsilon'_{11}$（$y'$および$z'$方向に歪の緩和は生じないと仮定したので$\varepsilon'_{22} = \varepsilon'_{33} = 0$）、および式(4)より、

$$\varepsilon'_{11} = \frac{\sigma'_{11}}{C'_{11}} = \frac{\varepsilon\{n_1^2(C_{11}+C_{12}+C_{13}) + n_2^2(C_{12}+C_{22}+C_{23}) + n_3^2(C_{13}+C_{23}+C_{33})\}}{C'_{11}} \tag{5}$$

である。これよりε'_{11}の応力緩和による弾性歪エネルギーの減少量E_2は次式にて与えられる。

$$E_2 = \frac{1}{2}\sigma'_{11}\varepsilon'_{11} = \frac{1}{2}\varepsilon^2\frac{\{n_1^2(C_{11}+C_{12}+C_{13}) + n_2^2(C_{12}+C_{22}+C_{23}) + n_3^2(C_{13}+C_{23}+C_{33})\}^2}{C'_{11}} \tag{6}$$

結局、始めE_1分だけエネルギー的に拘束し、その後E_2分だけエネルギー緩和したのであるから、(F)状態において、まだ析出物に蓄えられているエネルギーは$(E_1 - E_2)$であり、これが析出相の弾性歪エネルギーとなる。したがって、式(3)と(6)から弾性歪エネルギーE_{str}は次式に与えられる。

$$\begin{aligned}
E_{str} &= E_1 - E_2 \\
&= \frac{1}{2}\left(C_{11}+C_{22}+C_{33}+2C_{12}+2C_{13}+2C_{23}\right)\varepsilon^2 \\
&\quad -\frac{1}{2}\varepsilon^2\frac{\{n_1^2(C_{11}+C_{12}+C_{13}) + n_2^2(C_{12}+C_{22}+C_{23}) + n_3^2(C_{13}+C_{23}+C_{33})\}^2}{C'_{11}} \\
&= \frac{1}{2}\varepsilon^2\left[\begin{array}{l}\left(C_{11}+C_{22}+C_{33}+2C_{12}+2C_{13}+2C_{23}\right) \\ -\dfrac{\{n_1^2(C_{11}+C_{12}+C_{13}) + n_2^2(C_{12}+C_{22}+C_{23}) + n_3^2(C_{13}+C_{23}+C_{33})\}^2}{C'_{11}}\end{array}\right]
\end{aligned} \tag{7}$$

以上が Eshelby サイクルにて弾性歪エネルギーを計算する時の基本的な考え方である。

ここで、C'_{11}を$C_{11}, C_{22}, C_{33}, C_{44}, C_{55}, C_{66}, C_{12}, C_{13}, C_{23}$を用いて書き直そう。座標変換の公式$C'_{ijkl} = l_{ip}l_{jq}l_{km}l_{ln}C_{pqmn}$を用いて、

$$
\begin{aligned}
C'_{11} &= C'_{1111} = l_{1p} l_{1q} l_{1m} l_{1n} C_{pqmn} \\
&= l_{11}l_{11}l_{11}l_{11}C_{1111} + l_{11}l_{11}l_{12}l_{12}C_{1122} + l_{11}l_{11}l_{13}l_{13}C_{1133} \\
&\quad + l_{12}l_{12}l_{11}l_{11}C_{2211} + l_{12}l_{12}l_{12}l_{12}C_{2222} + l_{12}l_{12}l_{13}l_{13}C_{2233} \\
&\quad + l_{13}l_{13}l_{11}l_{11}C_{3311} + l_{13}l_{13}l_{12}l_{12}C_{3322} + l_{13}l_{13}l_{13}l_{13}C_{3333} \\
&\quad + l_{11}l_{12}l_{11}l_{12}C_{1212} + l_{11}l_{12}l_{12}l_{11}C_{1221} + l_{12}l_{11}l_{11}l_{12}C_{2112} + l_{12}l_{11}l_{12}l_{11}C_{2121} \\
&\quad + l_{11}l_{13}l_{11}l_{13}C_{1313} + l_{11}l_{13}l_{13}l_{11}C_{1331} + l_{13}l_{11}l_{11}l_{13}C_{3113} + l_{13}l_{11}l_{13}l_{11}C_{3131} \\
&\quad + l_{12}l_{13}l_{12}l_{13}C_{2323} + l_{12}l_{13}l_{13}l_{12}C_{2332} + l_{13}l_{12}l_{12}l_{13}C_{3223} + l_{13}l_{12}l_{13}l_{12}C_{3232} \\
&= l_{11}{}^4 C_{11} + l_{12}{}^4 C_{22} + l_{13}{}^4 C_{33} + 2l_{11}{}^2 l_{12}{}^2 C_{12} + 2l_{11}{}^2 l_{13}{}^2 C_{13} + 2l_{12}{}^2 l_{13}{}^2 C_{23} \\
&\quad + 4l_{11}{}^2 l_{12}{}^2 C_{66} + 4l_{11}{}^2 l_{13}{}^2 C_{55} + 4l_{12}{}^2 l_{13}{}^2 C_{44} \\
&= n_1^4 C_{11} + n_2^4 C_{22} + n_3^4 C_{33} + 2n_1^2 n_2^2 C_{12} + 2n_1^2 n_3^2 C_{13} + 2n_2^2 n_3^2 C_{23} \\
&\quad + 4n_1^2 n_2^2 C_{66} + 4n_1^2 n_3^2 C_{55} + 4n_2^2 n_3^2 C_{44} \\
&= n_1^4 C_{11} + n_2^4 C_{22} + n_3^4 C_{33} + 2(n_1^2 n_2^2 C_{12} + n_1^2 n_3^2 C_{13} + n_2^2 n_3^2 C_{23}) + 4(n_1^2 n_2^2 C_{66} + n_1^2 n_3^2 C_{55} + n_2^2 n_3^2 C_{44})
\end{aligned}
\tag{8}
$$

を得る。式(8)を式(7)に代入して、最終的に弾性歪エネルギーとして次式を得る。

$$
E_{str} = \frac{1}{2}\varepsilon^2 \left[\begin{array}{l} C_{11} + C_{22} + C_{33} + 2(C_{12} + C_{13} + C_{23}) \\ -\dfrac{\{n_1^2(C_{11} + C_{12} + C_{13}) + n_2^2(C_{12} + C_{22} + C_{23}) + n_3^2(C_{13} + C_{23} + C_{33})\}^2}{n_1^4 C_{11} + n_2^4 C_{22} + n_3^4 C_{33} + 2(n_1^2 n_2^2 C_{12} + n_1^2 n_3^2 C_{13} + n_2^2 n_3^2 C_{23}) + 4(n_1^2 n_2^2 C_{66} + n_1^2 n_3^2 C_{55} + n_2^2 n_3^2 C_{44})} \end{array} \right]
\tag{9}
$$

これより $Y_{<hkl>}$ は

$$
Y_{<hkl>} = \frac{1}{2} \left[\begin{array}{l} C_{11} + C_{22} + C_{33} + 2(C_{12} + C_{13} + C_{23}) \\ -\dfrac{\{n_1^2(C_{11} + C_{12} + C_{13}) + n_2^2(C_{12} + C_{22} + C_{23}) + n_3^2(C_{13} + C_{23} + C_{33})\}^2}{n_1^4 C_{11} + n_2^4 C_{22} + n_3^4 C_{33} + 2(n_1^2 n_2^2 C_{12} + n_1^2 n_3^2 C_{13} + n_2^2 n_3^2 C_{23}) + 4(n_1^2 n_2^2 C_{66} + n_1^2 n_3^2 C_{55} + n_2^2 n_3^2 C_{44})} \end{array} \right]
\tag{10}
$$

と与えられる。また ε はベガード則が仮定できる場合には、$\varepsilon = \eta(c - c_0)$ と表現できるので、結局、弾性歪エネルギーは、

$$
E_{str}(c) = \eta^2 Y_{<hkl>} (c - c_0)^2 \tag{11}
$$

にて与えられる。η は格子ミスマッチ、c は局所的な濃度、および c_0 は合金組成である。

以上は斜方晶系における定式化であるが、立方晶、正方晶、および六方晶への変換は弾性定数マトリックスを

【立方晶】

$$
\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix}
$$

【正方晶】

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix}$$

【六方晶】

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{21} & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ C_{31} & C_{32} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dfrac{C_{11}-C_{12}}{2} \end{pmatrix}$$

とすればよい（正方晶と六方晶については、z 方向を c 軸としている)。

例えば式(10)を立方晶について書き下すと、

$$\begin{aligned} Y_{\langle hkl\rangle} &= \frac{1}{2}\left[\begin{array}{l} C_{11}+C_{22}+C_{33}+2(C_{12}+C_{13}+C_{23}) \\ -\dfrac{\{n_1^2(C_{11}+C_{12}+C_{13})+n_2^2(C_{12}+C_{22}+C_{23})+n_3^2(C_{13}+C_{23}+C_{33})\}^2}{n_1^4C_{11}+n_2^4C_{22}+n_3^4C_{33}+2(n_1^2n_2^2C_{12}+n_1^2n_3^2C_{13}+n_2^2n_3^2C_{23})+4(n_1^2n_2^2C_{66}+n_1^2n_3^2C_{55}+n_2^2n_3^2C_{44})} \end{array} \right] \\ &= \frac{1}{2}\left[\begin{array}{l} 3C_{11}+6C_{12} \\ -\dfrac{\{n_1^2(C_{11}+2C_{12})+n_2^2(C_{11}+2C_{12})+n_3^2(C_{11}+2C_{12})\}^2}{C_{11}(n_1^4+n_2^4+n_3^4)+2C_{12}(n_1^2n_2^2+n_1^2n_3^2+n_2^2n_3^2)+4C_{44}(n_1^2n_2^2+n_1^2n_3^2+n_2^2n_3^2)} \end{array} \right] \\ &= \frac{1}{2}\left[\begin{array}{l} 3(C_{11}+2C_{12}) \\ -\dfrac{(C_{11}+2C_{12})^2}{C_{11}\{1-2(n_1^2n_2^2+n_2^2n_3^2+n_3^2n_1^2)\}+2C_{12}(n_1^2n_2^2+n_1^2n_3^2+n_2^2n_3^2)+4C_{44}(n_1^2n_2^2+n_1^2n_3^2+n_2^2n_3^2)} \end{array} \right] \\ &= \frac{(C_{11}+2C_{12})}{2}\left[3-\frac{C_{11}+2C_{12}}{C_{11}+2(2C_{44}-C_{11}+C_{12})(n_1^2n_2^2+n_1^2n_3^2+n_2^2n_3^2)} \right] \end{aligned} \tag{12}$$

となり、従来の結果に一致している。なおここで

$$n_1^4+n_2^4+n_3^4=(n_1^2+n_2^2+n_3^2)^2-2(n_1^2n_2^2+n_2^2n_3^2+n_3^2n_1^2)=1-2(n_1^2n_2^2+n_2^2n_3^2+n_3^2n_1^2)$$

を用いた。なお(n_1,n_2,n_3)はミラー指数(h,k,l)を用いて、

$$n_1=\frac{h}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}},\ n_2=\frac{k}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}},\ n_3=\frac{l}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}\quad \therefore n_1^2n_2^2+n_2^2n_3^2+n_3^2n_1^2=\frac{h^2k^2+k^2l^2+l^2h^2}{(h^2+k^2+l^2)^2}$$

と表される。特に$\langle hkl\rangle=\langle 100\rangle$および$\langle hkl\rangle=\langle 111\rangle$では、それぞれ

$$Y_{<100>} = \frac{(C_{11}+2C_{12})(C_{11}-C_{12})}{C_{11}}, \qquad Y_{<111>} = \frac{6C_{44}(C_{11}+2C_{12})}{C_{11}+2C_{12}+4C_{44}}$$

と計算される。また式(12)において、[　]内の分母にある $(2C_{44}-C_{11}+C_{12})$ の正負によって、弾性的にソフトな方向($Y_{<hkl>}$ が最小となる方向)が変化する。$(2C_{44}-C_{11}+C_{12})>0$ の時には $<100>$ 方向がソフトとなり、$(2C_{44}-C_{11}+C_{12})<0$ の時には $<111>$ 方向がソフトとなる。これを反映して立方晶における弾性異方性パラメータ A は通常、$A \equiv 2C_{44}/(C_{11}-C_{12})$ にて定義される。

また六方晶では $Y_{<hkl>}$ を $Y_{<hkil>}$ と書き直し、

$$Y_{<hkil>} = \frac{1}{2}\left[\begin{array}{l} C_{11}+C_{22}+C_{33}+2(C_{12}+C_{13}+C_{23}) \\ -\dfrac{\{n_1^2(C_{11}+C_{12}+C_{13})+n_2^2(C_{12}+C_{22}+C_{23})+n_3^2(C_{13}+C_{23}+C_{33})\}^2}{n_1^4C_{11}+n_2^4C_{22}+n_3^4C_{33}+2(n_1^2n_2^2C_{12}+n_1^2n_3^2C_{13}+n_2^2n_3^2C_{23})+4(n_1^2n_2^2C_{66}+n_1^2n_3^2C_{55}+n_2^2n_3^2C_{44})} \end{array}\right]$$

を得る。六方晶で c 軸に垂直な面（最密面）は $<hkil>=<0001>$ で、$(n_1,n_2,n_3)=(0,0,1)$ である。したがって、

$$Y_{<0001>} = \frac{1}{2}\left[C_{11}+C_{22}+C_{33}+2(C_{12}+C_{13}+C_{23})-\frac{(C_{13}+C_{23}+C_{33})^2}{C_{33}}\right]$$

となる。六方晶で a 軸に垂直な面は $<hkil>=<2\bar{1}\bar{1}0>$ で、$(n_1,n_2,n_3)=(1,0,0)$ であるので、

$$Y_{<2\bar{1}\bar{1}0>} = \frac{1}{2}\left[C_{11}+C_{22}+C_{33}+2(C_{12}+C_{13}+C_{23})-\frac{(C_{11}+C_{12}+C_{13})^2}{C_{11}}\right]$$

となる（n_i は斜方晶における直交座標系での単位ベクトルであるので注意）。

さて以上から、Cahnのスピノーダル分解理論にて用いられている弾性歪エネルギーにおいて、非常に大きな仮定がなされていることがわかる。すなわちこの弾性歪エネルギーは、非常に薄い板状析出物以外には厳密には適用できない。またスピノーダル分解における変調構造のように、板状析出相が周期的に配列している場合であっても、以上の定式化においては析出相間の弾性相互作用が考慮されていないために、やはり厳密ではない。式(11)では、弾性歪エネルギーが 1 つの単純な式で陽に与えられるので、定性的な考察を行うには非常に有用であるが、実際の材料の相分解に伴う弾性場について定量的な議論が必要である場合には、式(11)の弾性歪エネルギーでは不十分である。一般形状を有する析出相が分散した組織の弾性歪エネルギーは、Khachaturyanの弾性歪エネルギー評価法[3]（内容的にはマイクロメカニクスと等価であるが、任意の組織形態の弾性場の数値計算に便利な形式に定式化されている）を用いて、かなり正確に計算することができるので、これについては次章にて説明する。

参考文献

(1) 森 勉, 村外志夫 :「マイクロメカニクス」,培風館, (1976)
(2) T.Mura; "*Micromechanics of Defects in Solids*", 2nd Rev. Ed., Kluwer Academic, (1991).
(3) A.Khachaturyan:"*Theory of Structural Transformations in Solids*.", Wiley, New York, NY, (1983)
(4) J.E.Hilliard: *"Phase Transformation"*, ed. by H.I.Aaronson, ASM, Metals Park, Ohio, (1970), 497.

************************************ 参考 **

弾性定数の対称性について

１．弾性定数の定義

広義のフックの法則を式(1)にて定義する。

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} e_{kl} \tag{1}$$

弾性定数には、式(2)の関係が成立する。

$$C_{ijkl} = C_{jikl}\ , C_{ijkl} = C_{ijlk}\ , C_{ijkl} = C_{klij} \tag{2}$$

これより、独立な弾性定数に基づき、式(1)を書き下すと以下のようになる。

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1123} & C_{1131} & C_{1112} \\ * & C_{2222} & C_{2233} & C_{2223} & C_{2231} & C_{2212} \\ * & * & C_{3333} & C_{3323} & C_{3331} & C_{3312} \\ * & * & * & C_{2323} & C_{2331} & C_{2312} \\ * & * & * & * & C_{3131} & C_{3112} \\ * & * & * & * & * & C_{1212} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_{11} \\ e_{22} \\ e_{33} \\ 2e_{23} \\ 2e_{31} \\ 2e_{12} \end{pmatrix} \tag{3}$$

なお * はマトリックスの対称要素を表す。したがって、独立な弾性定数は、最大 21 個である。次に結晶の対称性による独立な弾性定数の決定方法について考察する。

２．独立な弾性定数の決定

まず、結晶の対称性を数式的に扱うために直交座標の回転による座標変換公式を導く。旧直角座標系におけるベクトル P の成分を (x_1, x_2, x_3) とし、変換後の新座標系におけるベクトル P' の成分を $(x_1^{'}, x_2^{'}, x_3^{'})$ と置く。また両座標系の原点は一致させるものとする。この両座標系間の関係を導くために、方向余弦 l_{ij} を以下のように定義する。

$$\begin{pmatrix} x_1^{'} \\ x_2^{'} \\ x_3^{'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l_{11} & l_{12} & l_{13} \\ l_{21} & l_{22} & l_{23} \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \tag{4}$$

方向余弦の意味は以下のように理解することができる。いま、$P(x_1, x_2, x_3)$ が与えられて、$P'(x_1^{'}, x_2^{'}, x_3^{'})$ を導く場合を考える。旧座標系において (x_1, x_2, x_3) を成分とするベクトル P は当然ながら $(x_1, 0, 0)$，$(0, x_2, 0)$ および $(0, 0, x_3)$ の和である。これら３つのベクトルは旧座標系ではその座標軸上に存在するが、新座標系では必ずしも座標軸上に存在するとは限らない。したがって $(x_1, 0, 0)$，$(0, x_2, 0)$ および $(0, 0, x_3)$ を、さらにそれぞれ新座標系成分に分解してやらなくてはならない。旧座標系 x_1 軸上のベクトル $(x_1, 0, 0)$ を、新座標系で見た場合の成分は $(x_1 \cos(\theta_{11}), x_1 \cos(\theta_{21}), x_1 \cos(\theta_{31}))$ にて与えられる。θ_{ij} は旧座標系 x_j 軸と新座標系 x_i 軸との間の角度である。同様に $(0, x_2, 0)$ および $(0, 0, x_3)$ の新座標成分は $(x_2 \cos(\theta_{12}), x_2 \cos(\theta_{22}), x_2 \cos(\theta_{32}))$ および $(x_3 \cos(\theta_{13}), x_3 \cos(\theta_{23}), x_3 \cos(\theta_{33}))$ にて与えられる。
以上を行列を用いて表記すると以下のようになる。

$$\begin{pmatrix} x_1^{'} \\ x_2^{'} \\ x_3^{'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_1 \cos(\theta_{11}) + x_2 \cos(\theta_{12}) + x_3 \cos(\theta_{13}) \\ x_1 \cos(\theta_{21}) + x_2 \cos(\theta_{22}) + x_3 \cos(\theta_{23}) \\ x_1 \cos(\theta_{31}) + x_2 \cos(\theta_{32}) + x_3 \cos(\theta_{33}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta_{11}) & \cos(\theta_{12}) & \cos(\theta_{13}) \\ \cos(\theta_{21}) & \cos(\theta_{22}) & \cos(\theta_{23}) \\ \cos(\theta_{31}) & \cos(\theta_{32}) & \cos(\theta_{33}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} \tag{5}$$

式(4)と式(5)を比較することにより、方向余弦 l_{ij} は式(6)にて与えられる。

$$\begin{pmatrix} l_{11} & l_{12} & l_{13} \\ l_{21} & l_{22} & l_{23} \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\theta_{11}) & \cos(\theta_{12}) & \cos(\theta_{13}) \\ \cos(\theta_{21}) & \cos(\theta_{22}) & \cos(\theta_{23}) \\ \cos(\theta_{31}) & \cos(\theta_{32}) & \cos(\theta_{33}) \end{pmatrix} \tag{6}$$

式(6)右辺のθの添え字は、前が新座標系の軸を、後が旧座標系の軸を表す。これより、方向余弦 l_{ij} には、内積の定義から次の性質が存在する。

$$\begin{aligned} l_{ik}l_{ik} &= 1 \\ l_{ik}l_{jk} &= 0(i \neq j) \\ l_{ki}l_{ki} &= 1 \\ l_{ki}l_{kj} &= 0(i \neq j) \end{aligned} \tag{7}$$

例：$$\begin{aligned} l_{i1}l_{i1} &= l_{11}l_{11} + l_{21}l_{21} + l_{31}l_{31} = 1 \\ l_{i1}l_{j1} &= l_{11}l_{21} + l_{11}l_{31} + l_{21}l_{11} + l_{21}l_{31} + l_{31}l_{11} + l_{31}l_{21} = 0 \end{aligned}$$

この方向余弦 l_{ij} を用いることによって、歪および応力成分の座標変換公式は、それぞれ式(8)および式(9)にて与えられる。

$$e'_{ij} = l_{ik}l_{jl}e_{kl} \tag{8}$$

例：$$\begin{aligned} e'_{11} &= l_{1k}l_{1l}e_{kl} \\ &= l_{11}l_{11}e_{11} + l_{11}l_{12}e_{12} + l_{11}l_{13}e_{13} + l_{12}l_{11}e_{21} + l_{12}l_{12}e_{22} + l_{12}l_{13}e_{23} + l_{13}l_{11}e_{31} + l_{13}l_{12}e_{32} + l_{13}l_{13}e_{33} \end{aligned}$$

$$\sigma'_{ij} = l_{ik}l_{jl}\sigma_{kl} \tag{9}$$

以上の歪および応力成分の座標変換公式を用いることにより、結晶の対称性による独立な弾性定数は以下のように計算することができる。

３．斜方晶における独立な弾性定数の導き方

斜方晶は直方体対称性を有する。したがって、x_1x_2, x_2x_3,および x_1x_2 面に対する座標変換において、弾性体の応力および歪は不変である。この条件により、斜方晶における独立な弾性定数が導くことが出来る。

3-1 x_1x_2 面における対称性

この対称性は、$x_1 = x'_1, x_2 = x'_2, x_3 = -x'_3$ と変換した場合、弾性定数 C_{ijkl} が不変であることを意味する。この場合の方向余弦 l_{ij} は次式にて与えられる。

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} l_{11} & l_{12} & l_{13} \\ l_{21} & l_{22} & l_{23} \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \cos(\theta_{11}) & \cos(\theta_{12}) & \cos(\theta_{13}) \\ \cos(\theta_{21}) & \cos(\theta_{22}) & \cos(\theta_{23}) \\ \cos(\theta_{31}) & \cos(\theta_{32}) & \cos(\theta_{33}) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos(0) & \cos(90) & \cos(90) \\ \cos(90) & \cos(0) & \cos(90) \\ \cos(-90) & \cos(-90) & \cos(180) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{10}$$

これより、歪および応力成分の座標変換公式(8)(9)を用いることによって、以下の関係式を得る。

$$
\begin{aligned}
\sigma'_{11} &= l_{1k}l_{1l}\sigma_{kl} = l_{11}l_{11}\sigma_{11} = \sigma_{11} \\
\sigma'_{22} &= l_{2k}l_{2l}\sigma_{kl} = l_{22}l_{22}\sigma_{22} = \sigma_{22} \\
\sigma'_{33} &= l_{3k}l_{3l}\sigma_{kl} = l_{33}l_{33}\sigma_{33} = \sigma_{33} \\
\sigma'_{23} &= l_{2k}l_{3l}\sigma_{kl} = l_{22}l_{33}\sigma_{23} = -\sigma_{23} \\
\sigma'_{13} &= l_{1k}l_{3l}\sigma_{kl} = l_{11}l_{33}\sigma_{13} = -\sigma_{13} \\
\sigma'_{12} &= l_{1k}l_{2l}\sigma_{kl} = l_{11}l_{22}\sigma_{12} = \sigma_{12}
\end{aligned}
\tag{11}
$$

$$
\begin{aligned}
e'_{11} &= l_{1k}l_{1l}e_{kl} = l_{11}l_{11}e_{11} = e_{11} \\
e'_{22} &= l_{2k}l_{2l}e_{kl} = l_{22}l_{22}e_{22} = e_{22} \\
e'_{33} &= l_{3k}l_{3l}e_{kl} = l_{33}l_{33}e_{33} = e_{33} \\
e'_{23} &= l_{2k}l_{3l}e_{kl} = l_{22}l_{33}e_{23} = -e_{23} \\
e'_{13} &= l_{1k}l_{3l}e_{kl} = l_{11}l_{33}e_{13} = -e_{13} \\
e'_{12} &= l_{1k}l_{2l}e_{kl} = l_{11}l_{22}e_{12} = e_{12}
\end{aligned}
\tag{12}
$$

新座標系においても、フックの法則は成立するので、$\sigma'_{ij} = C_{ijkl}e'_{kl}$ に式(11)と(12)を代入することにより、次式を得る。

$$
\begin{aligned}
&\sigma'_{11} = C_{11kl}e'_{kl} \\
&= C_{1111}e'_{11} + C_{1112}e'_{12} + C_{1113}e'_{13} + C_{1121}e'_{21} + C_{1122}e'_{22} + C_{1123}e'_{23} + C_{1131}e'_{31} + C_{1132}e'_{32} + C_{1133}e'_{33} \\
&= C_{1111}e_{11} + C_{1112}e_{12} + (-C_{1113})e_{13} + C_{1121}e_{21} + C_{1122}e_{22} + (-C_{1123})e_{23} + (-C_{1131})e_{31} + (-C_{1132})e_{32} + C_{1133}e'_{33} \\
&= \sigma_{11} \\
&= C_{1111}e_{11} + C_{1112}e_{12} + C_{1113}e_{13} + C_{1121}e_{21} + C_{1122}e_{22} + C_{1123}e_{23} + C_{1131}e_{31} + C_{1132}e_{32} + C_{1133}e_{33}
\end{aligned}
$$

これより、$C_{1113} = 0, C_{1123} = 0$ となる。
同様に、$C_{2213} = 0$, $C_{2223} = 0$, $C_{3313} = 0$, $C_{3323} = 0$, $C_{1213} = 0$, $C_{1223} = 0$ が得られる。
また、

$$
\begin{aligned}
&\sigma'_{13} = C_{13kl}e'_{kl} \\
&= C_{1311}e'_{11} + C_{1312}e'_{12} + C_{1313}e'_{13} + C_{1321}e'_{21} + C_{1322}e'_{22} + C_{1323}e'_{23} + C_{1331}e'_{31} + C_{1332}e'_{32} + C_{1333}e'_{33} \\
&= C_{1311}e_{11} + C_{1312}e_{12} + (-C_{1313})e_{13} + C_{1321}e_{21} + C_{1322}e_{22} + (-C_{1323})e_{23} + (-C_{1331})e_{31} + (-C_{1332})e_{32} + C_{1333}e'_{33} \\
&= -\sigma_{13} \\
&= -(C_{1311}e_{11} + C_{1312}e_{12} + C_{1313}e_{13} + C_{1321}e_{21} + C_{1322}e_{22} + C_{1323}e_{23} + C_{1331}e_{31} + C_{1332}e_{32} + C_{1333}e_{33})
\end{aligned}
$$

より、$C_{1311} = 0$, $C_{1312} = 0$, $C_{1321} = 0$, $C_{1322} = 0$, $C_{1333} = 0$ となる。
同様に、$C_{2311} = 0$, $C_{2312} = 0$, $C_{2321} = 0$, $C_{2322} = 0$, $C_{2333} = 0$ である。
以上をまとめると、0 となる弾性定数は以下のようになる。

$$
C_{1113} = 0\,,\ C_{1123} = 0\,,\ C_{2213} = 0\,,\ C_{2223} = 0\,,\ C_{3313} = 0\,,\ C_{3323} = 0\,,\ C_{1213} = 0\,,\ C_{1223} = 0 \tag{13}
$$

これより、独立な弾性定数は 13 個となり、式(3)は次式にて与えられる。

$$\begin{pmatrix}\sigma_{11}\\\sigma_{22}\\\sigma_{33}\\\sigma_{23}\\\sigma_{31}\\\sigma_{12}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & 0 & 0 & C_{1112}\\ * & C_{2222} & C_{2233} & 0 & 0 & C_{2212}\\ * & * & C_{3333} & 0 & 0 & C_{3312}\\ * & * & * & C_{2323} & C_{2331} & 0\\ * & * & * & * & C_{3131} & 0\\ * & * & * & * & * & C_{1212}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e_{11}\\e_{22}\\e_{33}\\2e_{23}\\2e_{31}\\2e_{12}\end{pmatrix} \tag{14}$$

3-2 x_2x_3 面における対称性

この対称性は、$x_1=-x_1^{'}, x_2=x_2^{'}, x_3=x_3^{'}$ と変換した場合、弾性定数 C_{ijkl} が不変であることを意味する。この場合の方向余弦 l_{ij} は次式にて与えられる。

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix}l_{11} & l_{12} & l_{13}\\ l_{21} & l_{22} & l_{23}\\ l_{31} & l_{32} & l_{33}\end{pmatrix}&=\begin{pmatrix}\cos(\theta_{11}) & \cos(\theta_{12}) & \cos(\theta_{13})\\ \cos(\theta_{21}) & \cos(\theta_{22}) & \cos(\theta_{23})\\ \cos(\theta_{31}) & \cos(\theta_{32}) & \cos(\theta_{33})\end{pmatrix}\\ &=\begin{pmatrix}\cos(180) & \cos(-90) & \cos(-90)\\ \cos(90) & \cos(0) & \cos(90)\\ \cos(90) & \cos(90) & \cos(0)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{15}$$

これより、歪および応力成分の座標変換公式(8)(9)を用いることによって、以下の関係式を得る。

$$\begin{aligned}\sigma_{11}^{'}&=l_{1k}l_{1l}\sigma_{kl}=l_{11}l_{11}\sigma_{11}=\sigma_{11}\\ \sigma_{22}^{'}&=l_{2k}l_{2l}\sigma_{kl}=l_{22}l_{22}\sigma_{22}=\sigma_{22}\\ \sigma_{33}^{'}&=l_{3k}l_{3l}\sigma_{kl}=l_{33}l_{33}\sigma_{33}=\sigma_{33}\\ \sigma_{23}^{'}&=l_{2k}l_{3l}\sigma_{kl}=l_{22}l_{33}\sigma_{23}=\sigma_{23}\\ \sigma_{13}^{'}&=l_{1k}l_{3l}\sigma_{kl}=l_{11}l_{33}\sigma_{13}=-\sigma_{13}\\ \sigma_{12}^{'}&=l_{1k}l_{2l}\sigma_{kl}=l_{11}l_{22}\sigma_{12}=-\sigma_{12}\end{aligned} \tag{16}$$

$$\begin{aligned}e_{11}^{'}&=l_{1k}l_{1l}e_{kl}=l_{11}l_{11}e_{11}=e_{11}\\ e_{22}^{'}&=l_{2k}l_{2l}e_{kl}=l_{22}l_{22}e_{22}=e_{22}\\ e_{33}^{'}&=l_{3k}l_{3l}e_{kl}=l_{33}l_{33}e_{33}=e_{33}\\ e_{23}^{'}&=l_{2k}l_{3l}e_{kl}=l_{22}l_{33}e_{23}=e_{23}\\ e_{13}^{'}&=l_{1k}l_{3l}e_{kl}=l_{11}l_{33}e_{13}=-e_{13}\\ e_{12}^{'}&=l_{1k}l_{2l}e_{kl}=l_{11}l_{22}e_{12}=-e_{12}\end{aligned} \tag{17}$$

新座標系においても、フックの法則は成立するので、$\sigma_{ij}^{'}=C_{ijkl}e_{kl}^{'}$ に式(16)と(17)を代入することにより、次式を得る。

$$
\begin{aligned}
&\sigma'_{11} = C_{11kl}e'_{kl} \\
&= C_{1111}e'_{11} + C_{1112}e'_{12} + C_{1113}e'_{13} + C_{1121}e'_{21} + C_{1122}e'_{22} + C_{1123}e'_{23} + C_{1131}e'_{31} + C_{1132}e'_{32} + C_{1133}e'_{33} \\
&= C_{1111}e_{11} + (-C_{1112})e_{12} + (-C_{1113})e_{13} + (-C_{1121})e_{21} + C_{1122}e_{22} + C_{1123}e_{23} + (-C_{1131})e_{31} + C_{1132}e_{32} + C_{1133}e'_{33} \\
&= \sigma_{11} \\
&= C_{1111}e_{11} + C_{1112}e_{12} + C_{1113}e_{13} + C_{1121}e_{21} + C_{1122}e_{22} + C_{1123}e_{23} + C_{1131}e_{31} + C_{1132}e_{32} + C_{1133}e_{33}
\end{aligned}
$$

これより、$C_{1112} = 0, C_{1113} = 0$ となる。
同様に、$C_{2212} = 0$, $C_{2213} = 0$, $C_{3312} = 0$, $C_{3313} = 0$, $C_{2312} = 0$, $C_{2313} = 0$ が得られる。
また、

$$
\begin{aligned}
&\sigma'_{13} = C_{13kl}e'_{kl} \\
&= C_{1311}e'_{11} + C_{1312}e'_{12} + C_{1313}e'_{13} + C_{1321}e'_{21} + C_{1322}e'_{22} + C_{1323}e'_{23} + C_{1331}e'_{31} + C_{1332}e'_{32} + C_{1333}e'_{33} \\
&= C_{1311}e_{11} + (-C_{1312})e_{12} + (-C_{1313})e_{13} + (-C_{1321})e_{21} + C_{1322}e_{22} + C_{1323}e_{23} + (-C_{1331})e_{31} + C_{1332}e_{32} + C_{1333}e'_{33} \\
&= -\sigma_{13} \\
&= -(C_{1311}e_{11} + C_{1312}e_{12} + C_{1313}e_{13} + C_{1321}e_{21} + C_{1322}e_{22} + C_{1323}e_{23} + C_{1331}e_{31} + C_{1332}e_{32} + C_{1333}e_{33})
\end{aligned}
$$

より、$C_{1311} = 0$, $C_{1322} = 0$, $C_{1323} = 0$, $C_{1332} = 0$, $C_{1333} = 0$ となる。
同様に、$C_{1211} = 0$, $C_{1222} = 0$, $C_{1223} = 0$, $C_{1232} = 0$, $C_{1233} = 0$ である。
以上をまとめると、0 となる弾性定数は以下のようになる。

$$
C_{1112} = 0 \,,\, C_{1113} = 0 \,,\, C_{2212} = 0 \,,\, C_{2213} = 0 \,,\, C_{3312} = 0 \,,\, C_{3313} = 0 \,,\, C_{2312} = 0 \,,\, C_{2313} = 0 \tag{18}
$$

これより、独立な弾性定数は 13 個となり、式(3)は次式にて与えられる。

$$
\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & C_{1123} & 0 & 0 \\ * & C_{2222} & C_{2233} & C_{2223} & 0 & 0 \\ * & * & C_{3333} & C_{3323} & 0 & 0 \\ * & * & * & C_{2323} & 0 & 0 \\ * & * & * & * & C_{3131} & C_{3112} \\ * & * & * & * & * & C_{1212} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_{11} \\ e_{22} \\ e_{33} \\ 2e_{23} \\ 2e_{31} \\ 2e_{12} \end{pmatrix} \tag{19}
$$

3-3 x_1x_3 面における対称性

この対称性は、$x_1 = x'_1, x_2 = -x'_2, x_3 = x'_3$ と変換した場合、弾性定数 C_{ijkl} が不変であることを意味する。この場合の方向余弦 l_{ij} は次式にて与えられる。

$$
\begin{aligned}
\begin{pmatrix} l_{11} & l_{12} & l_{13} \\ l_{21} & l_{22} & l_{23} \\ l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \cos(\theta_{11}) & \cos(\theta_{12}) & \cos(\theta_{13}) \\ \cos(\theta_{21}) & \cos(\theta_{22}) & \cos(\theta_{23}) \\ \cos(\theta_{31}) & \cos(\theta_{32}) & \cos(\theta_{33}) \end{pmatrix} \\
&= \begin{pmatrix} \cos(0) & \cos(90) & \cos(90) \\ \cos(-90) & \cos(180) & \cos(-90) \\ \cos(90) & \cos(90) & \cos(0) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{20}
$$

これより、歪および応力成分の座標変換公式(8)(9)を用いることによって、以下の関係式を得る。

$$
\begin{aligned}
\sigma'_{11} &= l_{1k}l_{1l}\sigma_{kl} = l_{11}l_{11}\sigma_{11} = \sigma_{11} \\
\sigma'_{22} &= l_{2k}l_{2l}\sigma_{kl} = l_{22}l_{22}\sigma_{22} = \sigma_{22} \\
\sigma'_{33} &= l_{3k}l_{3l}\sigma_{kl} = l_{33}l_{33}\sigma_{33} = \sigma_{33} \\
\sigma'_{23} &= l_{2k}l_{3l}\sigma_{kl} = l_{22}l_{33}\sigma_{23} = -\sigma_{23} \\
\sigma'_{13} &= l_{1k}l_{3l}\sigma_{kl} = l_{11}l_{33}\sigma_{13} = \sigma_{13} \\
\sigma'_{12} &= l_{1k}l_{2l}\sigma_{kl} = l_{11}l_{22}\sigma_{12} = -\sigma_{12}
\end{aligned}
\tag{21}
$$

$$
\begin{aligned}
e'_{11} &= l_{1k}l_{1l}e_{kl} = l_{11}l_{11}e_{11} = e_{11} \\
e'_{22} &= l_{2k}l_{2l}e_{kl} = l_{22}l_{22}e_{22} = e_{22} \\
e'_{33} &= l_{3k}l_{3l}e_{kl} = l_{33}l_{33}e_{33} = e_{33} \\
e'_{23} &= l_{2k}l_{3l}e_{kl} = l_{22}l_{33}e_{23} = -e_{23} \\
e'_{13} &= l_{1k}l_{3l}e_{kl} = l_{11}l_{33}e_{13} = e_{13} \\
e'_{12} &= l_{1k}l_{2l}e_{kl} = l_{11}l_{22}e_{12} = -e_{12}
\end{aligned}
\tag{22}
$$

新座標系においても、フックの法則は成立するので、$\sigma'_{ij} = C_{ijkl}e'_{kl}$ に式(21)と(22)を代入することにより、次式を得る。

$$
\begin{aligned}
&\sigma'_{11} = C_{11kl}e'_{kl} \\
&= C_{1111}e'_{11} + C_{1112}e'_{12} + C_{1113}e'_{13} + C_{1121}e'_{21} + C_{1122}e'_{22} + C_{1123}e'_{23} + C_{1131}e'_{31} + C_{1132}e'_{32} + C_{1133}e'_{33} \\
&= C_{1111}e_{11} + (-C_{1112})e_{12} + C_{1113}e_{13} + (-C_{1121})e_{21} + C_{1122}e_{22} + (-C_{1123})e_{23} + C_{1131}e_{31} + (-C_{1132})e_{32} + C_{1133}e'_{33} \\
&= \sigma_{11} \\
&= C_{1111}e_{11} + C_{1112}e_{12} + C_{1113}e_{13} + C_{1121}e_{21} + C_{1122}e_{22} + C_{1123}e_{23} + C_{1131}e_{31} + C_{1132}e_{32} + C_{1133}e_{33}
\end{aligned}
$$

これより、$C_{1112} = 0, C_{1123} = 0$ となる。
同様に、$C_{2212} = 0$, $C_{2223} = 0$, $C_{3312} = 0$, $C_{3323} = 0$, $C_{1312} = 0$, $C_{1323} = 0$ が得られる。
また、

$$
\begin{aligned}
&\sigma'_{12} = C_{12kl}e'_{kl} \\
&= C_{1211}e'_{11} + C_{1212}e'_{12} + C_{1213}e'_{13} + C_{1221}e'_{21} + C_{1222}e'_{22} + C_{1223}e'_{23} + C_{1231}e'_{31} + C_{1232}e'_{32} + C_{1233}e'_{33} \\
&= C_{1211}e_{11} + (-C_{1212})e_{12} + C_{1213}e_{13} + (-C_{1221})e_{21} + C_{1222}e_{22} + (-C_{1223})e_{23} + C_{1231}e_{31} + (-C_{1232})e_{32} + C_{1233}e'_{33} \\
&= -\sigma_{12} \\
&= -(C_{1211}e_{11} + C_{1212}e_{12} + C_{1213}e_{13} + C_{1221}e_{21} + C_{1222}e_{22} + C_{1223}e_{23} + C_{1231}e_{31} + C_{1232}e_{32} + C_{1233}e_{33})
\end{aligned}
$$

より、$C_{1211} = 0$, $C_{1213} = 0$, $C_{1222} = 0$, $C_{1231} = 0$, $C_{1233} = 0$ となる。
同様に、$C_{2311} = 0$, $C_{2313} = 0$, $C_{2322} = 0$, $C_{2331} = 0$, $C_{2333} = 0$ である。
以上をまとめると、０となる弾性定数は以下のようになる。

$$
C_{1112} = 0\,, C_{1123} = 0\,, C_{2212} = 0\,, C_{2223} = 0\,, C_{3312} = 0\,, C_{3323} = 0\,, C_{1312} = 0\,, C_{1323} = 0 \tag{23}
$$

これより、独立な弾性定数は 13 個となり、式(3)は次式にて与えられる。

$$\begin{pmatrix}\sigma_{11}\\\sigma_{22}\\\sigma_{33}\\\sigma_{23}\\\sigma_{31}\\\sigma_{12}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}C_{1111}&C_{1122}&C_{1133}&0&C_{1131}&0\\ *&C_{2222}&C_{2233}&0&C_{2231}&0\\ *&*&C_{3333}&0&C_{3331}&0\\ *&*&*&C_{2323}&0&C_{2312}\\ *&*&*&*&C_{3131}&0\\ *&*&*&*&*&C_{1212}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e_{11}\\e_{22}\\e_{33}\\2e_{23}\\2e_{31}\\2e_{12}\end{pmatrix} \tag{24}$$

以上より、式(14)(19)(24)を総合することにより、斜方晶の弾性定数は次式にて与えられる。

$$\begin{pmatrix}\sigma_{11}\\\sigma_{22}\\\sigma_{33}\\\sigma_{23}\\\sigma_{31}\\\sigma_{12}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}C_{1111}&C_{1122}&C_{1133}&0&0&0\\ *&C_{2222}&C_{2233}&0&0&0\\ *&*&C_{3333}&0&0&0\\ *&*&*&C_{2323}&0&0\\ *&*&*&*&C_{3131}&0\\ *&*&*&*&*&C_{1212}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e_{11}\\e_{22}\\e_{33}\\2e_{23}\\2e_{31}\\2e_{12}\end{pmatrix} \tag{25}$$

４．立方晶の弾性定数の導出

立方晶は、斜方晶の対称性に加え、回転対称性も有する。つまり、座標変換 $x_1 = x_2^{'}, x_2 = -x_1^{'}, x_3 = x_3^{'}$、$x_1 = x_1^{'}, x_2 = x_3^{'}, x_3 = -x_2^{'}$、および $x_1 = -x_3^{'}, x_2 = x_2^{'}, x_3 = x_1^{'}$ において応力・歪状態は不変である。

4-1 $x_1 = x_2^{'}, x_2 = -x_1^{'}, x_3 = x_3^{'}$ における独立な弾性定数の決定

まず、方向余弦 l_{ij} は次式にて与えられる。

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix}l_{11}&l_{12}&l_{13}\\l_{21}&l_{22}&l_{23}\\l_{31}&l_{32}&l_{33}\end{pmatrix}&=\begin{pmatrix}\cos(\theta_{11})&\cos(\theta_{12})&\cos(\theta_{13})\\\cos(\theta_{21})&\cos(\theta_{22})&\cos(\theta_{23})\\\cos(\theta_{31})&\cos(\theta_{32})&\cos(\theta_{33})\end{pmatrix}\\&=\begin{pmatrix}\cos(90)&\cos(0)&\cos(90)\\\cos(180)&\cos(90)&\cos(90)\\\cos(90)&\cos(90)&\cos(0)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}0&1&0\\-1&0&0\\0&0&1\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{26}$$

これより、歪および応力成分の座標変換公式(8)(9)を用いることによって、以下の関係式を得る。

$$\begin{aligned}\sigma_{11}^{'} &= l_{1k}l_{1l}\sigma_{kl} = l_{12}l_{12}\sigma_{22} = \sigma_{22}\\\sigma_{22}^{'} &= l_{2k}l_{2l}\sigma_{kl} = l_{21}l_{21}\sigma_{11} = \sigma_{11}\\\sigma_{33}^{'} &= l_{3k}l_{3l}\sigma_{kl} = l_{33}l_{33}\sigma_{33} = \sigma_{33}\\\sigma_{23}^{'} &= l_{2k}l_{3l}\sigma_{kl} = l_{21}l_{33}\sigma_{13} = -\sigma_{13}\\\sigma_{13}^{'} &= l_{1k}l_{3l}\sigma_{kl} = l_{12}l_{33}\sigma_{23} = \sigma_{23}\\\sigma_{12}^{'} &= l_{1k}l_{2l}\sigma_{kl} = l_{12}l_{21}\sigma_{21} = -\sigma_{21}\end{aligned} \tag{27}$$

$$
\begin{aligned}
e'_{11} &= l_{1k}l_{1l}e_{kl} = l_{12}l_{12}e_{22} = e_{22} \\
e'_{22} &= l_{2k}l_{2l}e_{kl} = l_{21}l_{21}e_{11} = e_{11} \\
e'_{33} &= l_{3k}l_{3l}e_{kl} = l_{33}l_{33}e_{33} = e_{33} \\
e'_{23} &= l_{2k}l_{3l}e_{kl} = l_{21}l_{33}e_{13} = -e_{13} \\
e'_{13} &= l_{1k}l_{3l}e_{kl} = l_{12}l_{33}e_{23} = e_{23} \\
e'_{12} &= l_{1k}l_{2l}e_{kl} = l_{12}l_{21}e_{21} = -e_{21}
\end{aligned} \tag{28}
$$

新座標系においても、フックの法則は成立するので、$\sigma'_{ij} = C_{ijkl}e'_{kl}$ に式(27)と(28)を代入することにより、次式を得る。なお斜方晶において既に０となっている弾性定数成分は０とおいた。

$$
\begin{aligned}
\sigma'_{11} &= C_{11kl}e'_{kl} \\
&= C_{1111}e'_{11} + C_{1122}e'_{22} + C_{1133}e'_{33} = C_{1111}e_{22} + C_{1122}e_{11} + C_{1133}e_{33} \\
&= C_{1122}e_{11} + C_{1111}e_{22} + C_{1133}e_{33} \\
&= \sigma_{22} \\
&= C_{2211}e_{11} + C_{2222}e_{22} + C_{2233}e_{33}
\end{aligned}
$$

これより、$C_{1111} = C_{2222}$, $C_{1133} = C_{2233}$

また、

$$
\begin{aligned}
\sigma'_{22} &= C_{22kl}e'_{kl} \\
&= C_{2211}e'_{11} + C_{2222}e'_{22} + C_{2233}e'_{33} = C_{2211}e_{22} + C_{2222}e_{11} + C_{2233}e_{33} \\
&= C_{2222}e_{11} + C_{2211}e_{22} + C_{2233}e_{33} \\
&= \sigma_{11} \\
&= C_{1111}e_{11} + C_{1122}e_{22} + C_{1133}e_{33}
\end{aligned}
$$

これより、$C_{2222} = C_{1111}$, $C_{2233} = C_{1133}$

また、

$$
\begin{aligned}
\sigma'_{33} &= C_{33kl}e'_{kl} \\
&= C_{3311}e'_{11} + C_{3322}e'_{22} + C_{3333}e'_{33} = C_{3311}e_{22} + C_{3322}e_{11} + C_{3333}e_{33} \\
&= C_{3322}e_{11} + C_{3311}e_{22} + C_{3333}e_{33} \\
&= \sigma_{33} \\
&= C_{3311}e_{11} + C_{3322}e_{22} + C_{3333}e_{33}
\end{aligned}
$$

これより、$C_{3322} = C_{3311}$

また、

$$\sigma'_{12} = C_{12kl}e'_{kl} = 2C_{1212}e'_{12}$$
$$= (-2C_{1212})e_{12}$$
$$= -\sigma_{21} = -\sigma_{12}$$
$$= -2C_{1212}e_{12}$$

また、

$$\sigma'_{13} = C_{13kl}e'_{kl} = 2C_{1313}e'_{13}$$
$$= 2C_{1313}e_{23}$$
$$= \sigma_{23}$$
$$= 2C_{2323}e_{23}$$

これより、$C_{1313} = C_{2323}$
また、

$$\sigma'_{23} = C_{23kl}e'_{kl} = 2C_{2323}e'_{23}$$
$$= -2C_{2323}e_{13}$$
$$== -\sigma_{13}$$
$$= -2C_{1313}e_{13}$$

これより、$C_{2323} = C_{1313}$である。

弾性定数に関する関係式は以下のようになる。

$$C_{1111} = C_{2222}\ , C_{1133} = C_{2233}\ , C_{1313} = C_{2323} \tag{29}$$

これより、独立な弾性定数は次式にて与えられる。

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & 0 & 0 & 0 \\ * & C_{1111} & C_{1133} & 0 & 0 & 0 \\ * & * & C_{3333} & 0 & 0 & 0 \\ * & * & * & C_{3131} & 0 & 0 \\ * & * & * & * & C_{3131} & 0 \\ * & * & * & * & * & C_{1212} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_{11} \\ e_{22} \\ e_{33} \\ 2e_{23} \\ 2e_{31} \\ 2e_{12} \end{pmatrix} \tag{30}$$

式(33)の条件は正方晶に対応するので、正方晶における独立な弾性定数は６個になり、正方晶の弾性率は式(31)にて与えられる。

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ * & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ * & * & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ * & * & * & C_{44} & 0 & 0 \\ * & * & * & * & C_{44} & 0 \\ * & * & * & * & * & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_{11} \\ e_{22} \\ e_{33} \\ 2e_{23} \\ 2e_{31} \\ 2e_{12} \end{pmatrix} \tag{31}$$

4-2 $x_1 = x_1^{'}, x_2 = x_3^{'}, x_3 = -x_2^{'}$における独立な弾性定数の決定

この条件は、4-1 節において、$3 \to 1, 2 \to 3, 1 \to 2$とした場合に等しい。したがって、式(29)において、添え字を$3 \to 1, 2 \to 3, 1 \to 2$のように変換すればよい。すなわち

$$C_{2222} = C_{3333}, C_{2211} = C_{3311}, C_{2121} = C_{3131} \tag{32}$$

これより、独立な弾性定数は、次式にて与えられる。

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ * & C_{2222} & C_{2233} & 0 & 0 & 0 \\ * & * & C_{2222} & 0 & 0 & 0 \\ * & * & * & C_{2323} & 0 & 0 \\ * & * & * & * & C_{3131} & 0 \\ * & * & * & * & * & C_{3131} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_{11} \\ e_{22} \\ e_{33} \\ 2e_{23} \\ 2e_{31} \\ 2e_{12} \end{pmatrix} \tag{33}$$

4-3 $x_1 = -x_3^{'}, x_2 = x_2^{'}, x_3 = x_1^{'}$における独立な弾性定数の決定

この条件は、4-1 節において、$3 \to 2, 2 \to 1, 1 \to 3$とした場合に等しい。したがって、式(29)において、添え字を$3 \to 2, 2 \to 1, 1 \to 3$のように変換すればよい。すなわち

$$C_{3333} = C_{1111}, C_{3322} = C_{1122}, C_{3232} = C_{1212} \tag{34}$$

これより、独立な弾性定数は、次式にて与えられる。

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & 0 & 0 & 0 \\ * & C_{2222} & C_{1122} & 0 & 0 & 0 \\ * & * & C_{1111} & 0 & 0 & 0 \\ * & * & * & C_{2323} & 0 & 0 \\ * & * & * & * & C_{3131} & 0 \\ * & * & * & * & * & C_{2323} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_{11} \\ e_{22} \\ e_{33} \\ 2e_{23} \\ 2e_{31} \\ 2e_{12} \end{pmatrix} \tag{35}$$

以上より、立方晶の弾性定数は次式にて与えられる。

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ * & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ * & * & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ * & * & * & C_{44} & 0 & 0 \\ * & * & * & * & C_{44} & 0 \\ * & * & * & * & * & C_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_{11} \\ e_{22} \\ e_{33} \\ 2e_{23} \\ 2e_{31} \\ 2e_{12} \end{pmatrix} \tag{36}$$

５．正方晶の弾性定数

式(31)(33)(35)より、正方晶軸（回転軸）によって、弾性定数は以下の３種類が存在する。

・正方晶軸 x_3 方向

$$\begin{pmatrix}\sigma_{11}\\ \sigma_{22}\\ \sigma_{33}\\ \sigma_{23}\\ \sigma_{31}\\ \sigma_{12}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0\\ * & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0\\ * & * & C_{33} & 0 & 0 & 0\\ * & * & * & C_{44} & 0 & 0\\ * & * & * & * & C_{44} & 0\\ * & * & * & * & * & C_{66}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e_{11}\\ e_{22}\\ e_{33}\\ 2e_{23}\\ 2e_{31}\\ 2e_{12}\end{pmatrix} \tag{37}$$

・正方晶軸 x_1 方向

$$\begin{pmatrix}\sigma_{11}\\ \sigma_{22}\\ \sigma_{33}\\ \sigma_{23}\\ \sigma_{31}\\ \sigma_{12}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0\\ * & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0\\ * & * & C_{22} & 0 & 0 & 0\\ * & * & * & C_{44} & 0 & 0\\ * & * & * & * & C_{55} & 0\\ * & * & * & * & * & C_{55}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e_{11}\\ e_{22}\\ e_{33}\\ 2e_{23}\\ 2e_{31}\\ 2e_{12}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}C_{33} & C_{13} & C_{13} & 0 & 0 & 0\\ * & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0\\ * & * & C_{11} & 0 & 0 & 0\\ * & * & * & C_{66} & 0 & 0\\ * & * & * & * & C_{44} & 0\\ * & * & * & * & * & C_{44}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e_{11}\\ e_{22}\\ e_{33}\\ 2e_{23}\\ 2e_{31}\\ 2e_{12}\end{pmatrix} \tag{38}$$

・正方晶軸 x_2 方向

$$\begin{pmatrix}\sigma_{11}\\ \sigma_{22}\\ \sigma_{33}\\ \sigma_{23}\\ \sigma_{31}\\ \sigma_{12}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0\\ * & C_{22} & C_{12} & 0 & 0 & 0\\ * & * & C_{11} & 0 & 0 & 0\\ * & * & * & C_{66} & 0 & 0\\ * & * & * & * & C_{55} & 0\\ * & * & * & * & * & C_{66}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e_{11}\\ e_{22}\\ e_{33}\\ 2e_{23}\\ 2e_{31}\\ 2e_{12}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}C_{11} & C_{13} & C_{12} & 0 & 0 & 0\\ * & C_{33} & C_{13} & 0 & 0 & 0\\ * & * & C_{11} & 0 & 0 & 0\\ * & * & * & C_{44} & 0 & 0\\ * & * & * & * & C_{66} & 0\\ * & * & * & * & * & C_{44}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}e_{11}\\ e_{22}\\ e_{33}\\ 2e_{23}\\ 2e_{31}\\ 2e_{12}\end{pmatrix} \tag{39}$$

６．六方晶の弾性定数

xy 平面上における６０°回転における独立な弾性定数の決定

まず、方向余弦 l_{ij} は次式にて与えられる。

$$\begin{aligned}\begin{pmatrix}l_{11} & l_{12} & l_{13}\\ l_{21} & l_{22} & l_{23}\\ l_{31} & l_{32} & l_{33}\end{pmatrix}&=\begin{pmatrix}\cos(\theta_{11}) & \cos(\theta_{12}) & \cos(\theta_{13})\\ \cos(\theta_{21}) & \cos(\theta_{22}) & \cos(\theta_{23})\\ \cos(\theta_{31}) & \cos(\theta_{32}) & \cos(\theta_{33})\end{pmatrix}\\ &=\begin{pmatrix}\cos(60) & \cos(30) & \cos(90)\\ \cos(150) & \cos(60) & \cos(90)\\ \cos(90) & \cos(90) & \cos(0)\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1/2 & \sqrt{3}/2 & 0\\ -\sqrt{3}/2 & 1/2 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{40}$$

これより、歪および応力成分の座標変換公式(8)(9)を用いることによって、以下の関係式を得る。

$$
\begin{aligned}
&\sigma'_{11} = l_{1k}l_{1l}\sigma_{kl} = l_{11}l_{11}\sigma_{11} + l_{11}l_{12}\sigma_{12} + l_{12}l_{11}\sigma_{21} + l_{12}l_{12}\sigma_{22} = \frac{1}{4}\sigma_{11} + \frac{\sqrt{3}}{4}\sigma_{12} + \frac{\sqrt{3}}{4}\sigma_{21} + \frac{3}{4}\sigma_{22} \\
&\sigma'_{22} = l_{2k}l_{2l}\sigma_{kl} = l_{21}l_{21}\sigma_{11} + l_{21}l_{22}\sigma_{12} + l_{22}l_{21}\sigma_{21} + l_{22}l_{22}\sigma_{22} = \frac{3}{4}\sigma_{11} - \frac{\sqrt{3}}{4}\sigma_{12} - \frac{\sqrt{3}}{4}\sigma_{21} + \frac{1}{4}\sigma_{22} \\
&\sigma'_{33} = l_{3k}l_{3l}\sigma_{kl} = l_{33}l_{33}\sigma_{33} = \sigma_{33} \\
&\sigma'_{23} = l_{2k}l_{3l}\sigma_{kl} = l_{21}l_{33}\sigma_{13} + l_{22}l_{33}\sigma_{23} = -\frac{\sqrt{3}}{2}\sigma_{13} + \frac{1}{2}\sigma_{23} \\
&\sigma'_{13} = l_{1k}l_{3l}\sigma_{kl} = l_{11}l_{33}\sigma_{13} + l_{12}l_{33}\sigma_{23} = \frac{1}{2}\sigma_{13} + \frac{\sqrt{3}}{2}\sigma_{23} \\
&\sigma'_{12} = l_{1k}l_{2l}\sigma_{kl} = l_{11}l_{21}\sigma_{11} + l_{11}l_{22}\sigma_{12} + l_{12}l_{21}\sigma_{21} + l_{12}l_{22}\sigma_{22} = -\frac{\sqrt{3}}{4}\sigma_{11} + \frac{1}{4}\sigma_{12} - \frac{3}{4}\sigma_{21} + \frac{\sqrt{3}}{4}\sigma_{22}
\end{aligned} \tag{41}
$$

$$
\begin{aligned}
&e'_{11} = l_{1k}l_{1l}e_{kl} = l_{11}l_{11}e_{11} + l_{11}l_{12}e_{12} + l_{12}l_{11}e_{21} + l_{12}l_{12}e_{22} = \frac{1}{4}e_{11} + \frac{\sqrt{3}}{4}e_{12} + \frac{\sqrt{3}}{4}e_{21} + \frac{3}{4}e_{22} \\
&e'_{22} = l_{2k}l_{2l}e_{kl} = l_{21}l_{21}e_{11} + l_{21}l_{22}e_{12} + l_{22}l_{21}e_{21} + l_{22}l_{22}e_{22} = \frac{3}{4}e_{11} - \frac{\sqrt{3}}{4}e_{12} - \frac{\sqrt{3}}{4}e_{21} + \frac{1}{4}e_{22} \\
&e'_{33} = l_{3k}l_{3l}e_{kl} = l_{33}l_{33}e_{33} = e_{33} \\
&e'_{23} = l_{2k}l_{3l}e_{kl} = l_{21}l_{33}e_{13} + l_{22}l_{33}e_{23} = -\frac{\sqrt{3}}{2}e_{13} + \frac{1}{2}e_{23} \\
&e'_{13} = l_{1k}l_{3l}e_{kl} = l_{11}l_{33}e_{13} + l_{12}l_{33}e_{23} = \frac{1}{2}e_{13} + \frac{\sqrt{3}}{2}e_{23} \\
&e'_{12} = l_{1k}l_{2l}e_{kl} = l_{11}l_{21}e_{11} + l_{11}l_{22}e_{12} + l_{12}l_{21}e_{21} + l_{12}l_{22}e_{22} = -\frac{\sqrt{3}}{4}e_{11} + \frac{1}{4}e_{12} - \frac{3}{4}e_{21} + \frac{\sqrt{3}}{4}e_{22}
\end{aligned} \tag{42}
$$

新座標系においても、フックの法則は成立するので、$\sigma'_{ij} = C_{ijkl}e'_{kl}$ に式(41)と(42)を代入することにより、次式を得る。なお斜方晶において既に０となっている弾性定数成分は０とおいた。

$$
\begin{aligned}
&\sigma'_{11} = C_{11kl}e'_{kl} \\
&= C_{1111}e'_{11} + C_{1122}e'_{22} + C_{1133}e'_{33} \\
&= C_{1111}\left[\frac{1}{4}e_{11} + \frac{\sqrt{3}}{4}e_{12} + \frac{\sqrt{3}}{4}e_{21} + \frac{3}{4}e_{22}\right] + C_{1122}\left[\frac{3}{4}e_{11} - \frac{\sqrt{3}}{4}e_{12} - \frac{\sqrt{3}}{4}e_{21} + \frac{1}{4}e_{22}\right] + C_{1133}e_{33} \\
&= \frac{1}{4}(C_{1111} + 3C_{1122})e_{11} + \frac{\sqrt{3}}{2}(C_{1111} - C_{1122})e_{12} + \frac{1}{4}(3C_{1111} + C_{1122})e_{22} + C_{1133}e_{33} \\
&= \frac{1}{4}\sigma_{11} + \frac{\sqrt{3}}{2}\sigma_{12} + \frac{3}{4}\sigma_{22} \\
&= \frac{1}{4}(C_{1111}e_{11} + C_{1122}e_{22} + C_{1133}e_{33}) + \frac{\sqrt{3}}{2}(C_{1212}e_{12} + C_{1221}e_{21}) + \frac{3}{4}(C_{2211}e_{11} + C_{2222}e_{22} + C_{2233}e_{33}) \\
&= \frac{1}{4}(C_{1111} + 3C_{1122})e_{11} + \sqrt{3}C_{1212}e_{12} + \frac{1}{4}(C_{1122} + 3C_{2222})e_{22} + \frac{1}{4}(C_{1133} + 3C_{2233})e_{33}
\end{aligned}
$$

これより、$C_{1111} = C_{2222}$, $C_{1133} = C_{2233}$, $C_{1111} - C_{1122} = 2C_{1212}$

また、

$$\sigma'_{12} = C_{12kl}e'_{kl} = 2C_{1212}e'_{12}$$
$$= -\frac{\sqrt{3}}{2}C_{1212}e_{11} - C_{1212}e_{21} + \frac{\sqrt{3}}{2}C_{1212}e_{22}$$
$$= -\frac{\sqrt{3}}{4}\sigma_{11} - \frac{1}{2}\sigma_{21} + \frac{\sqrt{3}}{4}\sigma_{22}$$
$$= -\frac{\sqrt{3}}{4}\left(C_{1111}e_{11} + C_{1122}e_{22} + C_{1133}e_{33}\right) - \frac{1}{2}\left(C_{1212}e_{12} + C_{1221}e_{21}\right) + \frac{\sqrt{3}}{4}\left(C_{2211}e_{11} + C_{2222}e_{22} + C_{2233}e_{33}\right)$$
$$= -\frac{\sqrt{3}}{4}\left(C_{1111} - C_{2211}\right)e_{11} - C_{1212}e_{12} + \frac{\sqrt{3}}{4}\left(-C_{1122} + C_{2222}\right)e_{22} + \frac{\sqrt{3}}{4}\left(C_{2233} - C_{1133}\right)e_{33}$$

これより、 $C_{1111} - C_{1122} = 2C_{1212}$, $C_{2222} - C_{1122} = 2C_{1212}$, $C_{2233} = C_{1133}$

また、

$$\sigma'_{13} = C_{13kl}e'_{kl} = 2C_{1313}e'_{13}$$
$$= C_{1313}e_{13} + \sqrt{3}C_{1313}e_{23}$$
$$= \frac{1}{2}\sigma_{13} + \frac{\sqrt{3}}{2}\sigma_{23}$$
$$= C_{1313}e_{13} + \sqrt{3}C_{2323}e_{23}$$

これより、 $C_{1313} = C_{2323}$

以上より、弾性定数に関する関係式は以下のようになる。

$$C_{1111} = C_{2222}\ , C_{2233} = C_{1133}\ , C_{1313} = C_{2323}\ , C_{1111} - C_{1122} = 2C_{1212} \tag{43}$$

したがって、独立な弾性定数は次式にて与えられる。

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & 0 & 0 & 0 \\ * & C_{1111} & C_{1133} & 0 & 0 & 0 \\ * & * & C_{3333} & 0 & 0 & 0 \\ * & * & * & C_{3131} & 0 & 0 \\ * & * & * & * & C_{3131} & 0 \\ * & * & * & * & * & \dfrac{C_{1111} - C_{1122}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_{11} \\ e_{22} \\ e_{33} \\ 2e_{23} \\ 2e_{31} \\ 2e_{12} \end{pmatrix} \tag{44}$$

これより、六方晶における独立な弾性定数は５個になり、六方晶の弾性率は最終的に式(45)にて与えられる。

$$
\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ * & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ * & * & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ * & * & * & C_{44} & 0 & 0 \\ * & * & * & * & C_{44} & 0 \\ * & * & * & * & * & \dfrac{C_{11}-C_{12}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_{11} \\ e_{22} \\ e_{33} \\ 2e_{23} \\ 2e_{31} \\ 2e_{12} \end{pmatrix} \tag{45}
$$