斜方晶の弾性相互作用エネルギーの理論式（逆空間計算）

by ***T.Koyama***

１．弾性理論の基本式および変数の定義

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。

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

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。

拘束歪を次式にて定義する。

$$e_{kl}^{c} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right) \tag{4}$$

ここで、u_{i}は変位場を表す。

また、物体の正味の変形に伴う力学的エネルギーは次式にて与えられる。（なお、これは通常、相分解にて発生する弾性歪エネルギーではなく、実質的に拘束歪分だけ弾性変形した場合の力学的エネルギーであるので注意が必要である。）

$$E_{str} = \frac{1}{2} C_{ijkl} e_{ij}^{c} e_{kl}^{c} \tag{5}$$

独立な弾性定数は、21 個であるので、弾性定数で式(5)を整理すると、右辺には 21 項現れることになる。しかし、実際の合金の相分解において、基本単位胞が斜方晶よりも複雑になることは希であるので、ここでは、斜方晶の弾性定数をもちいて、式(5)を書き下す。

まず、斜方晶の弾性定数は次式にて与えられる。

$$\begin{Bmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{Bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1111} & C_{1122} & C_{1133} & 0 & 0 & 0 \\ * & C_{2222} & C_{2233} & 0 & 0 & 0 \\ * & * & C_{3333} & 0 & 0 & 0 \\ * & * & * & C_{2323} & 0 & 0 \\ * & * & * & * & C_{3131} & 0 \\ * & * & * & * & * & C_{1212} \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} e_{11} \\ e_{22} \\ e_{33} \\ e_{23} \\ e_{31} \\ e_{12} \end{Bmatrix} \tag{6}$$

これより、斜方晶における変形にともなう力学的エネルギーは、式(7)にて与えられる。

$$
\begin{aligned}
E_{str} &= \frac{1}{2}C_{ijkl}e^c_{ij}e^c_{kl} \\
&= \frac{1}{2}(C_{1111}e^c_{11}e^c_{11} + C_{1122}e^c_{11}e^c_{22} + C_{1133}e^c_{11}e^c_{33} + C_{2211}e^c_{22}e^c_{11} + C_{2222}e^c_{22}e^c_{22} + C_{2233}e^c_{22}e^c_{33} \\
&+ C_{3311}e^c_{33}e^c_{11} + C_{3322}e^c_{33}e^c_{22} + C_{3333}e^c_{33}e^c_{33} + C_{1212}e^c_{12}e^c_{12} + C_{2121}e^c_{21}e^c_{21} + C_{1221}e^c_{12}e^c_{21} + C_{2112}e^c_{21}e^c_{12} \\
&+ C_{1313}e^c_{13}e^c_{13} + C_{3131}e^c_{31}e^c_{31} + C_{1331}e^c_{13}e^c_{31} + C_{3113}e^c_{31}e^c_{13} \\
&+ C_{2323}e^c_{23}e^c_{23} + C_{3232}e^c_{32}e^c_{32} + C_{2332}e^c_{23}e^c_{32} + C_{3223}e^c_{32}e^c_{23}) \\
&= \frac{1}{2}C_{1111}e^{c\ 2}_{11} + \frac{1}{2}C_{2222}e^{c\ 2}_{22} + \frac{1}{2}C_{3333}e^{c\ 2}_{33} + C_{1122}e^c_{11}e^c_{22} + C_{2233}e^c_{22}e^c_{33} + C_{3311}e^c_{33}e^c_{11} \\
&\quad + 2C_{1212}e^{c\ 2}_{12} + 2C_{2323}e^{c\ 2}_{23} + 2C_{3131}e^{c\ 2}_{31}
\end{aligned}
\tag{7}
$$

式(6)は簡易表記で、式(8)にて表されるので、

$$
\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{pmatrix}
=
\begin{pmatrix}
C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\
* & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\
* & * & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\
* & * & * & C_{44} & 0 & 0 \\
* & * & * & * & C_{55} & 0 \\
* & * & * & * & * & C_{66}
\end{pmatrix}
\begin{pmatrix} e_{11} \\ e_{22} \\ e_{33} \\ e_{23} \\ e_{31} \\ e_{12} \end{pmatrix}
\tag{8}
$$

式(7)は最終的に式(9)にて与えられる。

$$
\begin{aligned}
E_{str} &= \frac{1}{2}C_{11}e^{c\ 2}_{11} + \frac{1}{2}C_{22}e^{c\ 2}_{22} + \frac{1}{2}C_{33}e^{c\ 2}_{33} + C_{12}e^c_{11}e^c_{22} + C_{23}e^c_{22}e^c_{33} + C_{13}e^c_{33}e^c_{11} \\
&\quad + 2C_{44}e^{c\ 2}_{23} + 2C_{55}e^{c\ 2}_{31} + 2C_{66}e^{c\ 2}_{12}
\end{aligned}
\tag{9}
$$

2．濃度場と拘束歪場による弾性歪エネルギーの展開

濃度cと拘束歪e^c_{ij}をorder parameterとし、E_{str}を改めてこれらの変数にて展開する。

$$\begin{aligned}E_{str} &= g(c)+\alpha_{11}(c-c_0)e^c_{11}+\alpha_{22}(c-c_0)e^c_{22}+\alpha_{33}(c-c_0)e^c_{33} \\ &+\frac{1}{2}C_{11}{e^c_{11}}^2+\frac{1}{2}C_{22}{e^c_{22}}^2+\frac{1}{2}C_{33}{e^c_{33}}^2+C_{12}e^c_{11}e^c_{22}+C_{23}e^c_{22}e^c_{33}+C_{13}e^c_{33}e^c_{11} \\ &+2C_{44}{e^c_{23}}^2+2C_{55}{e^c_{31}}^2+2C_{66}{e^c_{12}}^2\end{aligned} \tag{1}$$

ここで$g(c)$は鏡像応力に起因する歪エネルギーである。また右辺第２項は濃度cと拘束歪e^c_{ij}の干渉項で、α_{ii}はカップリング定数である。

さて、カップリング定数α_{ii}を求めるために、完全緩和における歪場を想定する。すなわち、δ_{ij}をディラックのデルタ関数として、$e^c_{ij}=\varepsilon_{ij}\delta_{ij}$にて与えられる。これを式(1)に代入する。

$$\begin{aligned}E_{str} &= g(c)+\alpha_{11}(c-c_0)\varepsilon_{11}+\alpha_{22}(c-c_0)\varepsilon_{22}+\alpha_{33}(c-c_0)\varepsilon_{33} \\ &+\frac{1}{2}C_{11}\varepsilon^2_{11}+\frac{1}{2}C_{22}\varepsilon^2_{22}+\frac{1}{2}C_{33}\varepsilon^2_{33}+C_{12}\varepsilon_{11}\varepsilon_{22}+C_{23}\varepsilon_{22}\varepsilon_{33}+C_{13}\varepsilon_{11}\varepsilon_{33}\end{aligned} \tag{2}$$

ここで、歪場$e^c_{ij}=\varepsilon_{ij}\delta_{ij}$に対して$E_{str}$は瞬間的に極小値を取っていると仮定できるので（拡散の緩和時間に対して歪伝播の緩和時間は非常に短いと仮定できる。）、$\frac{\partial E_{str}}{\partial \varepsilon_{11}}=0,\quad \frac{\partial E_{str}}{\partial \varepsilon_{22}}=0,\quad \frac{\partial E_{str}}{\partial \varepsilon_{33}}=0$が成立する。したがって、

$$\begin{aligned}&\frac{\partial E_{str}}{\partial \varepsilon_{11}}=\alpha_{11}(c-c_0)+(C_{11}\varepsilon_{11}+C_{12}\varepsilon_{22}+C_{13}\varepsilon_{33})=0 \quad , \quad \alpha_{11}=-\frac{C_{11}\varepsilon_{11}+C_{12}\varepsilon_{22}+C_{13}\varepsilon_{33}}{c-c_0} \\ &\frac{\partial E_{str}}{\partial \varepsilon_{22}}=\alpha_{22}(c-c_0)+(C_{22}\varepsilon_{22}+C_{12}\varepsilon_{11}+C_{23}\varepsilon_{33})=0 \quad , \quad \alpha_{22}=-\frac{C_{22}\varepsilon_{22}+C_{12}\varepsilon_{11}+C_{23}\varepsilon_{33}}{c-c_0} \\ &\frac{\partial E_{str}}{\partial \varepsilon_{33}}=\alpha_{33}(c-c_0)+(C_{33}\varepsilon_{33}+C_{23}\varepsilon_{22}+C_{13}\varepsilon_{11})=0 \quad , \quad \alpha_{33}=-\frac{C_{33}\varepsilon_{33}+C_{23}\varepsilon_{22}+C_{13}\varepsilon_{11}}{c-c_0}\end{aligned} \tag{3}$$

さらに固有歪ε_{ij}は格子ミスマッチη_{ij}を用いて$\varepsilon_{ij}=\eta_{ij}(c-c_0)$と表わすことが出来る。（固溶体の格子定数はVegard則に従うとした。）したがって、αは最終的に次式にて与えられる。

$$\begin{aligned}\alpha_{11} &= -(C_{11}\eta_{11}+C_{12}\eta_{22}+C_{13}\eta_{33}) \\ \alpha_{22} &= -(C_{22}\eta_{22}+C_{12}\eta_{11}+C_{23}\eta_{33}) \\ \alpha_{33} &= -(C_{33}\eta_{33}+C_{23}\eta_{22}+C_{13}\eta_{11})\end{aligned} \tag{4}$$

さて、このα_{ii}、および$\varepsilon_{ij}=\eta_{ij}(c-c_0)$を式(2)に代入する。

$$
\begin{aligned}
E_{str} &= g(c) - (C_{11}\eta_{11} + C_{12}\eta_{22} + C_{13}\eta_{33})\eta_{11}(c-c_0)^2 \\
&\quad - (C_{22}\eta_{22} + C_{12}\eta_{11} + C_{23}\eta_{33})\eta_{22}(c-c_0)^2 \\
&\quad - (C_{33}\eta_{33} + C_{23}\eta_{22} + C_{13}\eta_{11})\eta_{33}(c-c_0)^2 \\
&\quad + \left[\frac{1}{2}C_{11}\eta_{11}^2 + \frac{1}{2}C_{22}\eta_{22}^2 + \frac{1}{2}C_{33}\eta_{33}^2 + C_{12}\eta_{11}\eta_{22} + C_{23}\eta_{22}\eta_{33} + C_{13}\eta_{11}\eta_{33}\right](c-c_0)^2 \\
&= g(c) \\
&\quad + \left\{\begin{array}{l}
-(C_{11}\eta_{11} + C_{12}\eta_{22} + C_{13}\eta_{33})\eta_{11} \\
-(C_{22}\eta_{22} + C_{12}\eta_{11} + C_{23}\eta_{33})\eta_{22} \\
-(C_{33}\eta_{33} + C_{23}\eta_{22} + C_{13}\eta_{11})\eta_{33} \\
\qquad + \left[\frac{1}{2}C_{11}\eta_{11}^2 + \frac{1}{2}C_{22}\eta_{22}^2 + \frac{1}{2}C_{33}\eta_{33}^2 + C_{12}\eta_{11}\eta_{22} + C_{23}\eta_{22}\eta_{33} + C_{13}\eta_{11}\eta_{33}\right]
\end{array}\right\}(c-c_0)^2 \\
&= g(c) - \left\{\frac{1}{2}C_{11}\eta_{11}^2 + \frac{1}{2}C_{22}\eta_{22}^2 + \frac{1}{2}C_{33}\eta_{33}^2 + C_{12}\eta_{11}\eta_{22} + C_{23}\eta_{22}\eta_{33} + C_{13}\eta_{11}\eta_{33}\right\}(c-c_0)^2
\end{aligned}
\tag{5}
$$

ところで、いま考えている歪場は完全緩和であるので、析出相に貯えられている弾性歪エネルギーは結局０にならなくてななららない。したがって $g(c)$ は次式にて与えられる。

$$
g(c) = \left\{\frac{1}{2}C_{11}\eta_{11}^2 + \frac{1}{2}C_{22}\eta_{22}^2 + \frac{1}{2}C_{33}\eta_{33}^2 + C_{12}\eta_{11}\eta_{22} + C_{23}\eta_{22}\eta_{33} + C_{13}\eta_{11}\eta_{33}\right\}(c-c_0)^2 \tag{6}
$$

式(4),(6)を式(1)式に代入することによって最終的に弾性歪エネルギーは次式にて与えられる。

$$
\begin{aligned}
E_{str} &= \frac{1}{2}\left\{C_{11}\eta_{11}^2 + C_{22}\eta_{22}^2 + C_{33}\eta_{33}^2 + 2C_{12}\eta_{11}\eta_{22} + 2C_{23}\eta_{22}\eta_{33} + 2C_{13}\eta_{11}\eta_{33}\right\}(c-c_0)^2 \\
&\quad - \left\{(C_{11}\eta_{11} + C_{12}\eta_{22} + C_{13}\eta_{33})e_{11}^c + (C_{22}\eta_{22} + C_{12}\eta_{11} + C_{23}\eta_{33})e_{22}^c + (C_{33}\eta_{33} + C_{23}\eta_{22} + C_{13}\eta_{11})e_{33}^c\right\}(c-c_0) \\
&\quad + \frac{1}{2}C_{11}{e_{11}^c}^2 + \frac{1}{2}C_{22}{e_{22}^c}^2 + \frac{1}{2}C_{33}{e_{33}^c}^2 + C_{12}e_{11}^c e_{22}^c + C_{23}e_{22}^c e_{33}^c + C_{13}e_{33}^c e_{11}^c + 2C_{44}{e_{23}^c}^2 + 2C_{55}{e_{31}^c}^2 + 2C_{66}{e_{12}^c}^2
\end{aligned}
\tag{7}
$$

なお、式(7)を $ijkl$ を用いてまとめて書くと次式にて表現される。

$$
E_{str} = \frac{1}{2}C_{ijkl}\eta_{ij}\eta_{kl}(c-c_0)^2 - C_{ijkl}e_{ij}^c\eta_{kl}(c-c_0) + \frac{1}{2}C_{ijkl}e_{ij}^c e_{kl}^c \tag{8}
$$

特に弾性率が定数である場合、平衡方程式から、$\frac{1}{2}\int C_{ijkl}e_{ij}^c\eta_{kl}(c-c_0)d\mathbf{r} = \frac{1}{2}\int C_{ijkl}e_{ij}^c e_{kl}^c d\mathbf{r}$ が導かれるので、式(8)より弾性歪エネルギーの系全体における積分は、式(9)にて与えられる。

$$
\begin{aligned}
E_{str} &= \int \left\{ \frac{1}{2} C_{ijkl}\eta_{ij}\eta_{kl}(c-c_0)^2 - C_{ijkl}e_{ij}^c\eta_{kl}(c-c_0) + \frac{1}{2} C_{ijkl}e_{ij}^c e_{kl}^c \right\} d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2}\int \left[C_{ijkl}\eta_{ij}\eta_{kl}(c-c_0)^2 - C_{ijkl}e_{ij}^c\eta_{kl}(c-c_0) \right] d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2} C_{ijkl}\eta_{ij}\eta_{kl}\int (c-c_0)^2 d\mathbf{r} - \frac{1}{2} C_{ijkl}\eta_{kl}\int e_{ij}^c (c-c_0) d\mathbf{r}
\end{aligned}
\tag{9}
$$

次に濃度変動場をフーリエ級数展開にて、式(10)にて定義する。

$$
c(\mathbf{r}) - c_0 = \sum_{\mathbf{h}} Q(\mathbf{h}) \exp(i\mathbf{h}\beta\mathbf{r}) \tag{10}
$$

また、拘束歪は、次式にて与えられる。（「材料組織弾性学の基礎と応用」を参照）

$$
e_{ij}^c(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{h}} C_{pqmn}\{n_i n_q \boldsymbol{\Omega}_{pj}(\mathbf{n}) + n_j n_q \boldsymbol{\Omega}_{pi}(\mathbf{n})\}\eta_{mn} Q(\mathbf{h}) \exp(i\mathbf{h}\beta\mathbf{r}) \tag{11}
$$

$$
\boldsymbol{\Omega}_{pl}^{-1}(\mathbf{n}) \equiv C_{pqkl} n_q n_k \tag{12}
$$

式(10)より関係式として

$$
\begin{aligned}
&\int (c-c_0)^2 d\mathbf{r} \\
&= \int_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{h}} \sum_{\mathbf{h}'} Q(\mathbf{h}) Q(\mathbf{h}') \exp\{i(\mathbf{h}+\mathbf{h}')\beta\mathbf{r}\} d\mathbf{r} \\
&= \sum_{\mathbf{h}} \sum_{\mathbf{h}'} Q(\mathbf{h}) Q(\mathbf{h}') \int_{\mathbf{r}} \exp\{i(\mathbf{h}+\mathbf{h}')\beta\mathbf{r}\} d\mathbf{r} \\
&= \sum_{\mathbf{h}} Q(\mathbf{h}) Q(-\mathbf{h})
\end{aligned}
\tag{13}
$$

また、

$$
\begin{aligned}
&\int e_{ii}^c (c-c_0) d\mathbf{r} \\
&= \int_{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{h}} \sum_{\mathbf{h}'} C_{pqmn} n_j n_q \boldsymbol{\Omega}_{pj}(\mathbf{n}) \eta_{mn} Q(\mathbf{h}) Q(\mathbf{h}') \exp\{i(\mathbf{h}+\mathbf{h}')\beta\mathbf{r}\} d\mathbf{r} \\
&= \sum_{\mathbf{h}} C_{pqmn} n_j n_q \boldsymbol{\Omega}_{pj}(\mathbf{n}) \eta_{mn} Q(\mathbf{h}) Q(-\mathbf{h}) \\
&= C_{pqmn}\eta_{mn} \sum_{\mathbf{h}} n_j n_q \boldsymbol{\Omega}_{pj}(\mathbf{n}) Q(\mathbf{h}) Q(-\mathbf{h})
\end{aligned}
\tag{14}
$$

が得られる。固有歪場として、Pure dilatationを仮定し、式(13),(14)を式(9)に代入する。

$$
\begin{aligned}
E_{str} &= \frac{1}{2} C_{ijkl}\eta_{ij}\eta_{kl} \int (c-c_0)^2 d\mathbf{r} - \frac{1}{2} C_{ijkl}\eta_{kl} \int e_{ij}^{c}(c-c_0) d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2} C_{jjkk}\eta_{jj}\eta_{kk} \int (c-c_0)^2 d\mathbf{r} - \frac{1}{2} C_{jjkk}\eta_{kk} \int e_{jj}^{c}(c-c_0) d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{h}} C_{jjkk}\eta_{jj}\eta_{kk} Q(\mathbf{h})Q(-\mathbf{h}) - \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{h}} C_{jjkk}\eta_{kk} C_{ppmm}\eta_{mm} n_j n_p \mathbf{\Omega}_{pj}(\mathbf{n}) Q(\mathbf{h})Q(-\mathbf{h}) \\
&= \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{h}} \left\{ C_{jjkk}\eta_{jj}\eta_{kk} - C_{jjkk}\eta_{kk} C_{ppmm}\eta_{mm} n_j n_p \mathbf{\Omega}_{pj}(\mathbf{n}) \right\} Q(\mathbf{h})Q(-\mathbf{h}) \\
&= \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{h}} B(\mathbf{n}) Q(\mathbf{h})Q(-\mathbf{h})
\end{aligned}
\tag{15}
$$

$$
\begin{aligned}
B(\mathbf{n}) &= C_{jjkk}\eta_{jj}\eta_{kk} - C_{jjkk}\eta_{kk} C_{ppmm}\eta_{mm} n_j n_p \mathbf{\Omega}_{pj}(\mathbf{n}) \\
&= C_{jjkk}\eta_{jj}\eta_{kk} - C_{jjkk}\eta_{kk} n_p \mathbf{\Omega}_{pj}(\mathbf{n}) n_j \eta_{mm} C_{ppmm} \\
&= C_{jk}\eta_{jj}\eta_{kk} - C_{jk}\eta_{kk} n_p \mathbf{\Omega}_{pj}(\mathbf{n}) n_j \eta_{mm} C_{pm}
\end{aligned}
\tag{16}
$$

ここで、

$$
C_{jk}\eta_{jj}\eta_{kk} = C_{11}\eta_{11}^2 + C_{22}\eta_{22}^2 + C_{33}\eta_{33}^2 + 2C_{12}\eta_{11}\eta_{22} + 2C_{13}\eta_{11}\eta_{33} + 2C_{23}\eta_{22}\eta_{33}
\tag{17}
$$

である。また、

$$
G_{pj}(\mathbf{n}) = n_p n_j \mathbf{\Omega}_{pj}(\mathbf{n})
\tag{18}
$$

とおくと、

$$
\begin{aligned}
[C_{1k}C_{1m}\eta_{kk}\eta_{mm}]G_{11}(\mathbf{n}) &= \left\{ \begin{array}{l} C_{11}C_{11}\eta_{11}\eta_{11} + C_{12}C_{12}\eta_{22}\eta_{22} + C_{13}C_{13}\eta_{33}\eta_{33} \\ +2C_{11}C_{12}\eta_{11}\eta_{22} + 2C_{12}C_{13}\eta_{22}\eta_{33} + 2C_{13}C_{11}\eta_{33}\eta_{11} \end{array} \right\} G_{11}(\mathbf{n}) \\
[C_{2k}C_{2m}\eta_{kk}\eta_{mm}]G_{22}(\mathbf{n}) &= \left\{ \begin{array}{l} C_{21}C_{21}\eta_{11}\eta_{11} + C_{22}C_{22}\eta_{22}\eta_{22} + C_{23}C_{23}\eta_{33}\eta_{33} \\ +2C_{21}C_{22}\eta_{11}\eta_{22} + 2C_{22}C_{23}\eta_{22}\eta_{33} + 2C_{23}C_{21}\eta_{33}\eta_{11} \end{array} \right\} G_{22}(\mathbf{n}) \\
[C_{3k}C_{3m}\eta_{kk}\eta_{mm}]G_{33}(\mathbf{n}) &= \left\{ \begin{array}{l} C_{31}C_{31}\eta_{11}\eta_{11} + C_{32}C_{32}\eta_{22}\eta_{22} + C_{33}C_{33}\eta_{33}\eta_{33} \\ +2C_{31}C_{32}\eta_{11}\eta_{22} + 2C_{32}C_{33}\eta_{22}\eta_{33} + 2C_{33}C_{31}\eta_{33}\eta_{11} \end{array} \right\} G_{33}(\mathbf{n}) \\
2[C_{1k}C_{2m}\eta_{kk}\eta_{mm}]G_{21}(\mathbf{n}) &= 2\left\{ \begin{array}{l} C_{11}C_{21}\eta_{11}\eta_{11} + C_{12}C_{22}\eta_{22}\eta_{22} + C_{13}C_{23}\eta_{33}\eta_{33} \\ +2C_{11}C_{22}\eta_{11}\eta_{22} + 2C_{12}C_{23}\eta_{22}\eta_{33} + 2C_{13}C_{21}\eta_{33}\eta_{11} \end{array} \right\} G_{21}(\mathbf{n}) \\
2[C_{2k}C_{3m}\eta_{kk}\eta_{mm}]G_{32}(\mathbf{n}) &= 2\left\{ \begin{array}{l} C_{21}C_{31}\eta_{11}\eta_{11} + C_{22}C_{32}\eta_{22}\eta_{22} + C_{23}C_{33}\eta_{33}\eta_{33} \\ +2C_{21}C_{32}\eta_{11}\eta_{22} + 2C_{22}C_{33}\eta_{22}\eta_{33} + 2C_{23}C_{31}\eta_{33}\eta_{11} \end{array} \right\} G_{32}(\mathbf{n}) \\
2[C_{3k}C_{1m}\eta_{kk}\eta_{mm}]G_{13}(\mathbf{n}) &= 2\left\{ \begin{array}{l} C_{31}C_{11}\eta_{11}\eta_{11} + C_{32}C_{12}\eta_{22}\eta_{22} + C_{33}C_{13}\eta_{33}\eta_{33} \\ +2C_{31}C_{12}\eta_{11}\eta_{22} + 2C_{32}C_{13}\eta_{22}\eta_{33} + 2C_{33}C_{11}\eta_{33}\eta_{11} \end{array} \right\} G_{13}(\mathbf{n})
\end{aligned}
\tag{19}
$$

であり、

$$
\begin{aligned}
&C_{jk}\eta_{kk}C_{pm}\eta_{mm}G_{pj}(\mathbf{n}) \\
&= C_{1k}C_{1m}\eta_{kk}\eta_{mm}G_{11}(\mathbf{n}) + C_{2k}C_{2m}\eta_{kk}\eta_{mm}G_{22}(\mathbf{n}) + C_{3k}C_{3m}\eta_{kk}\eta_{mm}G_{33}(\mathbf{n}) \\
&\quad + 2[C_{1k}C_{2m}\eta_{kk}\eta_{mm}G_{21}(\mathbf{n}) + C_{2k}C_{3m}\eta_{kk}\eta_{mm}G_{32}(\mathbf{n}) + C_{3k}C_{1m}\eta_{kk}\eta_{mm}G_{13}(\mathbf{n})]
\end{aligned}
\tag{20}
$$

にて計算できる。さらに、式(12)より $\omega_{pl}^{-1}(n) \equiv C_{pqkl}n_q n_k$ であるから、

$$
\begin{aligned}
\Omega_{11}^{-1}(\mathbf{n}) &= C_{1qi1}n_q n_i = C_{1111}n_1 n_1 + C_{1221}n_2 n_2 + C_{1331}n_3 n_3 = C_{11}n_1^2 + C_{66}n_2^2 + C_{55}n_3^2 \\
\Omega_{22}^{-1}(\mathbf{n}) &= C_{2qi2}n_q n_i = C_{2112}n_1 n_1 + C_{2222}n_2 n_2 + C_{2332}n_3 n_3 = C_{66}n_1^2 + C_{22}n_2^2 + C_{44}n_3^2 \\
\Omega_{33}^{-1}(\mathbf{n}) &= C_{3qi3}n_q n_i = C_{3113}n_1 n_1 + C_{3223}n_2 n_2 + C_{3333}n_3 n_3 = C_{55}n_1^2 + C_{44}n_2^2 + C_{33}n_3^2 \\
\Omega_{12}^{-1}(\mathbf{n}) &= C_{1qi2}n_q n_i = C_{1122}n_1 n_2 + C_{1212}n_2 n_1 = (C_{12} + C_{66})n_1 n_2 = \Omega_{21}^{-1}(\mathbf{n}) \\
\Omega_{23}^{-1}(\mathbf{n}) &= C_{2qi3}n_q n_i = C_{2233}n_2 n_3 + C_{2323}n_3 n_2 = (C_{23} + C_{44})n_2 n_3 = \Omega_{32}^{-1}(\mathbf{n}) \\
\Omega_{31}^{-1}(\mathbf{n}) &= C_{3qi1}n_q n_i = C_{3311}n_3 n_1 + C_{3131}n_1 n_3 = (C_{13} + C_{55})n_1 n_3 = \Omega_{13}^{-1}(\mathbf{n})
\end{aligned}
\tag{21}
$$

これより、$\Omega_{pj}(\mathbf{n})$ は式(21)の逆行列として計算される。なお、$\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ と $(\theta, \varphi, \theta_r, \varphi_r)$ の関係は以下のように与えられる。

$$
\begin{gathered}
\begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi \\ \sin\theta\sin\varphi \\ \cos\theta \end{pmatrix} \\
\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta_r\cos\varphi_r & -\sin\varphi_r & \sin\theta_r\cos\varphi_r \\ \cos\theta_r\sin\varphi_r & \cos\varphi_r & \sin\theta_r\sin\varphi_r \\ -\sin\theta_r & 0 & \cos\theta_r \end{pmatrix}
\end{gathered}
\tag{22}
$$

次に析出粒子の形状関数を導出する。形状関数を $\theta(\mathbf{h})$ とする。以下、球状粒子，回転楕円体状粒子，および直方体状粒子の形状関数の導出法について説明する。まず形状関数 $\theta(\mathbf{h})$ の理論導出式は次式にて与えられる。

$$
\theta(\mathbf{h}) = \int_{\mathbf{r}} c(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{hr})d\mathbf{r}
\tag{23}
$$

$c(\mathbf{r}) = 1$ (位置ベクトル $\mathbf{r}$ が析出粒子内の場合)
$c(\mathbf{r}) = 0$ (位置ベクトル $\mathbf{r}$ が析出粒子外の場合)

1)球状粒子の形状関数の導出

球状粒子の半径を r_0 とする。また $\mathbf{h}$ 方向と z 軸方向を一致させる。つまり $\mathbf{h}\cdot\mathbf{r} = hr\cos(\theta)$ と書くことが出来る。したがって、式(23)より形状関数は以下のように計算される。

$$
\begin{aligned}
\theta(\mathbf{h}) &= \int_{\mathbf{r}} c(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{hr})d\mathbf{r} \\
&= \int_{|\mathbf{r}|<r_0} \exp\{ihr\cos(\theta)\}d\mathbf{r} \\
&= \int_0^{\pi}\int_0^{\pi}\int_{-r_0}^{r_0} \left[\cos\{hr\cos(\theta)\} + i\sin\{hr\cos(\theta)\}\right] r^2\sin(\theta)drd\theta d\varphi \\
&= \pi\int_0^{\pi}\int_{-r_0}^{r_0} \cos\{hr\cos(\theta)\}r^2\sin(\theta)drd\theta
\end{aligned}
\tag{24}
$$

ここで、 $h\cos(\theta) = t$ と置く。したがって、$-h\sin(\theta)d\theta = dt,\quad \sin(\theta)d\theta = -\frac{1}{h}dt$ である。これらを、式(24)に代入する。

$$
\begin{aligned}
\theta(\mathbf{h}) &= \frac{\pi}{h}\int_{-h}^{h}\int_{-r_0}^{r_0} r^2\cos(rt)drdt \\
&= \frac{2\pi}{h}\int_{-r_0}^{r_0} r\sin(rh)dr \\
&= \frac{4\pi}{h}\int_0^{r_0} r\sin(rh)dr \\
&= \frac{4\pi\left[\sin(r_0h) - r_0h\cos(r_0h)\right]}{h^3}
\end{aligned}
\tag{25}
$$

さらに、$V \equiv \frac{4}{3}\pi r_0^3$ と置くと、最終的に

$$
\theta(\mathbf{h}) = 3V\frac{\sin(r_0h) - r_0h\cos(r_0h)}{(r_0h)^3} \tag{26}
$$

2)回転楕円体状粒子の形状関数の導出

アスペクト比を p とする。また回転楕円体の回転軸を z 軸に取る。θ は $\mathbf{h}$ 方向と z 軸のなす角度である。また xy 面内の方位角を φ とし、 x 軸(y 軸)と回転楕円体との交点を $a, -a$ とする。ここで次の関数 $K(\theta, p)$ を定義する。

$$
K(\theta, p) = \sqrt{\sin^2(\theta) + p^2\cos^2(\theta)} \tag{27}
$$

また $K(\theta, p)$ を用いて、以下のように A, z_0 を定義する。

$$
\begin{aligned}
z_0 &\equiv aK(\theta, p) \\
A &\equiv \frac{\pi p(z_0^2 - z^2)}{K^3(\theta, p)}
\end{aligned}
\tag{28}
$$

$\mathbf{h}$ 方向上,原点より z の点を通り $\mathbf{h}$ に垂直な平面と、楕円体の交線は楕円となる。式(28)の A は、この楕円の面積に等しい。さて、形状関数の具体的な計算について説明する。

$$
\begin{aligned}
\theta(\mathbf{h}) &= \int_{\mathbf{r}} c(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{hr})d\mathbf{r} \\
&= \int_0^{2\pi}\int_0^{\mathbf{r}(\mathbf{z})}\int_{-z_0}^{z_0} \exp\{i\mathbf{h}(\mathbf{z}+\mathbf{r}')\}d\mathbf{z}d\mathbf{r}'\,d\varphi \\
&= \int_{-z_0}^{z_0} \exp(ihz)A dz \\
&= \frac{\pi p}{K^3(\theta)}\int_{-z_0}^{z_0} (z_0^2 - z^2)\cos(hz)dz \\
&= \frac{2\pi p}{K^3(\theta)}\int_0^{z_0} (z_0^2 - z^2)\cos(hz)dz
\end{aligned} \tag{29}
$$

ここで、

$$
z_0^2\int_0^{z_0}\cos(hz)dz = \frac{z_0^2}{h}\sin(hz_0)
$$

および

$$
\int_0^{z_0} z^2\cos(hz)dz = \frac{z_0^2}{h}\sin(hz_0) + \frac{2z_0}{h^2}\cos(hz_0) - \frac{2}{h^3}\sin(hz_0)
$$

よって、式(29)は次式にて与えられる。

$$
\begin{aligned}
\theta(\mathbf{h}) &= \frac{4\pi\, p}{K^3(\theta, p)}\frac{[\sin(z_0h) - z_0h\cos(z_0h)]}{h^3} \\
&= \frac{4\pi z_0^3 p}{K^3(\theta, p)}\frac{[\sin(z_0h) - z_0h\cos(z_0h)]}{(z_0h)^3} \\
&= \frac{4\pi a^3 K^3(\theta, p)p}{K^3(\theta, p)}\frac{[\sin(z_0h) - z_0h\cos(z_0h)]}{(z_0h)^3} \\
&= 3V\,\frac{[\sin(z_0h) - z_0h\cos(z_0h)]}{(z_0h)^3}
\end{aligned} \tag{30}
$$

ここで、$V = \frac{4}{3}\pi a^3 p$ である。

3)直方体状粒子の形状関数の導出

x 軸, y 軸, および z 軸と直方体の交点の座標をそれぞれ、$\pm a, \pm b, \pm c,$ とする。
これより、形状関数は以下のように計算される。

$$
\begin{aligned}
\theta(\mathbf{h}) &= \int_{\mathbf{r}} c(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{hr})d\mathbf{r} \\
&= \int_{-c}^{c}\int_{-b}^{b}\int_{-a}^{a} \exp\{i(h_x x + h_y y + h_z z)\}dxdydz \\
&= \left[\int_{-a}^{a}\exp(ih_x x)dx\right]\left[\int_{-b}^{b}\exp(ih_y y)dy\right]\left[\int_{-c}^{c}\exp(ih_z z)dz\right]
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&= 8\left\{\int_0^a \cos(h_x x)dx\right\}\left\{\int_0^b \cos(h_y y)dy\right\}\left\{\int_0^c \cos(h_z z)dz\right\} \\
&= 8\left\{\frac{\sin(h_x a)}{h_x}\right\}\left\{\frac{\sin(h_y b)}{h_y}\right\}\left\{\frac{\sin(h_z c)}{h_z}\right\}
\end{aligned}
\tag{31}
$$

以上は、析出粒子の中心が実空間座標中心に位置している場合の形状関数の計算であるが、次に、析出粒子の中心が位置ベクトル$\mathbf{R}$にある場合の形状関数を求める。なお、析出粒子の中心が実空間座標中心に位置している場合の形状関数を$\theta_0(\mathbf{h})$と置く。

$$
\begin{aligned}
\theta(\mathbf{h}) &= \int_{\mathbf{r}} c(\mathbf{r}+\mathbf{R})\exp\{i\mathbf{h}(\mathbf{r}+\mathbf{R})\}d\mathbf{r} \\
&= \int_{\mathbf{r}} c(\mathbf{r}+\mathbf{R})\exp(i\mathbf{hr})\exp(i\mathbf{hR})d\mathbf{r} \\
&= \exp(i\mathbf{hR})\int_{\mathbf{r}} c(\mathbf{r}+\mathbf{R})\exp(i\mathbf{hr})d\mathbf{r} \\
&= \theta_0(\mathbf{h})\exp(i\mathbf{hR})
\end{aligned}
\tag{32}
$$

さらに析出粒子中心が位置$\mathbf{R}_1$および位置$\mathbf{R}_2$にある２粒子全体の形状関数は以下のように計算される。ただし、それぞれの粒子が座標中心に存在する場合の形状関数を$\theta_1(\mathbf{h})$および$\theta_2(\mathbf{h})$とした。

$$
\begin{aligned}
\theta(\mathbf{h}) &= \int_{\mathbf{r}} [c_1(\mathbf{r}+\mathbf{R}_1)\exp\{i\mathbf{h}(\mathbf{r}+\mathbf{R}_1)\} + c_2(\mathbf{r}+\mathbf{R}_2)\exp\{i\mathbf{h}(\mathbf{r}+\mathbf{R}_2)\}]d\mathbf{r} \\
&= \int_{\mathbf{r}} [c_1(\mathbf{r}+\mathbf{R}_1)\exp(i\mathbf{hr})\exp(i\mathbf{hR}_1) + c_2(\mathbf{r}+\mathbf{R}_2)\exp(i\mathbf{hr})\exp(i\mathbf{hR}_2)]d\mathbf{r} \\
&= \theta_1(\mathbf{h})\exp(i\mathbf{hR}_1) + \theta_2(\mathbf{h})\exp(i\mathbf{hR}_2)
\end{aligned}
\tag{33}
$$

これより、

$$
\begin{aligned}
&\theta(\mathbf{h})\theta(-\mathbf{h}) \\
&= [\theta_1(\mathbf{h})\exp(i\mathbf{hR}_1) + \theta_2(\mathbf{h})\exp(i\mathbf{hR}_2)][\theta_1(-\mathbf{h})\exp(-i\mathbf{hR}_1) + \theta_2(-\mathbf{h})\exp(-i\mathbf{hR}_2)] \\
&= \theta_1(\mathbf{h})\theta_1(-\mathbf{h}) + \theta_2(\mathbf{h})\theta_2(-\mathbf{h}) \\
&\quad + \theta_1(\mathbf{h})\theta_2(-\mathbf{h})\exp\{i\mathbf{h}(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)\} + \theta_1(-\mathbf{h})\theta_2(\mathbf{h})\exp\{i\mathbf{h}(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)\}
\end{aligned}
\tag{34}
$$

であるので、２粒子全体の弾性歪エネルギーは、式(15)より次式にて与えられる。なお、ここで、無限マトリックス中の２粒子を考えることにする。このように境界条件を設定することにより、マトリックスの濃度c_mを平均組成c_0に一致させることが出来る。析出粒子の濃度も一定c_pとするので、等価変態歪は$e_{ij}^T = \eta_{ij}(c_p - c_0) = \eta_{ij}(c_p - c_m)$にて与えられる。濃度の情報は、基本的には$Q(\mathbf{h})$が担っているが、このように仮定することによって、濃度場，すなわち$(c_p - c_m)$を$Q(\mathbf{h})$からくくり出すことが出来、これをη_{ij}と合わせて等価変態歪e_{ij}^Tとして、弾性関数$B(\mathbf{n})$内の繰り込むことにする。また、この操作から、$Q(\mathbf{h})$は形状関数のフーリエ変換である$\theta(\mathbf{h})$に置き換わる。つまり、

$$
\begin{aligned}
E_{str} &= \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{h}} B(\mathbf{n})Q(\mathbf{h})Q(-\mathbf{h}) \\
&= \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{h}} B(\mathbf{n})\theta_1(\mathbf{h})\theta_1(-\mathbf{h}) + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{h}} B(\mathbf{n})\theta_2(\mathbf{h})\theta_2(-\mathbf{h}) \\
&\quad + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{h}} B(\mathbf{n})\theta_1(\mathbf{h})\theta_2(-\mathbf{h})\exp\{i\mathbf{h}(\mathbf{R}_1-\mathbf{R}_2)\} \\
&\quad + \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{h}} B(\mathbf{n})\theta_1(-\mathbf{h})\theta_2(\mathbf{h})\exp\{i\mathbf{h}(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)\}
\end{aligned} \tag{35}
$$

である。これより粒子間の弾性相互作用エネルギーは、式(35)の右辺3,4項に対応することがわかる。1粒子当たりの粒子間の弾性相互作用エネルギーは、式(36)にて与えられる。

$$
\begin{aligned}
E_{int} &= \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{h}} B(\mathbf{n})\theta_1(-\mathbf{h})\theta_2(\mathbf{h})\exp\{i\mathbf{h}(\mathbf{R}_2-\mathbf{R}_1)\} \\
&= \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{h}} B(\mathbf{n})\theta_1(\mathbf{h})\theta_2(\mathbf{h})\exp(i\mathbf{h}\mathbf{R}) \\
&= \frac{1}{2(2\pi)^3}\int_h B(\mathbf{n})\theta_1(\mathbf{h})\theta_2(\mathbf{h})\exp(i\mathbf{h}\mathbf{R})d\mathbf{h}
\end{aligned} \tag{36}
$$

回転楕円体の形状関数は式(30)にて与えられる。

$$
\theta(\mathbf{h}) = 3V\,\frac{[\sin(z_0h) - z_0h\cos(z_0h)]}{(z_0h)^3} \tag{30}
$$

$$
z_0 \equiv aK(\theta,p) = a\sqrt{\sin^2(\theta) + p^2\cos^2(\theta)} \quad , \qquad V = \frac{4}{3}\pi a^3 p
$$

したがって、弾性相互作用エネルギーは、

$$
\begin{aligned}
E_{int} &= \frac{1}{16\pi^3}\int_h B(\mathbf{n})\theta_1(\mathbf{h})\theta_2(\mathbf{h})\exp(i\mathbf{h}\mathbf{R})d\mathbf{h} \\
&= \frac{1}{16\pi^3}\int_h\int_\varphi\int_\theta \left\{ \begin{array}{l} B(\theta_R,\varphi_R,\theta,\varphi)\,3V_1\dfrac{[\sin(z_1h)-z_1h\cos(z_1h)]}{(z_1h)^3}\,3V_2\dfrac{[\sin(z_2h)-z_2h\cos(z_2h)]}{(z_2h)^3} \\ \cos\{hR\cos(\theta)\}h^2\sin(\theta) \end{array} \right\} d\theta d\varphi dh \\
&= \frac{9V_1V_2}{16\pi^3}\int_h\int_\varphi\int_\theta \left\{ \begin{array}{l} B(\theta_R,\varphi_R,\theta,\varphi)\dfrac{[\sin(z_1h)-z_1h\cos(z_1h)]}{(z_1h)^3}\dfrac{[\sin(z_2h)-z_2h\cos(z_2h)]}{(z_2h)^3} \\ \cos\{hR\cos(\theta)\}h^2\sin(\theta) \end{array} \right\} d\theta d\varphi dh
\end{aligned} \tag{37}
$$

$$
z_1 = a_1\sqrt{\sin^2(\theta_{Rh}) + p_1^2\cos^2(\theta_{Rh})}, \quad z_2 = a_2\sqrt{\sin^2(\theta_{Rh}) + p_2^2\cos^2(\theta_{Rh})}
$$

$$
V_1 = \frac{4}{3}\pi a_1^3 p_1, \quad V_2 = \frac{4}{3}\pi a_2^3 p_2
$$

となる。ここで、(θ_R,φ_R)は、**R**ベクトルの方向を表し、(θ,φ)は、**h**ベクトル座標系にお

ける**h**ベクトルの方向を表す。また、θ_{Rh} は実空間の座標軸z(回転楕円体の回転軸に一致)と、逆空間の**h**ベクトルのなす角度で、V_i, a_i, p_i は粒子iの体積, x方向の半径, およびアスペクト比である。実空間の座標系から見た場合の、**h**ベクトルの方向(n_x, n_y, n_z)は式(22)にて与えられる。

$$\begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta_R \cos\varphi_R & -\sin\varphi_R & \sin\theta_R \cos\varphi_R \\ \cos\theta_R \sin\varphi_R & \cos\varphi_R & \sin\theta_R \sin\varphi_R \\ -\sin\theta_R & 0 & \cos\theta_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi \\ \sin\theta\sin\varphi \\ \cos\theta \end{pmatrix} \tag{22}$$

したがって、θ_{Rh} に関しては、式(38)の関係式が成立する。

$$\cos^2(\theta_{Rh}) = n_z^2, \quad \sin^2(\theta_{Rh}) = 1 - n_z^2 \tag{38}$$

以上より弾性相互作用エネルギーは、最終的に次式のように表すことができる。

$$E_{int} = \frac{9V_1V_2}{16\pi^3} \int_h \int_\varphi \int_\theta \left\{ \begin{array}{l} B(\theta_R, \varphi_R, \theta, \varphi)\sin(\theta)\cos\{hR\cos(\theta)\} \\ \dfrac{\left[\sin\{z_1(\theta_R, \varphi_R, \theta, \varphi)h\} - z_1(\theta_R, \varphi_R, \theta, \varphi)h\cos\{z_1(\theta_R, \varphi_R, \theta, \varphi)h\}\right]}{z_1^3(\theta_R, \varphi_R, \theta, \varphi)h^2} \\ \dfrac{\left[\sin\{z_2(\theta_R, \varphi_R, \theta, \varphi)h\} - z_2(\theta_R, \varphi_R, \theta, \varphi)h\cos\{z_2(\theta_R, \varphi_R, \theta, \varphi)h\}\right]}{z_2^3(\theta_R, \varphi_R, \theta, \varphi)h^2} \end{array} \right\} d\theta d\varphi dh \tag{39}$$

$$z_1 = a_1\sqrt{\sin^2(\theta_{Rh}) + p_1^2\cos^2(\theta_{Rh})}, \quad z_2 = a_2\sqrt{\sin^2(\theta_{Rh}) + p_2^2\cos^2(\theta_{Rh})}$$
$$V_1 = \frac{4}{3}\pi a_1^3 p_1, \quad V_2 = \frac{4}{3}\pi a_2^3 p_2$$
$$\cos^2(\theta_{Rh}) = n_z^2, \quad \sin^2(\theta_{Rh}) = 1 - n_z^2$$
$$\begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta_R \cos\varphi_R & -\sin\varphi_R & \sin\theta_R \cos\varphi_R \\ \cos\theta_R \sin\varphi_R & \cos\varphi_R & \sin\theta_R \sin\varphi_R \\ -\sin\theta_R & 0 & \cos\theta_R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi \\ \sin\theta\sin\varphi \\ \cos\theta \end{pmatrix}$$

hの積分区間は以下のように設定する。まずfccの場合、１原子当たりの体積は$a^3/4$であるから、第一ブリアンゾーンの体積は、近似的に

$$\left(\frac{2\pi}{(a^3/4)^{1/3}}\right)^3 = 32\left(\frac{\pi}{a}\right)^3$$

にて計算される。したがって、hの最大値$h_{\max}$は、

$$\frac{4\pi}{3}h_{max}^3 = 32\left(\frac{\pi}{a}\right)^3, \quad h_{max} = \left(\frac{24}{\pi}\right)^{1/3}\frac{\pi}{a} \cong \frac{6.187}{a}$$

にて与えられる。bccの場合は、$\left(\frac{2\pi}{(a^3/2)^{1/3}}\right)^3 = 16\left(\frac{\pi}{a}\right)^3$ より、

$$\frac{4\pi}{3}h_{max}^3 = 16\left(\frac{\pi}{a}\right)^3, \quad h_{max} = \left(\frac{12}{\pi}\right)^{1/3}\frac{\pi}{a} \cong \frac{4.911}{a}$$

hcpの場合は、$\left(\frac{2\pi}{(3\sqrt{3}a^2c/2)^{1/3}}\right)^3 = \frac{16}{3\sqrt{3}}\left(\frac{\pi}{(a^2c)^{1/3}}\right)^3$ より、$\frac{4\pi}{3}h_{max}^3 = \frac{16}{3\sqrt{3}}\left(\frac{\pi}{(a^2c)^{1/3}}\right)^3$

また最密充填の場合を考え、$c = a\sqrt{8/3}$ として、

$$\frac{4\pi}{3}h_{max}^3 = \frac{16}{3\sqrt{3}}\left(\frac{\pi}{(a^3\sqrt{8/3})^{1/3}}\right)^3 = \frac{16\sqrt{3}}{3\sqrt{24}}\left(\frac{\pi}{a}\right)^3 = \frac{8}{3\sqrt{2}}\left(\frac{\pi}{a}\right)^3,$$

$$h_{max} = \left(\frac{3}{4\pi}\frac{8}{3\sqrt{2}}\right)^{1/3}\frac{\pi}{a} = \left(\frac{\sqrt{2}}{\pi}\right)^{1/3}\frac{\pi}{a} \cong \frac{2.408}{a}$$

となる。

弾性定数に関して、立方晶、正方晶、六方晶における計算については、

立方晶および $\eta_{11} = \eta_{22} = \eta_{33} = \eta_0$ の場合、$C_{11} = C_{22} = C_{33}$, $C_{12} = C_{23} = C_{13}$, $C_{44} = C_{55} = C_{66}$
正方晶および $\eta_{11} = \eta_{22}$ の場合、$C_{11} = C_{22}$, $C_{13} = C_{23}$, $C_{44} = C_{55}$
六方晶および $\eta_{11} = \eta_{22}$ の場合、$C_{11} = C_{22}$, $C_{13} = C_{23}$, $C_{44} = C_{55}$, $C_{66} = (C_{11} - C_{12})/2$

とすればよい。