斜方晶の弾性相互作用エネルギーの理論式（実空間計算）

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。

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

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。）

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

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。

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

式(6)は簡易表記で、式(8)にて表されるので、

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

式(7)は最終的に式(9)にて与えられる。

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

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

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

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_{ij}^c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、$e_{ij}^c = \varepsilon_{ij}\delta_{ij}$にて与えられる。これを式(1)に代入する。

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

ここで、歪場$e_{ij}^c = \varepsilon_{ij}\delta_{ij}$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。

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

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。

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

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）

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

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

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、

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

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。

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

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

次にグリーン関数を次式定義する。

$$
G_{pj}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \equiv \sum_{\mathbf{h}} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) \exp\{i\mathbf{h}\beta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\} \tag{17}
$$

これより、

$$
\begin{aligned}
&\int_{\mathbf{r}'} G_{pj}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\{c(\mathbf{r}')-c_0\}d\mathbf{r}' \\
&= \int_{\mathbf{r}'}\sum_{\mathbf{h}}\sum_{\mathbf{h}'} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) \exp\{i\mathbf{h}\beta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\} Q(\mathbf{h}')\exp(i\mathbf{h}'\beta\mathbf{r}')d\mathbf{r}' \\
&= \sum_{\mathbf{h}}\sum_{\mathbf{h}'} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) Q(\mathbf{h}')\exp(i\mathbf{h}\beta\mathbf{r})\int_{\mathbf{r}'}\exp\{i(\mathbf{h}'-\mathbf{h})\beta\mathbf{r}'\}d\mathbf{r}' \\
&= \sum_{\mathbf{h}} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) Q(\mathbf{h})\exp(i\mathbf{h}\beta\mathbf{r})
\end{aligned}
\tag{18}
$$

である。式(11)より、Pure dilatationの固有歪場の場合、

$$
\begin{aligned}
e^c_{jj}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{h}} C_{ppmm}\eta_{mm} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) Q(\mathbf{h})\exp(i\mathbf{h}\beta\mathbf{r}) \\
&= C_{ppmm}\eta_{mm}\sum_{\mathbf{h}} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) Q(\mathbf{h})\exp(i\mathbf{h}\beta\mathbf{r})
\end{aligned}
\tag{19}
$$

であり、式(18)を代入すると、式(20)が得られる。

$$
e^c_{jj}(\mathbf{r}) = C_{ppmm}\eta_{mm}\int_{\mathbf{r}'} G_{pj}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\{c(\mathbf{r}')-c_0\}d\mathbf{r}' \tag{20}
$$

つまり、弾性歪エネルギーはグリーン関数を用いることによって、式(21)のようにも、表現することが出来る。

$$
\begin{aligned}
E_{str} &= \frac{1}{2}C_{jjkk}\eta_{jj}\eta_{kk}\int_{\mathbf{r}}\{c(\mathbf{r})-c_0\}^2 d\mathbf{r} - \frac{1}{2}C_{jjkk}\eta_{kk}\int_{\mathbf{r}} e^c_{jj}(\mathbf{r})\{c(\mathbf{r})-c_0\}d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2}C_{jjkk}\eta_{jj}\eta_{kk}\int_{\mathbf{r}}\{c(\mathbf{r})-c_0\}^2 d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{jjkk}\eta_{kk}\{c(\mathbf{r})-c_0\}\int_{\mathbf{r}'} G_{pj}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')C_{ppmm}\eta_{mm}\{c(\mathbf{r}')-c_0\}d\mathbf{r}'d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2}C_{jk}\eta_{jj}\eta_{kk}\int_{\mathbf{r}}\{c(\mathbf{r})-c_0\}^2 d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{jk}\eta_{kk}\{c(\mathbf{r})-c_0\}\int_{\mathbf{r}'} G_{pj}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')C_{pm}\eta_{mm}\{c(\mathbf{r}')-c_0\}d\mathbf{r}'d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2}C_{jk}\eta_{jj}\eta_{kk}\int_{\mathbf{r}}\{c(\mathbf{r})-c_0\}^2 d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}}\{c(\mathbf{r})-c_0\}\int_{\mathbf{r}'}[C_{jk}\eta_{kk}C_{pm}\eta_{mm}G_{pj}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')]\{c(\mathbf{r}')-c_0\}d\mathbf{r}'d\mathbf{r}
\end{aligned}
\tag{21}
$$

ここで、

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

また、

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

である。

次に式(17)のグリーン関数の数値計算法について説明する。まず、式(17)の離散和を積分形に書き直すと次式となる。「理論計算および数値計算におけるフーリエ変換と和の定義について」参照。

$$G_{pj}(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \equiv \sum_{\mathbf{h}} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) \exp\{i\mathbf{h}\beta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\mathbf{k}} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) \exp\{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\} d\mathbf{k} \qquad (24)$$

さらに式(24)の右辺は、次のように変形できる。「$F(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{k}} W(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})d\mathbf{k}$ の計算」参照。

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\mathbf{k}} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) \exp\{i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\} d\mathbf{k} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3}\left\{-\frac{\pi}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}\int_0^{2\pi}\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\left(n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n})\right)\right]_{\theta=\pi/2} d\varphi\right\} \\
&= -\frac{1}{8\pi^2|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}\int_0^{2\pi}\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}W_{pj}(\theta,\varphi,\theta_r,\varphi_r)\right]_{\theta=\pi/2} d\varphi \\
&= -\frac{Z_{pj}(\theta_r,\varphi_r)}{8\pi^2|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}
\end{aligned} \qquad (25)$$

$$\begin{aligned}
&W_{pj}(\theta,\varphi,\theta_r,\varphi_r) \equiv n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) \\
&Z_{pj}(\theta_r,\varphi_r) \equiv \int_0^{2\pi}\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}\left(n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n})\right)\right]_{\theta=\pi/2} d\varphi = \int_0^{2\pi}\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}W_{pj}(\theta,\varphi,\theta_r,\varphi_r)\right]_{\theta=\pi/2} d\varphi
\end{aligned} \qquad (26)$$

式(12)より、 $\omega_{pl}^{-1}(n) \equiv C_{pqkl} n_q n_k$ であるから、

$$\begin{aligned}
\Omega_{11}^{-1}(\mathbf{n}) &= C_{1qi1} n_q n_i \\
&= C_{1111} n_1 n_1 + C_{1221} n_2 n_2 + C_{1331} n_3 n_3 \\
&= C_{11} n_1^2 + C_{66} n_2^2 + C_{55} n_3^2 \\[1em]
\Omega_{22}^{-1}(\mathbf{n}) &= C_{2qi2} n_q n_i \\
&= C_{2112} n_1 n_1 + C_{2222} n_2 n_2 + C_{2332} n_3 n_3 \\
&= C_{66} n_1^2 + C_{22} n_2^2 + C_{44} n_3^2 \\[1em]
\Omega_{33}^{-1}(\mathbf{n}) &= C_{3qi3} n_q n_i \\
&= C_{3113} n_1 n_1 + C_{3223} n_2 n_2 + C_{3333} n_3 n_3 \\
&= C_{55} n_1^2 + C_{44} n_2^2 + C_{33} n_3^2 \\[1em]
\Omega_{12}^{-1}(\mathbf{n}) &= C_{1qi2} n_q n_i \\
&= C_{1122} n_1 n_2 + C_{1212} n_2 n_1 \\
&= (C_{12} + C_{66}) n_1 n_2 = \Omega_{21}^{-1}(\mathbf{n})
\end{aligned} \qquad (27)$$

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\Omega}_{23}^{-1}(\mathbf{n}) &= C_{2qi3} n_q n_i \\
&= C_{2233} n_2 n_3 + C_{2323} n_3 n_2 \\
&= (C_{23} + C_{44}) n_2 n_3 = \boldsymbol{\Omega}_{32}^{-1}(\mathbf{n})
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{\Omega}_{31}^{-1}(\mathbf{n}) &= C_{3qi1} n_q n_i \\
&= C_{3311} n_3 n_1 + C_{3131} n_1 n_3 \\
&= (C_{13} + C_{55}) n_1 n_3 = \boldsymbol{\Omega}_{13}^{-1}(\mathbf{n})
\end{aligned}
$$

これより、$\boldsymbol{\Omega}_{pj}(\mathbf{n})$ は式(27)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。

$$
\begin{aligned}
&\begin{pmatrix} n_x \\ n_y \\ n_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi \\ \sin\theta\sin\varphi \\ \cos\theta \end{pmatrix} \\
&\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta_r\cos\varphi_r & -\sin\varphi_r & \sin\theta_r\cos\varphi_r \\ \cos\theta_r\sin\varphi_r & \cos\varphi_r & \sin\theta_r\sin\varphi_r \\ -\sin\theta_r & 0 & \cos\theta_r \end{pmatrix}
\end{aligned}
\tag{28}
$$

以上より、式(26)を数値計算することができる。（計算法については、「$F(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{k}} W(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{kr}) d\mathbf{k}$ の計算」を参照。）したがって、予め式(26)を数値計算し、$Z_{pj}(\theta_r, \varphi_r)$ を (θ_r, φ_r) の関数として数値配列データ化しておけば、式(24)(25)より、グリーン関数は最終的に距離のみの関数として扱うことが出来る。

$$
G_{pj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{Z(\theta_r, \varphi_r)}{8\pi^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \tag{29}
$$

$$
\begin{aligned}
E_{str} &= \frac{1}{2} C_{jk} \eta_{jj} \eta_{kk} \int_{\mathbf{r}} \{c(\mathbf{r}) - c_0\}^2 d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} C_{jk} \eta_{kk} \{c(\mathbf{r}) - c_0\} \int_{\mathbf{r}'} G_{pj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') C_{pm} \eta_{mm} \{c(\mathbf{r}') - c_0\} d\mathbf{r}' d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2} C_{jk} \eta_{jj} \eta_{kk} \int_{\mathbf{r}} \{c(\mathbf{r}) - c_0\}^2 d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \{c(\mathbf{r}) - c_0\} \int_{\mathbf{r}'} [C_{jk} \eta_{kk} C_{pm} \eta_{mm} G_{pj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')] \{c(\mathbf{r}') - c_0\} d\mathbf{r}' d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2} C_{jk} \eta_{jj} \eta_{kk} \int_{\mathbf{r}} \{c(\mathbf{r}) - c_0\}^2 d\mathbf{r} \\
&\quad + \frac{1}{16\pi^2} \int_{\mathbf{r}} \{c(\mathbf{r}) - c_0\} \int_{\mathbf{r}'} [C_{jk} \eta_{kk} C_{pm} \eta_{mm} Z_{pj}(\theta_r, \varphi_r)] \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \{c(\mathbf{r}') - c_0\} d\mathbf{r}' d\mathbf{r}
\end{aligned}
\tag{30}
$$

次に、具体的な式(30)の計算手順について説明する。

まず始めに、(θ_r, φ_r) を固定する。次に (θ, φ) を変数として、式(28)を用いて $\mathbf{n} = (n_x, n_y, n_z)$ を計算し、これを式(30)に代入することによって $W_{pj}(\theta, \varphi, \theta_r, \varphi_r)$ を求める。(θ_r, φ_r) は固定されているから、$W_{pj}(\theta, \varphi, \theta_r, \varphi_r)$ は (θ, φ) の関数として導かれたことになる。続いて θ 方向の２階微分を差分により数値計算した後、$\theta = \pi/2$ における値を φ 方向に積分することによって、$Z_{pj}(\theta_r, \varphi_r)$ [式(26)]を得る。（なお θ 方向の２階微分は $\theta = \pi/2$ の位置においてのみ計算すれば良い。）(θ_r, φ_r) の値を変更して以上の計算を繰り返すことにより、個々の (θ_r, φ_r) に対して $Z_{pj}(\theta_r, \varphi_r)$ が計算される。(θ_r, φ_r) の変域は斜方晶の対称性から $(0 \le \theta_r \le \pi/2)$, $(0 \le \varphi_r \le \pi/2)$ とする。$Z_{pj}(\theta_r, \varphi_r)$ の計算に関与する物質定数は基本的に弾性率のみであるから、この関数は予め数値データファイルとして計算しておくと便利である。

$Z_{pj}(\theta_r, \varphi_r)$，すなわち $Z_{11}(\theta_r, \varphi_r), Z_{22}(\theta_r, \varphi_r), Z_{33}(\theta_r, \varphi_r), Z_{12}(\theta_r, \varphi_r), Z_{23}(\theta_r, \varphi_r), Z_{31}(\theta_r, \varphi_r)$ が数値データファイルとして得られているとして、続いて弾性歪エネルギーの計算法を説明する。式(30)より、濃度場を境界条件として与えれば、弾性歪エネルギーは空間積分にて求めることが出来る。濃度場は楕円体状の析出粒子形状によって設定される場合が多い。楕円体の実空間における形状関数は、次式にて与えられる。

$$\frac{x^2}{a_x^2} + \frac{y^2}{a_y^2} + \frac{z^2}{a_z^2} = 1 \tag{31}$$

個々の粒子の形状は、楕円体の範疇では、$\mathbf{a}(i) = (a_x(i), a_y(i), a_z(i))$ (i 番目の粒子)によって決定される。またマトリックス中における i 番目の粒子重心の位置ベクトルを $\mathbf{R}(i) = (R_x(i), R_y(i), R_z(i))$ とする。$\mathbf{a}(i)$ と $\mathbf{R}(i)$ によって i 番目の粒子は定義でき、$\mathbf{a}(i)$ と $\mathbf{R}(i)$ を境界条件として式(30)を計算する。$Z_{pj}(\theta_r, \varphi_r)$ はデータファイルとして与えられているので、$C_{jk}\eta_{kk}C_{pm}\eta_{mm}Z_{pj}(\theta_r, \varphi_r)$ は式(23)と同様にして計算できる。

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

$$[C_{1k}C_{1m}\eta_{kk}\eta_{mm}]Z_{11} = \begin{bmatrix} C_{11}C_{11}\eta_{11}\eta_{11} + C_{12}C_{12}\eta_{22}\eta_{22} + C_{13}C_{13}\eta_{33}\eta_{33} \\ +2C_{11}C_{12}\eta_{11}\eta_{22} + 2C_{12}C_{13}\eta_{22}\eta_{33} + 2C_{13}C_{11}\eta_{33}\eta_{11} \end{bmatrix} Z_{11}$$

$$[C_{2k}C_{2m}\eta_{kk}\eta_{mm}]Z_{22} = \begin{bmatrix} C_{21}C_{21}\eta_{11}\eta_{11} + C_{22}C_{22}\eta_{22}\eta_{22} + C_{23}C_{23}\eta_{33}\eta_{33} \\ +2C_{21}C_{22}\eta_{11}\eta_{22} + 2C_{22}C_{23}\eta_{22}\eta_{33} + 2C_{23}C_{21}\eta_{33}\eta_{11} \end{bmatrix} Z_{22}$$

$$[C_{3k}C_{3m}\eta_{kk}\eta_{mm}]Z_{33} = \begin{bmatrix} C_{31}C_{31}\eta_{11}\eta_{11} + C_{32}C_{32}\eta_{22}\eta_{22} + C_{33}C_{33}\eta_{33}\eta_{33} \\ +2C_{31}C_{32}\eta_{11}\eta_{22} + 2C_{32}C_{33}\eta_{22}\eta_{33} + 2C_{33}C_{31}\eta_{33}\eta_{11} \end{bmatrix} Z_{33} \tag{33}$$

$$2[C_{1k}C_{2m}\eta_{kk}\eta_{mm}]Z_{21} = 2\begin{bmatrix} C_{11}C_{21}\eta_{11}\eta_{11} + C_{12}C_{22}\eta_{22}\eta_{22} + C_{13}C_{23}\eta_{33}\eta_{33} \\ +2C_{11}C_{22}\eta_{11}\eta_{22} + 2C_{12}C_{23}\eta_{22}\eta_{33} + 2C_{13}C_{21}\eta_{33}\eta_{11} \end{bmatrix} Z_{21}$$

$$2\left[C_{2k}C_{3m}\eta_{kk}\eta_{mm}\right]Z_{32}=2\begin{Bmatrix}C_{21}C_{31}\eta_{11}\eta_{11}+C_{22}C_{32}\eta_{22}\eta_{22}+C_{23}C_{33}\eta_{33}\eta_{33}\\+2C_{21}C_{32}\eta_{11}\eta_{22}+2C_{22}C_{33}\eta_{22}\eta_{33}+2C_{23}C_{31}\eta_{33}\eta_{11}\end{Bmatrix}Z_{32}$$

$$2\left[C_{3k}C_{1m}\eta_{kk}\eta_{mm}\right]Z_{13}=2\begin{Bmatrix}C_{31}C_{11}\eta_{11}\eta_{11}+C_{32}C_{12}\eta_{22}\eta_{22}+C_{33}C_{13}\eta_{33}\eta_{33}\\+2C_{31}C_{12}\eta_{11}\eta_{22}+2C_{32}C_{13}\eta_{22}\eta_{33}+2C_{33}C_{11}\eta_{33}\eta_{11}\end{Bmatrix}Z_{13}$$

また、式(30)において平均組成をマトリックス濃度にとれば、無限のマトリックスを仮定したことになり、無限マトリックス中に１個，もしくは数個存在するような析出粒子における弾性歪エネルギー（弾性相互作用エネルギー）を計算することが可能である。さらに析出粒子内の濃度は均一(c_p)であると仮定すると、弾性歪エネルギー式は次式にように表すことが出来る。ただし$\varepsilon_{kk}(r)=\eta_{kk}(c_p-c_0)$と置いた。

$$\begin{aligned}E_{str}&=\frac{1}{2}C_{jk}\eta_{jj}\eta_{kk}\int_{\mathbf{r}}\{c(\mathbf{r})-c_0\}^2d\mathbf{r}\\&\quad-\frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}}C_{jk}\eta_{kk}\{c(\mathbf{r})-c_0\}\int_{\mathbf{r}'}G_{pj}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')C_{pm}\eta_{mm}\{c(\mathbf{r}')-c_0\}d\mathbf{r}'d\mathbf{r}\\&=\frac{1}{2}C_{jk}\varepsilon_{jj}\varepsilon_{kk}V_p-\frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}}C_{jk}\varepsilon_{kk}(\mathbf{r})\int_{\mathbf{r}'}G_{pj}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')C_{pm}\varepsilon_{mm}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'d\mathbf{r}\\&=\frac{1}{2}C_{jk}\varepsilon_{jj}\varepsilon_{kk}V_p+\frac{1}{16\pi^2}\int_{\mathbf{r}}\int_{\mathbf{r}'}\frac{C_{jk}\varepsilon_{kk}(\mathbf{r})C_{pm}\varepsilon_{mm}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^3}Z_{pj}(\theta_r,\varphi_r)d\mathbf{r}'d\mathbf{r}\end{aligned}\qquad(34)$$

なお、フーリエ変換を利用する計算では、この無限マトリックス中の１粒子の弾性歪エネルギーのような計算は、フーリエ波の性格上、不可能である。（デルタ関数のフーリエ変換を利用すれば可能であるが、この場合は、相分解シミュレーションに使用したアルゴリズムは使用できない。）

3．立方晶、正方晶、六方晶における弾性歪エネルギー式

斜方晶の弾性歪エネルギー式は次式にて与えられる。

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

(1)

これより、立方晶、正方晶、および六方晶の弾性歪エネルギー式は弾性定数の対称性からそれぞれ以下のように与えられる。

・立方晶および $\eta_{11} = \eta_{22} = \eta_{33} = \eta_0$ の場合

$C_{11} = C_{22} = C_{33}$, $C_{12} = C_{23} = C_{13}$, $C_{44} = C_{55} = C_{66}$ であるから、

$$
\begin{aligned}
E_{str} &= \frac{3}{2}(C_{11} + 2C_{12})\eta_0^2(c-c_0)^2 - (C_{11} + 2C_{12})(e_{11}^c + e_{22}^c + e_{33}^c)\eta_0(c-c_0) \\
&\quad + \frac{1}{2}C_{11}({e_{11}^c}^2 + {e_{22}^c}^2 + {e_{33}^c}^2) + C_{12}(e_{11}^c e_{22}^c + e_{22}^c e_{33}^c + e_{33}^c e_{11}^c) + 2C_{44}({e_{23}^c}^2 + {e_{31}^c}^2 + {e_{12}^c}^2)
\end{aligned} \tag{2}
$$

・正方晶および $\eta_{11} = \eta_{22}$ の場合

$C_{11} = C_{22}$, $C_{13} = C_{23}$, $C_{44} = C_{55}$ であるから、

$$
\begin{aligned}
E_{str} &= \frac{1}{2}\left[C_{11}\eta_{11}^2 + C_{11}\eta_{11}^2 + C_{33}\eta_{33}^2 + 2C_{12}\eta_{11}\eta_{11} + 2C_{13}\eta_{11}\eta_{33} + 2C_{13}\eta_{11}\eta_{33}\right](c-c_0)^2 \\
&\quad - \left[(C_{11}\eta_{11} + C_{12}\eta_{11} + C_{13}\eta_{33})e_{11}^c + (C_{11}\eta_{11} + C_{12}\eta_{11} + C_{13}\eta_{33})e_{22}^c + (C_{33}\eta_{33} + C_{13}\eta_{11} + C_{13}\eta_{11})e_{33}^c\right](c-c_0) \\
&\quad + \frac{1}{2}C_{11}{e_{11}^c}^2 + \frac{1}{2}C_{11}{e_{22}^c}^2 + \frac{1}{2}C_{33}{e_{33}^c}^2 + C_{12}e_{11}^c e_{22}^c + C_{13}e_{22}^c e_{33}^c + C_{13}e_{33}^c e_{11}^c + 2C_{44}{e_{23}^c}^2 + 2C_{44}{e_{31}^c}^2 + 2C_{66}{e_{12}^c}^2 \\
&= \frac{1}{2}\left[2C_{11}\eta_{11}^2 + C_{33}\eta_{33}^2 + 2C_{12}\eta_{11}^2 + 4C_{13}\eta_{11}\eta_{33}\right](c-c_0)^2 \\
&\quad - \left[2(C_{11}\eta_{11} + C_{12}\eta_{11} + C_{13}\eta_{33})e_{11}^c + (C_{33}\eta_{33} + 2C_{13}\eta_{11})e_{33}^c\right](c-c_0) \\
&\quad + \frac{1}{2}C_{11}({e_{11}^c}^2 + {e_{22}^c}^2) + \frac{1}{2}C_{33}{e_{33}^c}^2 + C_{12}e_{11}^c e_{22}^c + C_{13}(e_{22}^c e_{33}^c + e_{33}^c e_{11}^c) + 2C_{44}({e_{23}^c}^2 + {e_{31}^c}^2) + 2C_{66}{e_{12}^c}^2
\end{aligned} \tag{3}
$$

・六方晶および $\eta_{11} = \eta_{22}$ の場合

$C_{11} = C_{22}$, $C_{13} = C_{23}$, $C_{44} = C_{55}$, $C_{66} = (C_{11} - C_{12})/2$ であるから、

$$
\begin{aligned}
E_{str} = {} & \frac{1}{2}\left[2C_{11}\eta_{11}^{2} + C_{33}\eta_{33}^{2} + 2C_{12}\eta_{11}^{2} + 4C_{13}\eta_{11}\eta_{33}\right](c-c_0)^2 \\
& -\left[(C_{11}\eta_{11} + C_{12}\eta_{11} + C_{13}\eta_{33})(e_{11}^{c} + e_{22}^{c}) + (C_{33}\eta_{33} + 2C_{13}\eta_{11})e_{33}^{c}\right](c-c_0) \\
& +\frac{1}{2}C_{11}({e_{11}^{c}}^{2} + {e_{22}^{c}}^{2}) + \frac{1}{2}C_{33}{e_{33}^{c}}^{2} + C_{12}e_{11}^{c}e_{22}^{c} + C_{13}(e_{22}^{c}e_{33}^{c} + e_{33}^{c}e_{11}^{c}) \\
& + 2C_{44}({e_{23}^{c}}^{2} + {e_{31}^{c}}^{2}) + (C_{11} - C_{12}){e_{12}^{c}}^{2}
\end{aligned}
\tag{4}
$$

４．弾性ポテンシャルの理論式

定式化を簡単にするために、弾性率は定数とする。まず弾性歪エネルギーは次式の斜方晶の弾性歪エネルギー式を用いる。

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

式(1)を組成cで微分する。

$$
\begin{aligned}
\mu_{str} = &\left[C_{11}\eta_{11}^2 + C_{22}\eta_{22}^2 + C_{33}\eta_{33}^2 + 2C_{12}\eta_{11}\eta_{22} + 2C_{23}\eta_{22}\eta_{33} + 2C_{13}\eta_{11}\eta_{33}\right](c-c_0) \\
&-\left\{\begin{aligned}&(C_{11}\eta_{11} + C_{12}\eta_{22} + C_{13}\eta_{33})e_{11}^c + (C_{22}\eta_{22} + C_{12}\eta_{11} + C_{23}\eta_{33})e_{22}^c \\ &+(C_{33}\eta_{33} + C_{23}\eta_{22} + C_{13}\eta_{11})e_{33}^c\end{aligned}\right\}
\end{aligned}
\tag{2}
$$

なお正方晶および六方晶($\eta_{11} = \eta_{22}$)では

$$
\begin{aligned}
\mu_{str} &= \left[2C_{11}\eta_{11}^2 + C_{33}\eta_{33}^2 + 2C_{12}\eta_{11}^2 + 4C_{13}\eta_{11}\eta_{33}\right](c-c_0) \\
&\quad -\left[(C_{11}\eta_{11} + C_{12}\eta_{11} + C_{13}\eta_{33})(e_{11}^c + e_{22}^c) + (C_{33}\eta_{33} + 2C_{13}\eta_{11})e_{33}^c\right] \\
&= \left[2(C_{11} + C_{12})\eta_{11}^2 + C_{33}\eta_{33}^2 + 4C_{13}\eta_{11}\eta_{33}\right](c-c_0) \\
&\quad -\left[(C_{11}\eta_{11} + C_{12}\eta_{11} + C_{13}\eta_{33})(e_{11}^c + e_{22}^c) + (C_{33}\eta_{33} + 2C_{13}\eta_{11})e_{33}^c\right]
\end{aligned}
\tag{3}
$$

となる。

５．２次元計算の場合

正方晶および六方晶($\eta_{11}=\eta_{22}$，　$\eta_{33}=0$)では

$$\begin{aligned}\mu_{str} &= \left[C_{11}\eta_{11}^2 + C_{11}\eta_{11}^2 + 2C_{12}\eta_{11}^2\right](c-c_0) - \left[(C_{11}\eta_{11}+C_{12}\eta_{11})e_{11}^c + (C_{11}\eta_{11}+C_{12}\eta_{11})e_{22}^c\right] \\ &= 2(C_{11}+C_{12})\eta_{11}^2(c-c_0) - (C_{11}+C_{12})\eta_{11}(e_{11}^c+e_{22}^c)\end{aligned} \tag{1}$$

正方晶および六方晶($\eta_{22}=0$)では

$$\mu_{str} = \left[C_{11}\eta_{11}^2 + C_{33}\eta_{33}^2 + 2C_{13}\eta_{11}\eta_{33}\right](c-c_0) - \left[(C_{11}\eta_{11}+C_{13}\eta_{33})e_{11}^c + (C_{33}\eta_{33}+C_{13}\eta_{11})e_{33}^c\right] \tag{2}$$