斜方晶の弾性歪エネルギーの理論式

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。

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

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。

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。

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

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、

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

式(7)は最終的に式(9)にて与えられる。

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

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。）、$\dfrac{\partial E_{str}}{\partial \varepsilon_{11}}=0,\quad \dfrac{\partial E_{str}}{\partial \varepsilon_{22}}=0,\quad \dfrac{\partial E_{str}}{\partial \varepsilon_{33}}=0$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。

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

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。

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

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。

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

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。

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

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、

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

・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、

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

・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。

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

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

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