Phase-field 微視力学

（弾性率均質系）

by T.Koyama

１．Phase-field が濃度場のみの場合

格子定数が組成に対して線形である場合、

$$a(\mathbf{r}) = a_0 + \frac{da}{dc}\{c(\mathbf{r}) - c_0\} = a_0 + \frac{da}{dc}\delta c(\mathbf{r}) \tag{1-1}$$

$$\delta c(\mathbf{r}) \equiv c(\mathbf{r}) - c_0 \tag{1-2}$$

であり、この時、eigen 歪は、

$$\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \equiv \frac{a(\mathbf{r}) - a_0}{a_0} = \varepsilon_0 \delta c(\mathbf{r}) \delta_{ij} \tag{1-3}$$

$$\varepsilon_0 = \frac{1}{a_0}\frac{da}{dc} \tag{1-4}$$

にて定義される。また、拘束歪(全歪)を

$$\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \equiv \bar{\varepsilon}_{ij}^c + \delta\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \tag{1-5}$$

$$\int_V \delta\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 0 \tag{1-6}$$

と置き、この拘束歪の平均値からの変動量は、変位場から、線形弾性論に基づき

$$\delta\varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{2}\left\{\frac{\partial u_k(\mathbf{r})}{\partial r_l} + \frac{\partial u_l(\mathbf{r})}{\partial r_k}\right\} \tag{1-7}$$

と導かれる。以上から弾性歪は、全歪から eigen 歪を引いて、

$$\varepsilon_{ij}^{el}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \tag{1-8}$$

にて与えられる。また応力は、フックの法則に基づき、

$$\sigma_{ij}^{el}(\mathbf{r}) = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}^{el}(\mathbf{r}) = C_{ijkl}\{\varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r})\} \tag{1-9}$$

となる。平衡方程式は、各方向の力の釣り合いから

$$\sigma_{ij,j}^{el}(\mathbf{r}) = \frac{\partial\sigma_{ij}^{el}(\mathbf{r})}{\partial r_j} = 0 \tag{1-10}$$

にて与えられる。これに式(1-9),(1-3)および(1-7)を代入し、平衡方程式は、

$$C_{ijkl}\frac{\partial^2 u_k}{\partial r_j \partial r_l} = C_{ijkl}\varepsilon_0\delta_{kl}\frac{\partial\delta c}{\partial r_j} \tag{1-11}$$

と表現できる。ここで、濃度場、変位場、および、拘束歪の変動量場を

$$\delta c(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{k}} \delta c(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \int_{\mathbf{k}} \{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \tag{1-12}$$

$$u_i(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{k}} u_i(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \int_{\mathbf{k}} \{u_i(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \tag{1-13}$$

$$\delta\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{k}} \delta\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \int_{\mathbf{k}} \{\delta\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \tag{1-14}$$

のようにフーリエ表現する。これらを式(1-11)に代入し、振幅部分を取り出すと、

$$\begin{aligned} & C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial r_j \partial r_l} = C_{ijkl}\varepsilon_0\delta_{kl} \frac{\partial \delta c}{\partial r_j} \\ & -C_{ijkl}k_j k_l u_k(\mathbf{k}) = iC_{ijkl}\varepsilon_0\delta_{kl}k_j\delta c(\mathbf{k}) \\ & \therefore\ C_{ijkl}k_j k_l u_k(\mathbf{k}) = -iC_{ijkl}\varepsilon_0\delta_{kl}k_j\delta c(\mathbf{k}) \end{aligned} \tag{1-15}$$

となる。これが平衡方程式のフーリエ表現である。ここで、

$$G_{ik}^{-1}(\mathbf{k}) \equiv C_{ijkl}k_j k_l \tag{1-16}$$

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_0\delta_{kl} \tag{1-17}$$

と置くことにより、変位場のフーリエ変換は、

$$u_k(\mathbf{k}) = -iG_{ik}(\mathbf{k})C_{ijkl}\varepsilon_0\delta_{kl}k_j\delta c(\mathbf{k}) = -iG_{ik}(\mathbf{k})\sigma_{ij}k_j\delta c(\mathbf{k}) \tag{1-18}$$

と表現される。式(1-7)をフーリエ変換すると、

$$\delta\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{k}) = i\frac{1}{2}\{u_i(\mathbf{k})k_j + u_j(\mathbf{k})k_i\} \tag{1-19}$$

であるので、これに式(1-18)を代入して

$$\begin{aligned} \delta\varepsilon_{kl}^c(\mathbf{k}) &= i\frac{1}{2}\{u_k(\mathbf{k})k_l + u_l(\mathbf{k})k_k\} = iu_k(\mathbf{k})k_l \\ &= -iiG_{ik}(\mathbf{k})k_j k_l\sigma_{ij}\delta c(\mathbf{k}) = G_{ik}(\mathbf{k})k_l k_j C_{ijmn}\varepsilon_0\delta_{mn}\delta c(\mathbf{k}) \end{aligned} \tag{1-20}$$

を得る。$\delta\varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r})$はこれをフーリエ変換することによって計算される。
　さて、次に弾性歪エネルギーについて定式化しよう。

$$\begin{aligned} E_{str} &= \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{el}(\mathbf{r})\varepsilon_{kl}^{el}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\left\{\bar{\varepsilon}_{ij}^c + \delta\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r})\right\}\left\{\bar{\varepsilon}_{kl}^c + \delta\varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r})\right\}d\mathbf{r} \end{aligned} \tag{1-21}$$

$$\varepsilon_{ij}^{el}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) = \bar{\varepsilon}_{ij}^c + \delta\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \tag{1-22}$$

である。これを書き下すと、

$$
\begin{aligned}
E_{str} &= \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\left\{\bar{\varepsilon}_{ij}^{c} + \delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r}) - \varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\right\}\left\{\bar{\varepsilon}_{kl}^{c} + \delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})\right\}d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}}\begin{bmatrix} C_{ijkl}\bar{\varepsilon}_{ij}^{c}\bar{\varepsilon}_{kl}^{c} + C_{ijkl}\bar{\varepsilon}_{ij}^{c}\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r}) - C_{ijkl}\bar{\varepsilon}_{ij}^{c}\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r}) \\ +C_{ijkl}\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})\bar{\varepsilon}_{kl}^{c} + C_{ijkl}\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r}) - C_{ijkl}\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r}) \\ -C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\bar{\varepsilon}_{kl}^{c} - C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r}) + C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r}) \end{bmatrix}d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\bar{\varepsilon}_{ij}^{c}\bar{\varepsilon}_{kl}^{c}d\mathbf{r} + \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\bar{\varepsilon}_{ij}^{c}\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})d\mathbf{r} - \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\bar{\varepsilon}_{ij}^{c}\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&\quad + \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})\bar{\varepsilon}_{kl}^{c}d\mathbf{r} + \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})d\mathbf{r} - \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\bar{\varepsilon}_{kl}^{c}d\mathbf{r} - \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\bar{\varepsilon}_{ij}^{c}\bar{\varepsilon}_{kl}^{c}d\mathbf{r} + \frac{1}{2}C_{ijkl}\bar{\varepsilon}_{ij}^{c}\int_{\mathbf{r}}\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})d\mathbf{r} - \frac{1}{2}C_{ijkl}\bar{\varepsilon}_{ij}^{c}\int_{\mathbf{r}}\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&\quad + \frac{1}{2}C_{ijkl}\bar{\varepsilon}_{kl}^{c}\int_{\mathbf{r}}\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})d\mathbf{r} - \frac{1}{2}C_{ijkl}\int_{\mathbf{r}}\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{2}C_{ijkl}\bar{\varepsilon}_{kl}^{c}\int_{\mathbf{r}}\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} - \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2}C_{ijkl}\bar{\varepsilon}_{ij}^{c}\bar{\varepsilon}_{kl}^{c}\int_{\mathbf{r}}d\mathbf{r} + \frac{1}{2}C_{ijkl}\int_{\mathbf{r}}\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} - C_{ijkl}\int_{\mathbf{r}}\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&= \frac{V}{2}C_{ijkl}\bar{\varepsilon}_{ij}^{c}\bar{\varepsilon}_{kl}^{c} + \frac{1}{2}C_{ijkl}\delta_{ij}\delta_{kl}\varepsilon_{0}^{2}\int_{\mathbf{r}}\{\delta c(\mathbf{r})\}^{2}d\mathbf{r} - \frac{1}{2}C_{ijkl}\int_{\mathbf{r}}\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \qquad \text{(1-23)} \\
&= \frac{V}{2}C_{ijkl}\bar{\varepsilon}_{ij}^{c}\bar{\varepsilon}_{kl}^{c} + \frac{V}{2}C_{ijkl}\delta_{ij}\delta_{kl}\varepsilon_{0}^{2}\overline{\{\delta c(\mathbf{r})\}^{2}} - \frac{1}{2}\int_{\mathbf{k}} n_{i}\sigma_{ij}\Omega_{jk}(\mathbf{n})\sigma_{kl}n_{l}\left|\delta c(\mathbf{k})\right|^{2}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^{3}}
\end{aligned}
$$

となる。ここで、$\mathbf{n} \equiv \mathbf{k}/|\mathbf{k}|$であり、

$$
\begin{aligned}
&\int_{\mathbf{r}}\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})d\mathbf{r} = 0 \\
&\int_{\mathbf{r}}\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \delta_{ij}\varepsilon_{0}\int_{\mathbf{r}}\delta c(\mathbf{r})d\mathbf{r} = 0 \\
&\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \qquad \text{(1-24)}
\end{aligned}
$$

を用いた。なお、この最後の式はガウス積分と、平衡方程式および物体表面における力の釣り合い条件(後述)から導かれる。

2. Phase-field が濃度場と規則度場の場合

まず eigen 歪を、

$$\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{0}\delta_{ij}\{\delta c(\mathbf{r})\} + \sum_{p=1}^{N}\varepsilon_{ij}^{s_p}s_{p}^{2}(\mathbf{r}) \qquad \text{(2-1)}$$

と置く。これより、弾性歪は、

$$\varepsilon_{ij}^{el}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r}) - \varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r}) = \bar{\varepsilon}_{ij}^{c} + \delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r}) - \varepsilon_{0}\delta_{ij}\{\delta c(\mathbf{r})\} - \sum_{p=1}^{N}\varepsilon_{ij}^{s_p}s_{p}^{2}(\mathbf{r}) \qquad \text{(2-2)}$$

であるので、弾性歪は、

$$\sigma_{ij}^{el}(\mathbf{r}) = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}^{el}(\mathbf{r}) = C_{ijkl}\{\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})\} \tag{2-3}$$

となる。また各変数のフーリエ表現を、

$$\begin{aligned}
\delta c(\mathbf{r}) &= \int_{\mathbf{k}} \delta c(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \int_{\mathbf{k}} \{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
s_p^2(\mathbf{r}) &= \int_{\mathbf{k}} \{\delta s_p^2(\mathbf{k})\} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \int_{\mathbf{k}} \{\delta s_p^2(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r}) &= \int_{\mathbf{k}} \delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \int_{\mathbf{k}} \{\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
u_i(\mathbf{r}) &= \int_{\mathbf{k}} u_i(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \int_{\mathbf{k}} \{u_i(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}
\end{aligned} \tag{2-4}$$

と置く。以上より、平衡方程式を用いて、変位場のフーリエ変換は、

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial\sigma_{ij}^{el}(\mathbf{r})}{\partial r_j} = \frac{\partial}{\partial r_j}[C_{ijkl}\{\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})\}] = C_{ijkl}\frac{\partial^2 u_k(\mathbf{r})}{\partial r_j \partial r_l} - C_{ijkl}\frac{\partial\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})}{\partial r_j} = 0 \\
&\therefore\ C_{ijkl}\frac{\partial^2 u_k(\mathbf{r})}{\partial r_j \partial r_l} = C_{ijkl}\frac{\partial\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})}{\partial r_j} = C_{ijkl}\varepsilon_0\delta_{kl}\frac{\partial\delta c(\mathbf{r})}{\partial r_j} + C_{ijkl}\sum_{p=1}^{N}\varepsilon_{kl}^{s_p}\frac{\partial s_p^2(\mathbf{r})}{\partial r_j} \\
&\quad C_{ijkl}k_j k_l u_k(\mathbf{k}) = -iC_{ijkl}\varepsilon_0\delta_{kl}k_j\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}} - ik_j\sum_{p=1}^{N}C_{ijkl}\varepsilon_{kl}^{s_p}\{s_p^2(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}} \\
&\quad u_k(\mathbf{k}) = -iG_{ik}(\mathbf{k})C_{ijkl}\varepsilon_0\delta_{kl}k_j\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}} - iG_{ik}(\mathbf{k})k_j\sum_{p=1}^{N}C_{ijkl}\varepsilon_{kl}^{s_p}\{s_p^2(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}} \\
&\qquad\quad = -iG_{ik}(\mathbf{k})\sigma_{ij}^{c}k_j\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}} - iG_{ik}(\mathbf{k})k_j\sum_{p=1}^{N}\sigma_{ij}^{s_p}\{s_p^2(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}
\end{aligned} \tag{2-5}$$

となるので、拘束歪の変動量場のフーリエ変換は、

$$\begin{aligned}
\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{k}) &= i\frac{1}{2}\{u_k(\mathbf{k})k_l + u_l(\mathbf{k})k_k\} = iu_k(\mathbf{k})k_l \\
&= G_{ik}(\mathbf{k})\sigma_{ij}^{c}k_j k_l\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}} + G_{ik}(\mathbf{k})k_j k_l\sum_{p=1}^{N}\sigma_{ij}^{s_p}\{s_p^2(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}
\end{aligned} \tag{2-6}$$

にて与えられる。

　さて、弾性歪エネルギーを求めよう。弾性歪エネルギーは、

$$
\begin{aligned}
E_{str} &= \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{el}(\mathbf{r})\varepsilon_{kl}^{el}(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^{el}(\mathbf{r})\varepsilon_{ij}^{el}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^{el}(\mathbf{r})\{\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})-\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\}d\mathbf{r} = \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^{el}(\mathbf{r})\{\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}+\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})-\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\}d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^{el}(\mathbf{r})\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}d\mathbf{r} + \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^{el}(\mathbf{r})\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})d\mathbf{r} - \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^{el}(\mathbf{r})\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^{el}(\mathbf{r})\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}d\mathbf{r} + \frac{1}{2}\int_{\mathbf{s}} \sigma_{ij}^{el}(\mathbf{r}_{\mathbf{s}})u_i(\mathbf{r}_{\mathbf{s}})n_j(\mathbf{r}_{\mathbf{s}})d\mathbf{s} - \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij,j}^{el}(\mathbf{r})u_i(\mathbf{r}_{\mathbf{s}})d\mathbf{r} - \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^{el}(\mathbf{r})\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^{el}(\mathbf{r})\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}d\mathbf{r} - \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^{el}(\mathbf{r})\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\varepsilon_{kl}^{el}(\mathbf{r})\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}d\mathbf{r} - \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\varepsilon_{kl}^{el}(\mathbf{r})\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\{\overline{\varepsilon}_{kl}^{c}+\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})-\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})\}\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}d\mathbf{r} - \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\{\overline{\varepsilon}_{kl}^{c}+\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})-\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})\}\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\overline{\varepsilon}_{kl}^{c}\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}d\mathbf{r} + \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}d\mathbf{r} - \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}d\mathbf{r} - \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\overline{\varepsilon}_{kl}^{c}\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&\quad + \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} - \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}\overline{\varepsilon}_{kl}^{c}d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})d\mathbf{r}
\end{aligned} \tag{2-7}
$$

と表現できる。この初めの３項を書き下すと、

$$
\begin{aligned}
&\frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}\overline{\varepsilon}_{kl}^{c}d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}\overline{\varepsilon}_{kl}^{c}d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}\left\{\varepsilon_0\delta_{kl}\{\delta c(\mathbf{r})\} + \sum_{p=1}^{N}\varepsilon_{kl}^{s_p}s_p^2(\mathbf{r})\right\}d\mathbf{r} \\
&\quad + \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} \left\{\varepsilon_0\delta_{ij}\{\delta c(\mathbf{r})\} + \sum_{p=1}^{N}\varepsilon_{ij}^{s_p}s_p^2(\mathbf{r})\right\}\left\{\varepsilon_0\delta_{kl}\{\delta c(\mathbf{r})\} + \sum_{p=1}^{N}\varepsilon_{kl}^{s_p}s_p^2(\mathbf{r})\right\}d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}\overline{\varepsilon}_{kl}^{c}d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}\varepsilon_0\delta_{kl}\{\delta c(\mathbf{r})\}d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}\sum_{p=1}^{N}\varepsilon_{kl}^{s_p}s_p^2(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&\quad + \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} \varepsilon_0^2\delta_{ij}\delta_{kl}\{\delta c(\mathbf{r})\}^2d\mathbf{r} + \int_{\mathbf{r}} \varepsilon_0\delta_{kl}\{\delta c(\mathbf{r})\}\sum_{p=1}^{N}\varepsilon_{ij}^{s_p}s_p^2(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} \sum_{p,q=1}^{N}\varepsilon_{ij}^{s_p}\varepsilon_{kl}^{s_p}s_p^2(\mathbf{r})s_q^2(\mathbf{r})d\mathbf{r}
\end{aligned} \tag{2-8}
$$

である。また式(2-7)の最後の項は、

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&=\frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\left\{\varepsilon_0\delta_{ij}\{\delta c(\mathbf{r})\}+\sum_{p=1}^{N}\varepsilon_{ij}^{s_p}s_p^2(\mathbf{r})\right\}\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&=\frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\varepsilon_0\delta_{ij}\{\delta c(\mathbf{r})\}\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})d\mathbf{r}+\frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\sum_{p=1}^{N}\varepsilon_{ij}^{s_p}\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})s_p^2(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&=\frac{1}{2}C_{ijkl}\varepsilon_0\delta_{ij}\int_{\mathbf{k}}\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\delta\varepsilon_{kl}^{c}(-\mathbf{k})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}+\frac{1}{2}\sum_{p=1}^{N}C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{s_p}\int_{\mathbf{k}}\{\delta s_p^2(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\delta\varepsilon_{kl}^{c}(-\mathbf{k})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&=\frac{1}{2}\int_{\mathbf{k}}\left[C_{ijkl}\varepsilon_0\delta_{ij}\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}+\sum_{p=1}^{N}C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{s_p}\{\delta s_p^2(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\right]\delta\varepsilon_{kl}^{c}(-\mathbf{k})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&=\frac{1}{2}\int_{\mathbf{k}}\left[\sigma_{kl}^{c}\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}+\sum_{p=1}^{N}\sigma_{kl}^{s_p}\{\delta s_p^2(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\right]\left[G_{ik}(-\mathbf{k})\sigma_{ij}^{c}k_jk_l\{\delta c(\mathbf{r})\}_{-\mathbf{k}}+G_{ik}(-\mathbf{k})k_jk_l\sum_{p=1}^{N}\sigma_{ij}^{s_p}\{s_p^2(\mathbf{r})\}_{-\mathbf{k}}\right]\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&=\frac{1}{2}\int_{\mathbf{k}}G_{ik}(\mathbf{k})k_jk_l\left[\sigma_{kl}^{c}\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}+\sum_{p=1}^{N}\sigma_{kl}^{s_p}\{\delta s_p^2(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\right]\left[\sigma_{ij}^{c}\{\delta c(\mathbf{r})\}_{-\mathbf{k}}+\sum_{p=1}^{N}\sigma_{ij}^{s_p}\{s_p^2(\mathbf{r})\}_{-\mathbf{k}}\right]\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&=\frac{1}{2}\int_{\mathbf{k}}k_j\sigma_{ij}^{c}G_{ik}(\mathbf{k})\sigma_{kl}^{c}k_l\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\{\delta c(\mathbf{r})\}_{-\mathbf{k}}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}+\frac{1}{2}\sum_{p,q=1}^{N}\int_{\mathbf{k}}k_j\sigma_{ij}^{s_p}G_{ik}(\mathbf{k})\sigma_{kl}^{s_q}k_l\{\delta s_p^2(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\{s_q^2(\mathbf{r})\}_{-\mathbf{k}}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&\quad+\frac{1}{2}\sum_{p=1}^{N}\int_{\mathbf{k}}k_j\sigma_{ij}^{s_p}G_{ik}(\mathbf{k})\sigma_{kl}^{c}k_l\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\{s_p^2(\mathbf{r})\}_{-\mathbf{k}}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}+\frac{1}{2}\sum_{p=1}^{N}\int_{\mathbf{k}}k_j\sigma_{ij}^{c}G_{ik}(\mathbf{k})\sigma_{kl}^{s_p}k_l\{\delta s_p^2(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\{\delta c(\mathbf{r})\}_{-\mathbf{k}}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&=\frac{1}{2}\int_{\mathbf{k}}k_j\sigma_{ij}^{c}G_{ik}(\mathbf{k})\sigma_{kl}^{c}k_l\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\{\delta c(\mathbf{r})\}_{-\mathbf{k}}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}+\frac{1}{2}\sum_{p,q=1}^{N}\int_{\mathbf{k}}k_j\sigma_{ij}^{s_p}G_{ik}(\mathbf{k})\sigma_{kl}^{s_q}k_l\{\delta s_p^2(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\{s_q^2(\mathbf{r})\}_{-\mathbf{k}}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&\quad+\sum_{p=1}^{N}\int_{\mathbf{k}}k_j\sigma_{ij}^{s_p}G_{ik}(\mathbf{k})\sigma_{kl}^{c}k_l\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\{s_p^2(\mathbf{r})\}_{-\mathbf{k}}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}
\end{aligned} \tag{2-9}$$

となる。式の変形において、

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbf{r}}\delta c(\mathbf{r})\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})d\mathbf{r}&=\int_{\mathbf{r}}\left[\int_{\mathbf{k}}\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\right]\left[\int_{\mathbf{k}}\delta\varepsilon_{kl}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\right]d\mathbf{r} \\
&=\int_{\mathbf{k}}\int_{\mathbf{k}'}\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\delta\varepsilon_{kl}(\mathbf{k}')\left[\int_{\mathbf{r}}\exp\{i(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}\}d\mathbf{r}\right]\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \\
&=\int_{\mathbf{k}}\int_{\mathbf{k}'}\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\delta\varepsilon_{kl}(\mathbf{k}')\delta(\mathbf{k}+\mathbf{k}')\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \\
&=\int_{\mathbf{k}}\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\delta\varepsilon_{kl}(-\mathbf{k})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}
\end{aligned} \tag{2-10}$$

$$\int_{\mathbf{r}}\sum_{p=1}^{N}\varepsilon_{ij}^{s_p}s_p^2(\mathbf{r})\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})d\mathbf{r}=\sum_{p=1}^{N}\varepsilon_{ij}^{s_p}\int_{\mathbf{k}}\{\delta s_p^2(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\delta\varepsilon_{kl}(-\mathbf{k})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \tag{2-11}$$

を用いた。式(2-8)(2-9)を式(2-7)に代入し整理すると、

$$
\begin{aligned}
E_{str} &= \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\bar{\varepsilon}_{ij}^{c}\bar{\varepsilon}_{kl}^{c}d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\bar{\varepsilon}_{ij}^{c}\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r} - \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\bar{\varepsilon}_{ij}^{c}\bar{\varepsilon}_{kl}^{c}d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\bar{\varepsilon}_{ij}^{c}\varepsilon_{0}\delta_{kl}\{\delta c(\mathbf{r})\}d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\bar{\varepsilon}_{ij}^{c}\sum_{p=1}^{N}\varepsilon_{kl}^{s_p}s_p^2(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&\quad + \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} \varepsilon_0^2\delta_{ij}\delta_{kl}\{\delta c(\mathbf{r})\}^2 d\mathbf{r} + \int_{\mathbf{r}} \varepsilon_0\delta_{kl}\{\delta c(\mathbf{r})\}\sum_{p=1}^{N}\varepsilon_{ij}^{s_p}s_p^2(\mathbf{r})d\mathbf{r} + \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}}\sum_{p,q=1}^{N}\varepsilon_{ij}^{s_p}\varepsilon_{kl}^{s_p}s_p^2(\mathbf{r})s_q^2(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{2}\int_{\mathbf{k}} k_j\sigma_{ij}^{c}G_{ik}(\mathbf{k})\sigma_{kl}^{c}k_l\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\{\delta c(\mathbf{r})\}_{-\mathbf{k}}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&\quad - \sum_{p=1}^{N}\int_{\mathbf{k}} k_j\sigma_{ij}^{s_p}G_{ik}(\mathbf{k})\sigma_{kl}^{c}k_l\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\{s_p^2(\mathbf{r})\}_{-\mathbf{k}}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&\quad - \frac{1}{2}\sum_{p,q=1}^{N}\int_{\mathbf{k}} k_j\sigma_{ij}^{s_p}G_{ik}(\mathbf{k})\sigma_{kl}^{s_q}k_l\{\delta s_p^2(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\{s_q^2(\mathbf{r})\}_{-\mathbf{k}}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= \frac{V}{2}C_{ijkl}\bar{\varepsilon}_{ij}^{c}\bar{\varepsilon}_{kl}^{c} - V\bar{\varepsilon}_{ij}^{c}\sum_{p=1}^{N}C_{ijkl}\varepsilon_{kl}^{s_p}\overline{s_p^2} + \frac{V}{2}C_{ijkl}\varepsilon_0^2\delta_{ij}\delta_{kl}\overline{(\delta c)^2} \\
&\quad + VC_{ijkl}\delta_{ij}\varepsilon_0\sum_{p=1}^{N}\varepsilon_{kl}^{s_p}\overline{(\delta c)s_p^2} + \frac{V}{2}C_{ijkl}\sum_{p,q=1}^{N}\varepsilon_{ij}^{s_p}\varepsilon_{kl}^{s_q}\overline{s_p^2 s_q^2} \\
&\quad - \frac{1}{2}\int_{\mathbf{k}} k_j\sigma_{ij}^{c}G_{ik}(\mathbf{k})\sigma_{kl}^{c}k_l\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\{\delta c(\mathbf{r})\}_{-\mathbf{k}}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&\quad - \sum_{p=1}^{N}\int_{\mathbf{k}} k_j\sigma_{ij}^{s_p}G_{ik}(\mathbf{k})\sigma_{kl}^{c}k_l\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\{s_p^2(\mathbf{r})\}_{-\mathbf{k}}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&\quad - \frac{1}{2}\sum_{p,q=1}^{N}\int_{\mathbf{k}} k_j\sigma_{ij}^{s_p}G_{ik}(\mathbf{k})\sigma_{kl}^{s_q}k_l\{\delta s_p^2(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\{s_q^2(\mathbf{r})\}_{-\mathbf{k}}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}
\end{aligned} \tag{2-12}
$$

となる。

３．均一歪場の決定法について

均一歪は、主として以下の４種類の境界条件に基づき決定することができる。

（１）物体全体の境界が固定され、かつ外部から何の作用も受けていない場合

境界が固定されているので、均一歪は許されない。したがって、

$$\bar{\varepsilon}_{ij}^{c} = 0 \tag{3-1}$$

である。

（２）物体に一定の均一外部歪が作用している場合

これは例えば、固溶体状態にある物体の境界が固定されており、かつ熱膨張等によって、固溶体が均一に膨張・収縮した状態を初期状態として相分解が生じるような場合である。この場合、固溶体に初期に導入されている均一歪を $\bar{\varepsilon}_{ij}^{a}$ とすると、

$$\bar{\varepsilon}_{ij}^{c} = \bar{\varepsilon}_{ij}^{a} \tag{3-2}$$

と置くことによって計算することができる。

（３）物体全体の境界が固定されていない場合（外力がない場合）

この場合、物体は自由に膨張･収縮することができる。したがって、定常状態における均一歪は、

$$\frac{\partial E_{str}}{\partial \overline{\varepsilon}_{ij}^{c}} = 0 \tag{3-3}$$

の条件を満足する。具体的に、この式に式(2-12)を代入して、均一歪を

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_{str}}{\partial \overline{\varepsilon}_{ij}^{c}} &= VC_{ijkl}\overline{\varepsilon}_{kl}^{c} - V\sum_{p=1}^{N} C_{ijkl}\varepsilon_{kl}^{s_p}\overline{s_p^2} = 0 \\ \therefore\ \overline{\varepsilon}_{kl}^{c} &= \sum_{p=1}^{N} \varepsilon_{kl}^{s_p}\overline{s_p^2} \end{aligned} \tag{3-4}$$

のように決定することができる。

（４）物体全体の境界が固定されていない場合（外力が作用している場合）
この場合、まず物体のギブス自由エネルギーが、

$$G = E_{str} - V\sigma_{ij}^{a}\overline{\varepsilon}_{ij}^{c} \tag{3-5}$$

にて与えられる。定常状態における均一歪は、（３）の時と同じように

$$\frac{\partial G}{\partial \overline{\varepsilon}_{ij}^{c}} = 0 \tag{3-6}$$

の条件を満足するので、具体的に、この式に式(3-5)と(2-12)を代入して、均一歪は

$$\begin{aligned} \frac{\partial G}{\partial \overline{\varepsilon}_{ij}^{c}} &= VC_{ijkl}\overline{\varepsilon}_{kl}^{c} - V\sum_{p=1}^{N} C_{ijkl}\varepsilon_{kl}^{s_p}\overline{s_p^2} - V\sigma_{ij}^{a} = 0 \\ \therefore\ \overline{\varepsilon}_{kl}^{c} &= C_{ijkl}^{-1}\sigma_{ij}^{a} + \sum_{p=1}^{N} \varepsilon_{kl}^{s_p}\overline{s_p^2} \end{aligned} \tag{3-7}$$

のように決定される。C_{ijkl}^{-1} は C_{ijkl} の逆行列であり、弾性コンプライアンス S_{ijkl} に等しい。

以上のように、境界条件から均一歪場が決定できる。得られた均一歪を用いて、弾性歪エネルギーおよびギブス自由エネルギー等を求めることができる。

４．弾性ポテンシャルについて

弾性歪エネルギーの phase-field 変数による微分を弾性ポテンシャルと呼ぶことにする。弾性歪エネルギーを phase-field 変数にて微分する場合、弾性歪エネルギーの表現において、平衡方程式がすでに使用されている表現であるか、そうでないかが非常に重要となる。式(2-8)より、

[平衡方程式が使用されていない表現]

$$E_{str} = \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{el}(\mathbf{r})\varepsilon_{kl}^{el}(\mathbf{r})d\mathbf{r} = \frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}} C_{ijkl}\{\overline{\varepsilon}_{ij}^{c} + \delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r}) - \varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\}\{\overline{\varepsilon}_{kl}^{c} + \delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})\}d\mathbf{r} \tag{4-1}$$

[平衡方程式がすでに使用されている表現]

$$E_{str}=\frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}}C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{el}(\mathbf{r})\varepsilon_{kl}^{el}(\mathbf{r})d\mathbf{r}=\frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}}C_{ijkl}\varepsilon_{kl}^{el}(\mathbf{r})\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}d\mathbf{r}-\frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}}C_{ijkl}\varepsilon_{kl}^{el}(\mathbf{r})\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})d\mathbf{r}$$
$$=\frac{1}{2}\int_{\mathbf{r}}C_{ijkl}\{\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}-\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\}\{\overline{\varepsilon}_{kl}^{c}+\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})-\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})\}d\mathbf{r} \tag{4-2}$$

である。式(4-1)の段階では$\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})$は phase-field 変数に依存しない独立変数であるが、式(4-2)の段階では$\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})$は phase-field 変数に依存する従属変数となっている。これは平衡方程式が$\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})$と phase-field 変数の間に関係を与えるからである。したがって、弾性ポテンシャルを求める場合、式(4-1)を使用すれば、$\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r})$の phase-field 変数による微分は０とすることができるが、式(4-2)では０にならない。勿論いずれの場合であっても最終的な結果は等しくなるが、弾性ポテンシャルの導出においては式(4-1)を用いた方が、実際に定式化が簡単である。式(4-1)を微分すると、

$$\frac{\partial E_{str}}{\partial\varepsilon_{ij}^{0}}=-C_{ijkl}\{\overline{\varepsilon}_{kl}^{c}+\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})-\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})\} \tag{4-3}$$

が得られ、式(4-2)を微分すると、

$$\begin{aligned}\frac{\partial E_{str}}{\partial\varepsilon_{ij}^{0}}&=-\frac{1}{2}C_{ijkl}\{\overline{\varepsilon}_{kl}^{c}+\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})-\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})\}+\frac{1}{2}C_{ijkl}\{\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}-\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\}\left\{\frac{\partial\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})}{\partial\varepsilon_{ij}^{0}}-1\right\}\\
&=-C_{ijkl}\{\overline{\varepsilon}_{kl}^{c}-\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})\}-\frac{1}{2}C_{ijkl}\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})+\frac{1}{2}C_{ijkl}\{\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}-\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\}\frac{\partial\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})}{\partial\varepsilon_{ij}^{0}}\\
&=-C_{ijkl}\{\overline{\varepsilon}_{kl}^{c}-\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})\}-\frac{1}{2}C_{ijkl}\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})+\frac{1}{2}C_{ijkl}\{\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}-\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\}\frac{\partial\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})}{\partial\{\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}-\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\}}\frac{\partial\{\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}-\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\}}{\partial\varepsilon_{ij}^{0}}\\
&=-C_{ijkl}\{\overline{\varepsilon}_{kl}^{c}-\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})\}-\frac{1}{2}C_{ijkl}\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})-\frac{1}{2}C_{ijkl}\{\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}-\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\}\frac{\partial\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})}{\partial\{\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}-\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})\}}\\
&=-C_{ijkl}\{\overline{\varepsilon}_{kl}^{c}-\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})\}-\frac{1}{2}C_{ijkl}\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})-\frac{1}{2}C_{ijkl}\{\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})-\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}\}\frac{\partial\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})}{\partial\{\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})-\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}\}}\\
&=-C_{ijkl}\{\overline{\varepsilon}_{kl}^{c}+\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})-\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r})\}\end{aligned} \tag{4-4}$$

となり両者は同一の結果を与える。この最後の変形の根拠を以下に説明する。基本的に平衡方程式によって、$\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})$は$\{\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})-\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}\}$の関数として表現される。実際のシミュレーション計算では差分が用いられているので、局所的には$\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})$が$\{\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})-\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}\}$の線形関数として表現されることになる（$\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})$の空間平均はその定義から 0 であるので、物理的に$\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})$は$\{\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})-\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}\}$の線形関数と置かれる。また$\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})=\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}$では$\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})=0$であるので、$\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})$に定数項は存在しない）。つまり差分計算において$\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})$は$\{\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})-\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}\}$の関数として局所的に、

$$\frac{\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})}{\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})-\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}}=\frac{\partial\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})}{\partial\{\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})-\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}\}}$$
$$\therefore\ \{\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})-\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}\}\frac{\partial\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r})}{\partial\{\varepsilon_{ij}^{0}(\mathbf{r})-\overline{\varepsilon}_{ij}^{c}\}}=\delta\varepsilon_{kl}^{c}(\mathbf{r}) \tag{4-5}$$

と近似されることになる。
　いずれにしても、ポテンシャル場を導出する際に、変分原理（平衡方程式）をいつ用いるかとい問題である。重要な点は平衡方程式は、現象論的な仮定であり、普遍的原理ではない点である。あくまで平衡方程式は、弾性歪場の秩序変数が、他の秩序変数よりも、圧倒的に緩和時間が短いと考えられる場合に、近似的に成立する式である。したがって、やはり定式化としては、弾性歪場を独立変数として扱い定式化をすすめ、現象論的な仮定はできる限り、後半で使用することが望ましいと考えられる。
　具体的に、ポテンシャル場求めて見よう。

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial E_{str}}{\partial c} &= \frac{\partial E_{str}}{\partial \varepsilon_{ij}^0}\frac{\partial \varepsilon_{ij}^0}{\partial c} = -C_{ijkl}\varepsilon_{kl}^{el}(\mathbf{r})\frac{\partial \varepsilon_{ij}^0}{\partial c} \\
&= -C_{ijkl}\{\bar{\varepsilon}_{kl}^c + \delta\varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r})\}\frac{\partial \varepsilon_{ij}^0}{\partial c} = -C_{ijkl}\varepsilon_0\delta_{ij}\{\bar{\varepsilon}_{kl}^c + \delta\varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r})\} \\
\frac{\partial E_{str}}{\partial s_p} &= \frac{\partial E_{str}}{\partial \varepsilon_{ij}^0}\frac{\partial \varepsilon_{ij}^0}{\partial s_p} = -C_{ijkl}\varepsilon_{kl}^{el}(\mathbf{r})\frac{\partial \varepsilon_{ij}^0}{\partial s_p} \\
&= -C_{ijkl}\{\bar{\varepsilon}_{kl}^c + \delta\varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r})\}\frac{\partial \varepsilon_{ij}^0}{\partial s_p} = -2C_{ijkl}\varepsilon_{ij}^{s_p}\{\bar{\varepsilon}_{kl}^c + \delta\varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r})\}s_p(\mathbf{r})
\end{aligned}
\tag{4-6}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \varepsilon_{ij}^0}{\partial c} &= \varepsilon_0\delta_{ij} \\
\frac{\partial \varepsilon_{ij}^0}{\partial s_p} &= 2\varepsilon_{ij}^{s_p}s_p(\mathbf{r})
\end{aligned}
\tag{4-7}
$$

と計算される。
　また拘束歪の変動量は、

$$
\begin{aligned}
\delta\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) &= \int_{\mathbf{k}} \delta\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= \int_{\mathbf{k}} \left[G_{ik}(\mathbf{k})\sigma_{kl}^c k_j k_l\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}} + G_{ik}(\mathbf{k})k_j k_l\sum_{p=1}^{N}\sigma_{kl}^{s_p}\{s_p^2(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}} \right]\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= \int_{\mathbf{k}} G_{ik}(\mathbf{k})k_j k_l\left[\sigma_{kl}^c\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}} + \sum_{p=1}^{N}\sigma_{kl}^{s_p}\{s_p^2(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}} \right]\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= \int_{\mathbf{k}} G_{ik}(\mathbf{n})n_j n_l\left[\sigma_{kl}^c\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}} + \sum_{p=1}^{N}\sigma_{kl}^{s_p}\{s_p^2(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}} \right]\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}
\end{aligned}
\tag{4-8}
$$

である。

５．eigen 応力のフーリエ変換を利用した定式化

　ここで eigen 応力について考えて見よう。eigen 応力は eigen 歪分だけ弾性変形した時の応力で定義される。したがって、eigen 歪が式(2-1)によって表現されている場合、eigen 応力 $\sigma_{ij}^0(\mathbf{r})$ は、フックの法則に基づき、

$$\sigma_{ij}^{0}(\mathbf{r}) = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}^{0}(\mathbf{r}) = C_{ijkl}\left[\varepsilon_0\delta_{kl}\{\delta c(\mathbf{r})\} + \sum_{p=1}^{N}\varepsilon_{kl}^{s_p}s_p^2(\mathbf{r})\right]$$
$$= C_{ijkl}\varepsilon_0\delta_{kl}\{\delta c(\mathbf{r})\} + \sum_{p=1}^{N}C_{ijkl}\varepsilon_{kl}^{s_p}s_p^2(\mathbf{r}) = \sigma_{ij}^{c}\{\delta c(\mathbf{r})\} + \sum_{p=1}^{N}\sigma_{ij}^{s_p}s_p^2(\mathbf{r}) \tag{5-1}$$

と表される。これより、$\sigma_{ij}^{0}(\mathbf{r})$ のフーリエ変換$\{\sigma_{ij}^{0}(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}$ は、

$$\{\sigma_{ij}^{0}(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}} = \int_{\mathbf{r}}\sigma_{ij}^{0}(\mathbf{r})\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r}$$
$$= \int_{\mathbf{r}}\left[\sigma_{ij}^{c}\{\delta c(\mathbf{r})\} + \sum_{p=1}^{N}\sigma_{ij}^{s_p}s_p^2(\mathbf{r})\right]\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r}$$
$$= \int_{\mathbf{r}}\sigma_{ij}^{c}\{\delta c(\mathbf{r})\}\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r} + \sum_{p=1}^{N}\int_{\mathbf{r}}\sigma_{ij}^{s_p}s_p^2(\mathbf{r})\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r} \tag{5-2}$$
$$= \sigma_{ij}^{c}\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}} + \sum_{p=1}^{N}\sigma_{ij}^{s_p}\{s_p^2(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}$$

となる。これを式(4-8)に代入すると、

$$\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{k}}\delta\varepsilon_{ij}^{c}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$
$$= \int_{\mathbf{k}}G_{ik}(\mathbf{n})n_jn_l\left[\sigma_{kl}^{c}\{\delta c(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}} + \sum_{p=1}^{N}\sigma_{kl}^{s_p}\{s_p^2(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\right]\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \tag{5-3}$$
$$= \int_{\mathbf{k}}G_{ik}(\mathbf{n})n_jn_l\{\sigma_{kl}^{0}(\mathbf{r})\}_{\mathbf{k}}\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

が得られる。これは実は非常に重要なことを意味している。すなわち、拘束歪を数値計算によって導出する際、通常は、個々の秩序変数をフーリエ変換した後、式(4-8)に基づき拘束歪を導出していたが、eigen 応力のフーリエ変換を利用すると、式(5-3)によって拘束歪が計算できることになる。特に秩序変数の種類が多い(６種以上)場合には、フーリエ変換の回数が減少するので、数値計算的に有効な計算手法となる。