６．具体的な数値計算法

6-1 $Y_{<hkl>}$ の導出法

　Cahnのスピノーダル分解理論における弾性関数$Y_{<hkl>}$の導出を行う。まず(hkl)面上に存在する整合な板状析出物を考え、結晶構造は立方晶とし、歪場はpure dilatationとする。また、eigen歪の値をe_{ij}^Tとする。

　以上の仮定から、歪テンソルは以下のように与えられる。εは濃度cの関数で、Vegard則が成立する場合、$\varepsilon = \eta_0(c - c_0)$にて与えられる。$\eta_0$は格子ミスマッチで、$c_0$は合金の平均組成である。本来、eigen歪の基準は純物質の格子定数が基準となるが、ここでは基準を組成c_0の固溶体にしている。これは、物体全体の応力の総和が０になるように鏡像応力を考慮することによって、弾性歪の基準が純物質から組成c_0の固溶体に移行するためである。端的に言えば、組成c_0の固溶体を歪の基準に取らなくては、全応力が０にならない。

$$e_{ij}^T = \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix} \tag{6-1-1}$$

また弾性定数は立方晶を考えているので、以下のように与えられる。

$$C_{ij} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{pmatrix} \tag{6-1-2}$$

まず始めに、等方弾性論に基づき、完全拘束状態における弾性歪エネルギーE_1を求めると以下のように計算される。

$$E_1 = \frac{1}{2} C_{ijkl} e_{ij}^T e_{kl}^T = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} C_{1111} e_{11}^{T\,2} + C_{2222} e_{22}^{T\,2} + C_{3333} e_{33}^{T\,2} \\ + C_{1122} e_{11}^T e_{22}^T + C_{1133} e_{11}^T e_{33}^T + C_{2211} e_{22}^T e_{11}^T \\ + C_{2233} e_{22}^T e_{33}^T + C_{3311} e_{33}^T e_{11}^T + C_{3322} e_{33}^T e_{22}^T \end{pmatrix} \tag{6-1-3}$$

$$= \frac{3}{2}(C_{11} + 2C_{12})\varepsilon^2$$

さて、ここで任意の$< hkl >$方向をx'方向と記す。またx'方向に垂直な２つの方向をy'およびz'とし、$x'\,y'\,z'$座標系における弾性定数を$C_{ij}^{'}$と記す。

　今、x'方向ににのみ応力の緩和が生じたと考える。等方弾性論に基づきx'方向への応力$\sigma_{x'}$は次式にて与えられる。

$$\sigma_{x'} = C_{1111} e_{11}^T + C_{1122} e_{22}^T + C_{1133} e_{33}^T = \varepsilon(C_{11} + 2C_{12}) \tag{6-1-4}$$

これは、今、静水圧を考えていることになるので、応力は全ての方向に対し等しい。したがって、式(6-1-4)のようにある１つの方向における応力を任意の方向における応力とすることが出来るのである。

さて、$\sigma_{x'}$の応力が加わって、x'方向にのみ歪の緩和が生じた場合、その時の緩和による歪量$\varepsilon_{x'}$は、以下のように導かれる。まず、$\sigma_{x'} = C'_{11}\varepsilon_{x'} + C'_{12}\varepsilon_{y'} + C'_{13}\varepsilon_{z'} = C'_{11}\varepsilon_{x'}$（$y'$および$z'$方向に歪の緩和は生じないと仮定したので、$\varepsilon_{y'} = \varepsilon_{z'} = 0$である.）および式(6-1-4)より

$$\varepsilon_{x'} = \frac{\sigma_{x'}}{C'_{11}} = \frac{\varepsilon(C_{11} + 2C_{12})}{C'_{11}} \tag{6-1-5}$$

である。これより、$\varepsilon_{x'}$による弾性歪エネルギーの減少量E_2は、次式にて与えられる。

$$E_2 = \frac{1}{2}\sigma_{x'}\varepsilon_{x'} = \frac{1}{2}\varepsilon^2 \frac{(C_{11} + 2C_{12})^2}{C'_{11}} \tag{6-1-6}$$

式(6-1-3)および式(6-1-6)から弾性歪エネルギーE_{str}は次式に与えられる。

$$E_{str} = E_1 - E_2 = \frac{3}{2}(C_{11} + 2C_{12})\varepsilon^2 - \frac{1}{2}\varepsilon^2 \frac{(C_{11} + 2C_{12})^2}{C'_{11}} = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{2}\varepsilon^2 \left[3 - \frac{C_{11} + 2C_{12}}{C'_{11}}\right] \tag{6-1-7}$$

ここで、C'_{11}をC_{11}, C_{12}, C_{44}を用いて書き直す。(xyz)および$(x'\,y'\,z')$両座標間の方向余弦l_{ij}を以下のように定義する。

$$\begin{array}{cccc} & x & y & z \\ x' & l_{11} & l_{12} & l_{13} \\ y' & l_{21} & l_{22} & l_{23} \\ z' & l_{31} & l_{32} & l_{33} \end{array} \tag{6-1-8}$$

ここで座標変換については次の理論式を用いる。

$$C'_{ijkl} = l_{ig} l_{jh} l_{km} l_{ln} C_{ghmn} \tag{6-1-9}$$

式(6-1-9)より、$C'_{1111} = C'_{11} = l_{1g} l_{1h} l_{1m} l_{1n} C_{ghmn}$である。ここで、

$$\begin{aligned}
& l_{1g} l_{1h} l_{1m} l_{1n} C_{ghmn} \\
&= l_{11}l_{11}l_{11}l_{11}C_{1111} + l_{12}l_{12}l_{12}l_{12}C_{2222} + l_{13}l_{13}l_{13}l_{13}C_{3333} \\
&\quad + l_{11}l_{11}l_{12}l_{12}C_{1122} + l_{11}l_{11}l_{13}l_{13}C_{1133} + l_{12}l_{12}l_{11}l_{11}C_{2211} + l_{12}l_{12}l_{13}l_{13}C_{2233} + l_{13}l_{13}l_{11}l_{11}C_{3311} + l_{13}l_{13}l_{12}l_{12}C_{3322} \\
&\quad + l_{11}l_{12}l_{11}l_{12}C_{1212} + l_{11}l_{12}l_{12}l_{11}C_{1221} + l_{12}l_{11}l_{11}l_{12}C_{2112} + l_{12}l_{11}l_{12}l_{11}C_{2121} \\
&\quad + l_{11}l_{13}l_{11}l_{13}C_{1313} + l_{11}l_{13}l_{13}l_{11}C_{1331} + l_{13}l_{11}l_{11}l_{13}C_{3113} + l_{13}l_{11}l_{13}l_{11}C_{3131} \\
&\quad + l_{12}l_{13}l_{12}l_{13}C_{2323} + l_{12}l_{13}l_{13}l_{12}C_{2332} + + l_{13}l_{12}l_{12}l_{13}C_{3223} + l_{13}l_{12}l_{13}l_{12}C_{3232} \\
&= C_{11}l_{11}^4 + C_{11}l_{12}^4 + C_{11}l_{13}^4 + 2C_{12}l_{11}^2l_{12}^2 + 2C_{12}l_{11}^2l_{13}^2 + 2C_{12}l_{12}^2l_{13}^2 + 4C_{44}l_{11}^2l_{12}^2 + 4C_{44}l_{11}^2l_{13}^2 + 4C_{44}l_{12}^2l_{13}^2
\end{aligned}$$

さらに$l_{11} = l,\quad l_{12} = m,\quad l_{11} = m$と置く。したがって、

$$\begin{aligned} C'_{11} &= l_{1g} l_{1h} l_{1m} l_{1n} C_{ghmn} \\ &= C_{11}(l^4 + m^4 + n^4) + 2C_{12}(l^2m^2 + l^2n^2 + m^2n^2) + 4C_{44}(l^2m^2 + l^2n^2 + m^2n^2) \end{aligned} \tag{6-1-10}$$

ここで、$l^4+m^4+n^4=(l^2+m^2+n^2)^2-2(l^2m^2+m^2n^2+l^2n^2)$ を用いて、式(6-1-10)を書き直すと

$$\begin{aligned} C_{11}' &= l_{1g}l_{1h}C_{ghmn}l_{1m}l_{1n} \\ &= C_{11}\{(l^2+m^2+n^2)^2-2(l^2m^2+m^2n^2+l^2n^2)\} \\ &\quad +2C_{12}(l^2m^2+l^2n^2+m^2n^2)+4C_{44}(l^2m^2+l^2n^2+m^2n^2) \\ &= C_{11}(l^2+m^2+n^2)^2+2(2C_{44}-C_{11}+C_{12})(l^2m^2+m^2n^2+l^2n^2) \\ &= C_{11}+2(2C_{44}-C_{11}+C_{12})(l^2m^2+m^2n^2+l^2n^2) \end{aligned} \tag{6-1-11}$$

となる。式(6-1-11)を式(6-1-7)に代入して、最終的に次式を得る。

$$E_{str}=\frac{C_{11}+2C_{12}}{2}\varepsilon^2\left\{3-\frac{C_{11}+2C_{12}}{C_{11}+2(2C_{44}-C_{11}+C_{12})(l^2m^2+m^2n^2+l^2n^2)}\right\} \tag{6-1-12}$$

これより、弾性関数 $Y_{<hkl>}$ は次式にて与えられる。

$$Y_{<hkl>}=\frac{C_{11}+2C_{12}}{2}\left\{3-\frac{C_{11}+2C_{12}}{C_{11}+2(2C_{44}-C_{11}+C_{12})(l^2m^2+m^2n^2+l^2n^2)}\right\} \tag{6-1-13}$$

ここで、$l=\frac{h}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}},\qquad m=\frac{k}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}},\qquad n=\frac{l}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$ である。

また、eigen歪 $\varepsilon=\eta_0(c-c_0)$ であるので、

$$E_{str}=\eta_0^2Y_{<hkl>}(c-c_0)^2 \tag{6-1-14}$$

となる。なお以上より、$Y_{<100>}$ および $Y_{<111>}$ は次式にて与えられる。

$$Y_{<100>}=\frac{(C_{11}+2C_{12})(C_{11}-C_{12})}{C_{11}},\qquad Y_{<111>}=\frac{6C_{44}(C_{11}+2C_{12})}{C_{11}+2C_{12}+4C_{44}} \tag{6-1-15}$$

6-2 $B(\mathbf{n})$ の導出法

まず、基本式を次式にて定義する。

$$\omega_{ij}^{-1}(\mathbf{n})=C_{iklj}n_kn_l \tag{6-2-1}$$

これより

$$\begin{aligned}\omega_{ij}^{-1}(\mathbf{n}) =\ & C_{i11j}n_1n_1+C_{i12j}n_1n_2+C_{i13j}n_1n_3 \\ &+C_{i21j}n_2n_1+C_{i22j}n_2n_2+C_{i23j}n_2n_3 \\ &+C_{i31j}n_3n_1+C_{i32j}n_3n_2+C_{i33j}n_3n_3\end{aligned} \tag{6-2-2}$$

立方晶の場合

$$
\begin{aligned}
&C_{1111} = C_{2222} = C_{3333} = C_{11} \\
&C_{1122} = C_{1133} = C_{2233} = C_{12} \\
&C_{1212} = C_{1313} = C_{2323} = C_{44}
\end{aligned}
\tag{6-2-3}
$$

であるので、

$$
\begin{aligned}
\omega_{11}^{-1}(\mathbf{n}) &= C_{1111}n_1n_1 + C_{1121}n_1n_2 + C_{1131}n_1n_3 + C_{1211}n_2n_1 + C_{1221}n_2n_2 + C_{1231}n_2n_3 \\
&\quad + C_{1311}n_3n_1 + C_{1321}n_3n_2 + C_{1331}n_3n_3 \\
&= C_{11}n_1^2 + C_{44}(n_2^2 + n_3^2) = C_{11}n_1^2 + C_{44}(1 - n_1^2) \\
&= C_{44} + (C_{11} - C_{44})n_1^2
\end{aligned}
\tag{6-2-4}
$$

同様に

$$\omega_{22}^{-1}(\mathbf{n}) = C_{44} + (C_{11} - C_{44})n_2^2 \tag{6-2-5}$$

$$\omega_{33}^{-1}(\mathbf{n}) = C_{44} + (C_{11} - C_{44})n_3^2 \tag{6-2-6}$$

また、

$$\omega_{12}^{-1}(\mathbf{n}) = C_{1122}n_1n_2 + C_{1212}n_2n_1 = (C_{12} + C_{44})n_1n_2 \tag{6-2-7}$$

同様に

$$\omega_{13}^{-1}(\mathbf{n}) = (C_{12} + C_{44})n_1n_3 \tag{6-2-8}$$

$$\omega_{21}^{-1}(\mathbf{n}) = (C_{12} + C_{44})n_2n_1 \tag{6-2-9}$$

$$\omega_{23}^{-1}(\mathbf{n}) = (C_{12} + C_{44})n_2n_3 \tag{6-2-10}$$

$$\omega_{31}^{-1}(\mathbf{n}) = (C_{12} + C_{44})n_3n_1 \tag{6-2-11}$$

$$\omega_{32}^{-1}(\mathbf{n}) = (C_{12} + C_{44})n_3n_2 \tag{6-2-12}$$

次に$\omega_{ij}^{-1}(\mathbf{n})$の逆行列を求める。記号を簡単にするために、

$$\omega_{ij}^{-1}(\mathbf{n}) \equiv a_{ij} \tag{6-2-13}$$

とおく。また

$$\alpha \equiv C_{44}, \qquad \beta \equiv C_{11} - C_{44}, \qquad \gamma \equiv C_{12} + C_{44} \tag{6-2-14}$$

とする。 a_{ij}の行列式Dは以下のように求めることができる。

$$D = D_1 + D_2 + D_3 + D_4 + D_5 + D_6 \tag{6-2-15}$$

とすると、

$$
\begin{aligned}
D_1 &= a_{11}a_{22}a_{33} = (\alpha + \beta n_1^2)(\alpha + \beta n_2^2)(\alpha + \beta n_3^2) \\
&= \alpha^3 + \alpha^2\beta(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2) + \alpha\beta^2(n_1^2n_2^2 + n_2^2n_3^2 + n_3^2n_1^2) + \beta^3 n_1^2n_2^2n_3^2 \\
&= \alpha^2(\alpha + \beta) + \alpha\beta^2(n_1^2n_2^2 + n_2^2n_3^2 + n_3^2n_1^2) + \beta^3 n_1^2n_2^2n_3^2
\end{aligned}
\tag{6-2-16}
$$

$$D_2 = a_{13}a_{21}a_{32} = \gamma^3\, n_1^2 n_2^2 n_3^2 \tag{6-2-17}$$
$$D_3 = a_{31}a_{12}a_{23} = \gamma^3\, n_1^2 n_2^2 n_3^2 \tag{6-2-18}$$
$$D_4 = -a_{13}a_{22}a_{31} = -\gamma^2 n_1^2 n_3^2 (\alpha + \beta n_2^2) = -\alpha\gamma^2 n_1^2 n_3^2 - \beta\gamma^2 n_1^2 n_2^2 n_3^2 \tag{6-2-19}$$
$$D_5 = -a_{11}a_{23}a_{32} = -\alpha\gamma^2 n_2^2 n_3^2 - \beta\gamma^2 n_1^2 n_2^2 n_3^2 \tag{6-2-20}$$
$$D_6 = -a_{33}a_{12}a_{21} = -\alpha\gamma^2 n_1^2 n_2^2 - \beta\gamma^2 n_1^2 n_2^2 n_3^2 \tag{6-2-21}$$

これより、

$$\begin{aligned} D &= D_1 + D_2 + D_3 + D_4 + D_5 + D_6 \\ &= \alpha^2(\alpha+\beta) + (\alpha\beta^2 - \alpha\gamma^2)(n_1^2 n_2^2 + n_2^2 n_3^2 + n_3^2 n_1^2) + (\beta^3 + 2\gamma^3 - 3\beta\gamma^2) n_1^2 n_2^2 n_3^2 \end{aligned} \tag{6-2-22}$$

式(6-2-22)右辺の係数は式(6-2-14)より以下のように計算される。

$$\alpha^2(\alpha+\beta) = C_{44}^2 (C_{44} + C_{11} - C_{44}) = C_{11} C_{44}^2 \tag{6-2-23}$$
$$(\alpha\beta^2 - \alpha\gamma^2) = \alpha(\beta+\gamma)(\beta-\gamma) = C_{44}(C_{11} + C_{12})(C_{11} - C_{12} - 2C_{44}) \tag{6-2-24}$$
$$(\beta^3 + 2\gamma^3 - 3\beta\gamma^2) = (\beta-\gamma)^2(\beta+2\gamma) = (C_{11} - C_{12} - 2C_{44})^2 (C_{11} + 2C_{12} + C_{44}) \tag{6-2-25}$$

式(6-2-23)～(6-2-25)を式(6-2-22)に代入し D を求める。

$$D = C_{44}^2 \left[C_{11} + \xi(C_{11} + C_{12})(n_1^2 n_2^2 + n_2^2 n_3^2 + n_3^2 n_1^2) + \xi^2 (C_{11} + 2C_{12} + 2C_{44}) n_1^2 n_2^2 n_3^2 \right] \tag{6-2-26}$$

$$\xi \equiv \frac{C_{11} - C_{12} - 2C_{44}}{C_{44}} \tag{6-2-27}$$

次にマトリックス a_{ij} の余因子行列を b_{ij} とする。（ちなみに b_{ij} は対称行列であるので、b_{ij} の転置行列はもとの b_{ij} に等しい。）

$$\begin{aligned} b_{11} &= a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32} = (\alpha + \beta n_2^2)(\alpha + \beta n_3^2) - \gamma^2 n_2^2 n_3^2 = \alpha^2 + \alpha\beta(n_2^2 + n_3^2) + (\beta^2 - \gamma^2) n_2^2 n_3^2 \\ &= C_{44}^2 + C_{44}(C_{11} - C_{44})(n_2^2 + n_3^2) + (C_{11} + C_{12})(C_{11} - C_{12} - 2C_{44}) n_2^2 n_3^2 \\ &= C_{44} \left[C_{44} + (C_{11} - C_{44})(n_2^2 + n_3^2) + \xi(C_{11} + C_{12}) n_2^2 n_3^2 \right] \end{aligned} \tag{6-2-28}$$

$$b_{22} = a_{11}a_{33} - a_{13}a_{31} = C_{44} \left[C_{44} + (C_{11} - C_{44})(n_1^2 + n_3^2) + \xi(C_{11} + C_{12}) n_1^2 n_3^2 \right] \tag{6-2-29}$$
$$b_{33} = a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} = C_{44} \left[C_{44} + (C_{11} - C_{44})(n_1^2 + n_2^2) + \xi(C_{11} + C_{12}) n_1^2 n_2^2 \right] \tag{6-2-30}$$

$$\begin{aligned} b_{12} &= -(a_{21}a_{33} - a_{23}a_{31}) = -\left[\gamma n_2 n_1 (\alpha + \beta n_3^2) - \gamma^2 n_2 n_3^2 n_1 \right] = -\gamma\alpha \left(1 + \frac{\beta - \gamma}{\alpha} n_3^2 \right) n_1 n_2 \\ &= -C_{44}(C_{12} + C_{44}) \left(1 + \xi n_3^2 \right) n_1 n_2 \end{aligned} \tag{6-2-31}$$

$$b_{13} = -(a_{22}a_{31} - a_{21}a_{32}) = -C_{44}(C_{12} + C_{44}) \left(1 + \xi n_2^2 \right) n_1 n_3 \tag{6-2-32}$$
$$b_{23} = -(a_{11}a_{32} - a_{12}a_{31}) = -C_{44}(C_{12} + C_{44}) \left(1 + \xi n_1^2 \right) n_2 n_3 \tag{6-2-33}$$

以上より、$\omega_{ij}^{-1}(\mathbf{n})$ の逆行列 $\omega_{ij}(\mathbf{n})$ は次式によって与えられる。また改めて、$\omega_{ij}(\mathbf{n})$ を $G_{ij}(\mathbf{n})$ および $\omega_{ij}(\mathbf{k})$ を $G_{ij}(\mathbf{k})$ と記す。

$$\omega_{ij}(\mathbf{n}) = \frac{{}^t b_{ij}}{D} = \frac{b_{ij}}{D} \equiv G_{ij}(\mathbf{n}) \tag{6-2-34}$$

ここで、拘束歪$e_{kl}^c(\mathbf{r})$は式(4-18)より次式にて与えられる。

$$\begin{aligned} e_{kl}^c(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2}\int_{\mathbf{k}} C_{pqmn}\{k_k k_q \Omega_{pl}(\mathbf{k}) + k_l k_q \Omega_{pk}(\mathbf{k})\}\eta_{mn} Q(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\ &= \frac{1}{2}\int_{\mathbf{k}} C_{pqmn}\eta_{mn}\{k_q G_{pl}(\mathbf{k})k_k + k_q G_{pk}(\mathbf{k})k_l\} Q(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \end{aligned} \tag{6-2-35}$$

これを書き下すと

$$\begin{aligned} e_{11}^c(\mathbf{r}) &= \eta(C_{11}+2C_{12})\int_{\mathbf{k}} [k_1 G_{11}(\mathbf{k})k_1 + k_2 G_{21}(\mathbf{k})k_1 + k_3 G_{31}(\mathbf{k})k_1] Q(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\ e_{22}^c(\mathbf{r}) &= \eta(C_{11}+2C_{12})\int_{\mathbf{k}} [k_1 G_{12}(\mathbf{k})k_2 + k_2 G_{22}(\mathbf{k})k_2 + k_3 G_{32}(\mathbf{k})k_2] Q(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\ e_{33}^c(\mathbf{r}) &= \eta(C_{11}+2C_{12})\int_{\mathbf{k}} [k_1 G_{13}(\mathbf{k})k_3 + k_2 G_{23}(\mathbf{k})k_3 + k_3 G_{33}(\mathbf{k})k_3] Q(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\ e_{12}^c(\mathbf{r}) &= \eta(C_{11}+2C_{12})\int_{\mathbf{k}} \frac{1}{2}\begin{bmatrix} k_1 G_{12}(\mathbf{k})k_1 + k_2 G_{22}(\mathbf{k})k_1 + k_3 G_{32}(\mathbf{k})k_1 \\ +k_1 G_{11}(\mathbf{k})k_2 + k_2 G_{21}(\mathbf{k})k_2 + k_3 G_{31}(\mathbf{k})k_2 \end{bmatrix} Q(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\ e_{23}^c(\mathbf{r}) &= \eta(C_{11}+2C_{12})\int_{\mathbf{k}} \frac{1}{2}\begin{bmatrix} k_1 G_{13}(\mathbf{k})k_2 + k_2 G_{23}(\mathbf{k})k_2 + k_3 G_{33}(\mathbf{k})k_2 \\ +k_1 G_{12}(\mathbf{k})k_3 + k_2 G_{22}(\mathbf{k})k_3 + k_3 G_{32}(\mathbf{k})k_3 \end{bmatrix} Q(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\ e_{31}^c(\mathbf{r}) &= \eta(C_{11}+2C_{12})\int_{\mathbf{k}} \frac{1}{2}\begin{bmatrix} k_1 G_{11}(\mathbf{k})k_3 + k_2 G_{21}(\mathbf{k})k_3 + k_3 G_{31}(\mathbf{k})k_3 \\ +k_1 G_{13}(\mathbf{k})k_1 + k_2 G_{23}(\mathbf{k})k_1 + k_3 G_{33}(\mathbf{k})k_1 \end{bmatrix} Q(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \end{aligned} \tag{6-2-36}$$

ここで、$e_{11}^c(\mathbf{r})+e_{22}^c(\mathbf{r})+e_{33}^c(\mathbf{r})$を求める。なお$G_{ij}(\mathbf{k})k_i k_j = G_{ij}(\mathbf{n})n_i n_j$である。

$$\begin{aligned} b_{11}n_1^2 &= C_{44}\left[C_{44}n_1^2 + (C_{11}-C_{44})n_1^2(n_2^2+n_3^2) + \xi(C_{11}+C_{12})n_1^2 n_2^2 n_3^2\right] \\ b_{22}n_2^2 &= C_{44}\left[C_{44}n_2^2 + (C_{11}-C_{44})n_2^2(n_1^2+n_3^2) + \xi(C_{11}+C_{12})n_1^2 n_2^2 n_3^2\right] \\ b_{33}n_3^2 &= C_{44}\left[C_{44}n_3^2 + (C_{11}-C_{44})n_3^2(n_1^2+n_2^2) + \xi(C_{11}+C_{12})n_1^2 n_2^2 n_3^2\right] \\ b_{12}n_1 n_2 &= -C_{44}(C_{12}+C_{44})\left(1+\xi n_3^2\right)n_1^2 n_2^2 \\ b_{13}n_1 n_3 &= -C_{44}(C_{12}+C_{44})\left(1+\xi n_2^2\right)n_1^2 n_3^2 \\ b_{23}n_2 n_3 &= -C_{44}(C_{12}+C_{44})\left(1+\xi n_1^2\right)n_2^2 n_3^2 \end{aligned} \tag{6-2-37}$$

より

$$b_{11}n_1^2 + b_{22}n_2^2 + b_{33}n_3^2 = C_{44}\left[C_{44} + 2(C_{11}-C_{44})(n_1^2 n_2^2 + n_2^2 n_3^2 + n_3^2 n_1^2) + 3\xi(C_{11}+C_{12})n_1^2 n_2^2 n_3^2\right]$$

$$\therefore 2(b_{12}n_1 n_2 + b_{23}n_2 n_3 + b_{31}n_3 n_1) = -2C_{44}\left[(C_{12}+C_{44})(n_1^2 n_2^2 + n_2^2 n_3^2 + n_3^2 n_1^2) + 3\xi(C_{12}+C_{44})n_1^2 n_2^2 n_3^2\right]$$

であるので、

$$
\begin{aligned}
&b_{11}n_1^2 + b_{22}n_2^2 + b_{33}n_3^2 + 2(b_{12}n_1n_2 + b_{23}n_2n_3 + b_{31}n_3n_1) \\
&= C_{44}\left[C_{44} + 2(C_{11} - C_{44})(n_1^2n_2^2 + n_2^2n_3^2 + n_3^2n_1^2) + 3\xi(C_{11} + C_{12})n_1^2n_2^2n_3^2\right] \\
&\quad - 2C_{44}\left[(C_{12} + C_{44})(n_1^2n_2^2 + n_2^2n_3^2 + n_3^2n_1^2) + 3\xi(C_{12} + C_{44})n_1^2n_2^2n_3^2\right] \\
&= C_{44}\left[\begin{aligned} &C_{44} + 2(C_{11} - C_{44})(n_1^2n_2^2 + n_2^2n_3^2 + n_3^2n_1^2) + 3\xi(C_{11} + C_{12})n_1^2n_2^2n_3^2 \\ &+2(-C_{12} - C_{44})(n_1^2n_2^2 + n_2^2n_3^2 + n_3^2n_1^2) + 3\xi(-2C_{12} - 2C_{44})n_1^2n_2^2n_3^2 \end{aligned}\right] \\
&= C_{44}\left[C_{44} + 2(C_{11} - C_{12} - 2C_{44})(n_1^2n_2^2 + n_2^2n_3^2 + n_3^2n_1^2) + 3\xi(C_{11} - C_{12} - 2C_{44})n_1^2n_2^2n_3^2\right] \\
&= C_{44}^2\left[1 + 2\xi(n_1^2n_2^2 + n_2^2n_3^2 + n_3^2n_1^2) + 3\xi^2 n_1^2n_2^2n_3^2\right]
\end{aligned}
\tag{6-2-38}
$$

したがって、

$$
e_{11}^c(\mathbf{r}) + e_{22}^c(\mathbf{r}) + e_{33}^c(\mathbf{r}) = \eta(C_{11} + 2C_{12})\int_{\mathbf{k}} F(\mathbf{n})Q(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}
$$

$$
\begin{aligned}
F(\mathbf{n}) &= \frac{b_{11}n_1^2 + b_{22}n_2^2 + b_{33}n_3^2 + 2(b_{12}n_1n_2 + b_{23}n_2n_3 + b_{31}n_3n_1)}{D} \\
&= \frac{\left[1 + 2\xi(n_1^2n_2^2 + n_2^2n_3^2 + n_3^2n_1^2) + 3\xi^2 n_1^2n_2^2n_3^2\right]}{\left[C_{11} + \xi(C_{11} + C_{12})(n_1^2n_2^2 + n_2^2n_3^2 + n_3^2n_1^2) + \xi^2(C_{11} + 2C_{12} + C_{44})n_1^2n_2^2n_3^2\right]}
\end{aligned}
\tag{6-2-39}
$$

また、$C_{ijkl}\eta_{ij}\eta_{kl} = 3(C_{11} + 2C_{12})\eta^2$ および $C_{ijkl}\eta_{ij}e_{kl}^c = (C_{11} + 2C_{12})\eta(e_{11}^c + e_{22}^c + e_{33}^c)$ であるので、最終的に弾性関数 $B(\mathbf{n})$ は次式にて与えられる。

$$
\begin{aligned}
B(\mathbf{n}) &= 3(C_{11} + 2C_{12})\eta^2 - (C_{11} + 2C_{12})^2\eta^2 F(\mathbf{n}) \\
&= (C_{11} + 2C_{12})\eta^2\left[3 - \frac{(C_{11} + 2C_{12})\left[1 + 2\xi(n_1^2n_2^2 + n_2^2n_3^2 + n_3^2n_1^2) + 3\xi^2 n_1^2n_2^2n_3^2\right]}{\left[C_{11} + \xi(C_{11} + C_{12})(n_1^2n_2^2 + n_2^2n_3^2 + n_3^2n_1^2) + \xi^2(C_{11} + 2C_{12} + C_{44})n_1^2n_2^2n_3^2\right]}\right]
\end{aligned}
\tag{6-2-40}
$$

6-3 E_{incl} の導出法

まず析出物の形状を回転楕円体とする。析出粒子の単位体積あたりの弾性歪エネルギー E_{incl} は、次式にて与えられる。

$$
E_{incl} = -\frac{1}{2}\sigma_{ij}^I e_{ij}^{T*}
\tag{6-3-1}
$$

eigen歪を次式にて定義する。

$$
e_{ij}^{T*} \equiv \eta\delta_{ij}
\tag{6-3-2}
$$

δ_{ij} はクロネッカーのデルタである。式(6-3-2)を式(6-3-1)に代入する。

$$
E_{incl} = -\frac{1}{2}\eta(\sigma_{11}^I + \sigma_{22}^I + \sigma_{33}^I)
\tag{6-3-3}
$$

ここで、２つの関係式を定義する。

$$C_{ijkl}(e_{kl}^{c}-e_{kl}^{T})=C_{ijkl}^{*}(e_{kl}^{c}-e_{kl}^{T*}) \tag{6-3-4}$$

$$e_{ij}^{c}=\frac{1}{4\pi}C_{klmn}e_{mn}^{T}\overline{G}_{ikjl} \tag{6-3-5}$$

式(6-3-4)はEshelbyの等価介在物の概念の定式化であり、式(6-3-5)は平衡方程式から導かれる。
次に、式(6-3-3)を変形するために、$\sigma_{11}^{I},\sigma_{22}^{I},\sigma_{33}^{I}$ の具体的な内容について書き下す。

$$\begin{aligned}\sigma_{11}^{I}&=C_{11kl}^{*}(e_{kl}^{c}-e_{kl}^{T*})\\&=C_{1111}^{*}(e_{11}^{c}-e_{11}^{T*})+C_{1122}^{*}(e_{22}^{c}-e_{22}^{T*})+C_{1133}^{*}(e_{33}^{c}-e_{33}^{T*})\\&=C_{11}^{*}(e_{11}^{c}-\eta)+C_{12}^{*}(e_{22}^{c}-\eta)+C_{12}^{*}(e_{33}^{c}-\eta)\end{aligned}$$

今、回転楕円体の回転軸を z 方向に取ると、$e_{11}^{c}=e_{22}^{c}$ であるから、

$$\sigma_{11}^{I}=(C_{11}^{*}+C_{12}^{*})(e_{11}^{c}-\eta)+C_{12}^{*}(e_{33}^{c}-\eta) \tag{6-3-6}$$

同様に

$$\sigma_{22}^{I}=(C_{11}^{*}+C_{12}^{*})(e_{11}^{c}-\eta)+C_{12}^{*}(e_{33}^{c}-\eta) \tag{6-3-7}$$

また、

$$\begin{aligned}\sigma_{33}^{I}&=C_{33kl}^{*}(e_{kl}^{c}-e_{kl}^{T*})\\&=C_{3311}^{*}(e_{11}^{c}-e_{11}^{T*})+C_{3322}^{*}(e_{22}^{c}-e_{22}^{T*})+C_{3333}^{*}(e_{33}^{c}-e_{33}^{T*})\\&=C_{12}^{*}(e_{11}^{c}-\eta)+C_{12}^{*}(e_{22}^{c}-\eta)+C_{11}^{*}(e_{33}^{c}-\eta)\\&=2C_{12}^{*}(e_{11}^{c}-\eta)+C_{11}^{*}(e_{33}^{c}-\eta)\end{aligned} \tag{6-3-8}$$

したがって、式(6-3-6)～(6-3-8)より、

$$\begin{aligned}\sigma_{11}^{I}+\sigma_{22}^{I}+\sigma_{33}^{I}&=2(C_{11}^{*}+C_{12}^{*})(e_{11}^{c}-\eta)+2C_{12}^{*}(e_{33}^{c}-\eta)+2C_{12}^{*}(e_{11}^{c}-\eta)+C_{11}^{*}(e_{33}^{c}-\eta)\\&=2(C_{11}^{*}+2C_{12}^{*})(e_{11}^{c}-\eta)+(C_{11}^{*}+2C_{12}^{*})(e_{33}^{c}-\eta)\\&=(C_{11}^{*}+2C_{12}^{*})(2e_{11}^{c}+e_{33}^{c}-3\eta)\end{aligned} \tag{6-3-9}$$

式(6-3-9)を式(6-3-3)に代入する。

$$E_{incl}=\frac{1}{2}\eta(C_{11}^{*}+2C_{12}^{*})(3\eta-2e_{11}^{c}-e_{33}^{c}) \tag{6-3-10}$$

式(6-3-10)における未知量は、e_{11}^{c} と e_{33}^{c} である。したがって以下、e_{11}^{c} と e_{33}^{c} を式(6-3-4)と式(6-3-5)から導く。まず式(6-3-4)より、

$$C_{11kl}(e^c_{kl}-e^T_{kl})=C^*_{11kl}(e^c_{kl}-e^{T*}_{kl})$$
$$C_{1111}(e^c_{11}-e^T_{11})+C_{1122}(e^c_{22}-e^T_{22})+C_{1133}(e^c_{33}-e^T_{33})=C^*_{1111}(e^c_{11}-e^{T*}_{11})+C^*_{1122}(e^c_{22}-e^{T*}_{22})+C^*_{1133}(e^c_{33}-e^{T*}_{33})$$
$$C_{11}(e^c_{11}-e^T_{11})+C_{12}(e^c_{22}-e^T_{22})+C_{12}(e^c_{33}-e^T_{33})=C^*_{11}(e^c_{11}-\eta)+C^*_{12}(e^c_{22}-\eta)+C^*_{12}(e^c_{33}-\eta)$$

ここで、$e^c_{11}=e^c_{22}$ および $e^T_{11}=e^T_{22}$ であるから、

$$(C^*_{11}+C^*_{12}-C_{11}-C_{12})e^c_{11}+(C^*_{12}-C_{12})e^c_{33}+(C_{11}+C_{12})e^T_{11}+C_{12}e^T_{33}=(C^*_{11}+2C^*_{12})\eta \qquad \text{(6-3-11)}$$

また、

$$C_{33kl}(e^c_{kl}-e^T_{kl})=C^*_{33kl}(e^c_{kl}-e^{T*}_{kl})$$
$$C_{3311}(e^c_{11}-e^T_{11})+C_{3322}(e^c_{22}-e^T_{22})+C_{3333}(e^c_{33}-e^T_{33})=C^*_{3311}(e^c_{11}-e^{T*}_{11})+C^*_{3322}(e^c_{22}-e^{T*}_{22})+C^*_{3333}(e^c_{33}-e^{T*}_{33})$$
$$C_{12}(e^c_{11}-e^T_{11})+C_{12}(e^c_{22}-e^T_{22})+C_{11}(e^c_{33}-e^T_{33})=C^*_{12}(e^c_{11}-\eta)+C^*_{12}(e^c_{22}-\eta)+C^*_{11}(e^c_{33}-\eta)$$

より

$$2(C^*_{12}-C^*_{12})e^c_{11}+(C^*_{11}-C_{11})e^c_{33}+2C_{12}e^T_{11}+C_{11}e^T_{33}=(C^*_{11}+2C^*_{12})\eta \qquad \text{(6-3-12)}$$

一方、式(6-3-5)から、

$$e^c_{11}=\frac{1}{4\pi}C_{klmn}e^T_{mn}\bar{G}_{1k1l}=\frac{1}{4\pi}\begin{pmatrix}C_{1111}e^T_{11}\bar{G}_{1111}+C_{2211}e^T_{11}\bar{G}_{1212}+C_{3311}e^T_{11}\bar{G}_{1313}\\ +C_{1122}e^T_{22}\bar{G}_{1111}+C_{2222}e^T_{22}\bar{G}_{1212}+C_{3322}e^T_{22}\bar{G}_{1313}\\ +C_{1133}e^T_{33}\bar{G}_{1111}+C_{2233}e^T_{33}\bar{G}_{1212}+C_{3333}e^T_{33}\bar{G}_{1313}\end{pmatrix}$$
$$=\frac{1}{4\pi}\begin{bmatrix}(C_{11}\bar{G}_{1111}+C_{12}\bar{G}_{1212}+C_{12}\bar{G}_{1313}+C_{12}\bar{G}_{1111}+C_{11}\bar{G}_{1212}+C_{12}\bar{G}_{1313})e^T_{11}\\ +(C_{12}\bar{G}_{1111}+C_{12}\bar{G}_{1212}+C_{11}\bar{G}_{1313})e^T_{33}\end{bmatrix}$$
$$=\frac{1}{4\pi}\begin{bmatrix}\{(C_{11}+C_{12})(\bar{G}_{1111}+\bar{G}_{1212})+2C_{12}\bar{G}_{1313}\}e^T_{11}\\ +\{C_{12}(\bar{G}_{1111}+\bar{G}_{1212})+C_{11}\bar{G}_{1313}\}e^T_{33}\end{bmatrix}$$

よって、

$$4\pi e^c_{11}-\{2(C_{11}+C_{12})(\bar{G}_{1111}+\bar{G}_{1212})+2C_{12}\bar{G}_{1313}\}e^T_{11}-\{C_{12}(\bar{G}_{1111}+\bar{G}_{1212})+C_{11}\bar{G}_{1313}\}e^T_{33}=0 \qquad \text{(6-3-13)}$$

また、

$$e^c_{33}=\frac{1}{4\pi}C_{klmn}e^T_{mn}\bar{G}_{3k3l}=\frac{1}{4\pi}\begin{pmatrix}C_{1111}e^T_{11}\bar{G}_{3131}+C_{2211}e^T_{11}\bar{G}_{3232}+C_{3311}e^T_{11}\bar{G}_{3333}\\ +C_{1122}e^T_{22}\bar{G}_{3131}+C_{2222}e^T_{22}\bar{G}_{3232}+C_{3322}e^T_{22}\bar{G}_{3333}\\ +C_{1133}e^T_{33}\bar{G}_{3131}+C_{2233}e^T_{33}\bar{G}_{3232}+C_{3333}e^T_{33}\bar{G}_{3333}\end{pmatrix}$$
$$=\frac{1}{4\pi}\begin{bmatrix}(C_{11}\bar{G}_{3131}+C_{12}\bar{G}_{3232}+C_{12}\bar{G}_{3333}+C_{12}\bar{G}_{3131}+C_{11}\bar{G}_{3232}+C_{12}\bar{G}_{3333})e^T_{11}\\ +(C_{12}\bar{G}_{3131}+C_{12}\bar{G}_{3232}+C_{11}\bar{G}_{3333})e^T_{33}\end{bmatrix}$$
$$=\frac{1}{4\pi}\begin{bmatrix}\{2(C_{11}+C_{12})\bar{G}_{3131}+2C_{12}\bar{G}_{3333}\}e^T_{11}\\ +(2C_{12}\bar{G}_{3131}+C_{11}\bar{G}_{3333})e^T_{33}\end{bmatrix}$$

よって、

$$4\pi e_{33}^{c} - \{2(C_{11} + C_{12})\overline{G}_{3131} + 2C_{12}\overline{G}_{3333}\}e_{11}^{T} - (2C_{12}\overline{G}_{3131} + C_{11}\overline{G}_{3333})e_{33}^{T} = 0 \qquad (6\text{-}3\text{-}14)$$

以上の式(6-3-11)～(6-3-14)を連立方程式として解くことによって、$e_{11}^{c}, e_{33}^{c}, e_{11}^{T}, e_{33}^{T}$を求めることが出来る。数値計算によって連立方程式を解くことは可能であるが、ここではさらに定式化を進める。まず$e_{11}^{c}, e_{33}^{c}, e_{11}^{T}, e_{33}^{T}$を導くために以下ような定数の置き換えを行う。

$$\begin{aligned}
A_1 &= C_{11}^{*} + C_{12}^{*} - C_{11} - C_{12} \\
A_2 &= C_{12}^{*} - C_{12} \\
A_3 &= C_{11} + C_{12} \\
A_4 &= C_{12} \\
A_5 &= C_{11}^{*} + 2C_{12}^{*}
\end{aligned} \qquad (6\text{-}3\text{-}15)$$

$$\begin{aligned}
B_1 &= 2(C_{12}^{*} - C_{12}^{*}) \\
B_2 &= C_{11}^{*} - C_{11} \\
B_3 &= 2C_{12} \\
B_4 &= C_{11} \\
B_5 &= C_{11}^{*} + 2C_{12}^{*}
\end{aligned} \qquad (6\text{-}3\text{-}16)$$

$$\begin{aligned}
C_1 &= 4\pi \\
C_2 &= 0 \\
C_3 &= -\{2(C_{11} + C_{12})(\overline{G}_{1111} + \overline{G}_{1212}) + 2C_{12}\overline{G}_{1313}\} \\
C_4 &= -\{C_{12}(\overline{G}_{1111} + \overline{G}_{1212}) + C_{11}\overline{G}_{1313}\} \\
C_5 &= 0
\end{aligned} \qquad (6\text{-}3\text{-}17)$$

$$\begin{aligned}
D_1 &= 0 \\
D_2 &= 4\pi \\
D_3 &= -\{2(C_{11} + C_{12})\overline{G}_{3131} + 2C_{12}\overline{G}_{3333}\} \\
D_4 &= -(2C_{12}\overline{G}_{3131} + C_{11}\overline{G}_{3333}) \\
D_5 &= 0
\end{aligned} \qquad (6\text{-}3\text{-}18)$$

これより、式(6-3-11)～(6-3-14)は次式にて与えられる。

$$A_1 e_{11}^{c} + A_2 e_{33}^{c} + A_3 e_{11}^{T} + A_4 e_{33}^{T} = A_5 \eta \qquad (6\text{-}3\text{-}19)$$
$$B_1 e_{11}^{c} + B_2 e_{33}^{c} + B_3 e_{11}^{T} + B_4 e_{33}^{T} = B_5 \eta \qquad (6\text{-}3\text{-}20)$$
$$C_1 e_{11}^{c} \qquad\qquad + C_3 e_{11}^{T} + C_4 e_{33}^{T} = 0 \qquad (6\text{-}3\text{-}21)$$
$$\qquad\qquad D_2 e_{33}^{c} + D_3 e_{11}^{T} + D_4 e_{33}^{T} = 0 \qquad (6\text{-}3\text{-}22)$$

式(6-3-19)～(6-3-22)を行列表記する。

$$
\begin{bmatrix} A_1 & A_2 & A_3 & A_4 \\ B_1 & B_2 & B_3 & B_4 \\ C_1 & 0 & C_3 & C_4 \\ 0 & D_2 & D_3 & D_4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e_{11}^c \\ e_{33}^c \\ e_{11}^T \\ e_{33}^T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_5\eta \\ B_5\eta \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{6-3-23}
$$

さらにここで、各種の行列式を以下のように定義する。

$$
\mathbf{A} = \begin{vmatrix} A_1 & A_2 & A_3 & A_4 \\ B_1 & B_2 & B_3 & B_4 \\ C_1 & 0 & C_3 & C_4 \\ 0 & D_2 & D_3 & D_4 \end{vmatrix} = A_1 \begin{vmatrix} B_2 & B_3 & B_4 \\ 0 & C_3 & C_4 \\ D_2 & D_3 & D_4 \end{vmatrix} - B_1 \begin{vmatrix} A_2 & A_3 & A_4 \\ 0 & C_3 & C_4 \\ D_2 & D_3 & D_4 \end{vmatrix} + C_1 \begin{vmatrix} A_2 & A_3 & A_4 \\ B_2 & B_3 & B_4 \\ D_2 & D_3 & D_4 \end{vmatrix} = \alpha
$$

$$
\mathbf{B_1} = \begin{vmatrix} A_5\eta & A_2 & A_3 & A_4 \\ B_5\eta & B_2 & B_3 & B_4 \\ 0 & 0 & C_3 & C_4 \\ 0 & D_2 & D_3 & D_4 \end{vmatrix} = A_5\eta \begin{vmatrix} B_2 & B_3 & B_4 \\ 0 & C_3 & C_4 \\ D_2 & D_3 & D_4 \end{vmatrix} - B_5\eta \begin{vmatrix} A_2 & A_3 & A_4 \\ 0 & C_3 & C_4 \\ D_2 & D_3 & D_4 \end{vmatrix} = \beta_1\eta
$$

$$
\mathbf{B_2} = \begin{vmatrix} A_1 & A_5\eta & A_3 & A_4 \\ B_1 & B_5\eta & B_3 & B_4 \\ C_1 & 0 & C_3 & C_4 \\ 0 & 0 & D_3 & D_4 \end{vmatrix} = -A_5\eta \begin{vmatrix} B_1 & B_3 & B_4 \\ C_1 & C_3 & C_4 \\ 0 & D_3 & D_4 \end{vmatrix} + B_5\eta \begin{vmatrix} A_1 & A_3 & A_4 \\ C_1 & C_3 & C_4 \\ 0 & D_3 & D_4 \end{vmatrix} = \beta_2\eta
$$

$$
\mathbf{B_3} = \begin{vmatrix} A_1 & A_2 & A_5\eta & A_4 \\ B_1 & B_2 & B_5\eta & B_4 \\ C_1 & 0 & 0 & C_4 \\ 0 & D_2 & 0 & D_4 \end{vmatrix} = A_5\eta \begin{vmatrix} B_1 & B_2 & B_4 \\ C_1 & 0 & C_4 \\ 0 & D_2 & D_4 \end{vmatrix} - B_5\eta \begin{vmatrix} A_1 & A_2 & A_4 \\ C_1 & 0 & C_4 \\ 0 & D_2 & D_4 \end{vmatrix} = \beta_3\eta
$$

$$
\mathbf{B_4} = \begin{vmatrix} A_1 & A_2 & A_3 & A_5\eta \\ B_1 & B_2 & B_3 & B_5\eta \\ C_1 & 0 & C_3 & 0 \\ 0 & D_2 & D_3 & 0 \end{vmatrix} = -A_5\eta \begin{vmatrix} B_1 & B_2 & B_3 \\ C_1 & 0 & C_3 \\ 0 & D_2 & D_3 \end{vmatrix} + B_5\eta \begin{vmatrix} A_1 & A_2 & A_3 \\ C_1 & 0 & C_3 \\ 0 & D_2 & D_3 \end{vmatrix} = \beta_4\eta
$$

これより、クラーメルの解法から、

$$
\begin{aligned}
e_{11}^c &= \frac{\mathbf{B_1}}{\mathbf{A}} = \left(\frac{\beta_1}{\alpha}\right)\eta, \qquad e_{33}^c = \frac{\mathbf{B_2}}{\mathbf{A}} = \left(\frac{\beta_2}{\alpha}\right)\eta \\
e_{11}^T &= \frac{\mathbf{B_3}}{\mathbf{A}} = \left(\frac{\beta_3}{\alpha}\right)\eta, \qquad e_{33}^T = \frac{\mathbf{B_4}}{\mathbf{A}} = \left(\frac{\beta_4}{\alpha}\right)\eta
\end{aligned} \tag{6-3-24}
$$

式(6-3-24)を式(6-3-10)に代入し、最終的な E_{incl} の形は以下のようになる。

$$
\begin{aligned}
E_{incl} &= \frac{1}{2}\eta(C_{11}^* + 2C_{12}^*)\left[3\eta - 2\left(\frac{\beta_1}{\alpha}\right)\eta - \left(\frac{\beta_2}{\alpha}\right)\eta\right] \\
&= \frac{1}{2}(C_{11}^* + 2C_{12}^*)\left[3 - 2\left(\frac{\beta_1}{\alpha}\right) - \left(\frac{\beta_2}{\alpha}\right)\right]\eta^2 \\
&= Z_0\eta^2
\end{aligned} \tag{6-3-25}
$$

$$
Z_0 \equiv \frac{1}{2}(C_{11}^* + 2C_{12}^*)\left[3 - 2\left(\frac{\beta_1}{\alpha}\right) - \left(\frac{\beta_2}{\alpha}\right)\right] \tag{6-3-26}
$$

ここで非常に重要な点は、Z_0 が弾性定数と析出物の形状(アスペクト比)のみによって定まる関数であることである。さらに注目すべき点は拘束歪と等価変態歪が、全てeigen歪，ひいては格子ミスマッチ η に比例している点である。したがって、応力は必ず η に比例し、弾性歪エネルギーは η^2 に比例することになる。

6-4 形状関数の導出法

形状関数を $\theta(\mathbf{k})$ 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 $\theta(\mathbf{k})$ の理論導出式は次式にて与えられる。

$$
\theta(\mathbf{k}) = \int_{\mathbf{r}} c(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r} \tag{6-4-1}
$$

$c(\mathbf{r}) = 1$ (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 $\mathbf{k}$ 方向と z 軸方向を一致させる。つまり $\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} = kr\cos(\theta)$ と書くことが出来る。したがって、式(6-4-1)より形状関数は以下のように計算される。

$$
\begin{aligned}
\theta(\mathbf{k}) &= \int_{\mathbf{r}} c(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r} = \int_{|\mathbf{r}|<r_0} \exp\{ikr\cos(\theta)\}d\mathbf{r} \\
&= \int_0^{\pi}\int_0^{\pi}\int_{-r_0}^{r_0}\left[\cos\{kr\cos(\theta)\} + i\sin\{kr\cos(\theta)\}\right]r^2\sin(\theta)drd\theta d\varphi \\
&= \pi\int_0^{\pi}\int_{-r_0}^{r_0}\cos\{kr\cos(\theta)\}r^2\sin(\theta)drd\theta
\end{aligned} \tag{6-4-2}
$$

ここで、$k\cos(\theta) = t$ と置く。したがって、$-k\sin(\theta)d\theta = dt,\quad \sin(\theta)d\theta = -\frac{1}{k}dt$ である。これらを、式(6-4-2)に代入する。

$$
\begin{aligned}
\theta(\mathbf{k}) &= \frac{\pi}{k}\int_{-k}^{k}\int_{-r_0}^{r_0} r^2\cos(rt)drdt = \frac{2\pi}{k}\int_{-r_0}^{r_0} r\sin(rk)dr = \frac{4\pi}{k}\int_0^{r_0} r\sin(rk)dr \\
&= \frac{4\pi\left[\sin(r_0k) - r_0k\cos(r_0k)\right]}{k^3}
\end{aligned} \tag{6-4-3}
$$

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

$$\theta(\mathbf{k}) = 3V\frac{\sin(r_0k) - r_0k\cos(r_0k)}{(r_0k)^3} \tag{6-4-4}$$

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 $\mathbf{k}$ 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。

$$K(\theta, p) = \sqrt{\sin^2(\theta) + p^2\cos^2(\theta)} \tag{6-4-5}$$

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

$$z_0 \equiv aK(\theta, p), \qquad A \equiv \frac{\pi p(z_0^2 - z^2)}{K^3(\theta, p)} \tag{6-4-6}$$

$\mathbf{k}$ 方向上,原点より z の点を通り $\mathbf{k}$ に垂直な平面と、楕円体の交線は楕円となる。式(6-4-6)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。

$$\begin{aligned}
\theta(\mathbf{k}) &= \int_{\mathbf{r}} c(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&= \int_0^{2\pi}\int_0^{\mathbf{r}(\mathbf{z})}\int_{-z_0}^{z_0}\exp\{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{z}+\mathbf{r}')\}d\mathbf{z}d\mathbf{r}'d\varphi \\
&= \int_{-z_0}^{z_0}\exp(ikz)Adz \\
&= \frac{\pi p}{K^3(\theta)}\int_{-z_0}^{z_0}(z_0^2 - z^2)\cos(kz)dz \\
&= \frac{2\pi p}{K^3(\theta)}\int_0^{z_0}(z_0^2 - z^2)\cos(kz)dz
\end{aligned} \tag{6-4-7}$$

ここで、

$$z_0^2\int_0^{z_0}\cos(kz)dz = \frac{z_0^2}{k}\sin(kz_0)$$

および

$$\int_0^{z_0} z^2\cos(kz)dz = \frac{z_0^2}{k}\sin(kz_0) + \frac{2z_0}{k^2}\cos(kz_0) - \frac{2}{k^3}\sin(kz_0)$$

よって、式(6-4-7)は次式にて与えられる。

$$\theta(\mathbf{k}) = \frac{4\pi p}{K^3(\theta, p)}\frac{\left[\sin(z_0k) - z_0k\cos(z_0k)\right]}{k^3} = 3V\frac{p}{K^3(\theta, p)}\frac{\left[\sin(z_0k) - z_0k\cos(z_0k)\right]}{(z_0k)^3} \tag{6-4-8}$$

ここで、$V = \dfrac{4}{3}\pi z_0^3$ 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。

$$\theta(\mathbf{k}) = \int_{\mathbf{r}} c(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int_{-c}^{c}\int_{-b}^{b}\int_{-a}^{a} \exp\{i(k_x x + k_y y + k_z z)\} dxdydz$$
$$= \left[\int_{-a}^{a} \exp(ik_x x)dx\right]\left[\int_{-b}^{b} \exp(ik_y y)dy\right]\left[\int_{-c}^{c} \exp(ik_z z)dz\right]$$
$$= 8\left[\int_{0}^{a} \cos(k_x x)dx\right]\left[\int_{0}^{b} \cos(k_y y)dy\right]\left[\int_{0}^{c} \cos(k_z z)dz\right] \tag{6-4-9}$$
$$= 8\left[\frac{\sin(k_x a)}{k_x}\right]\left[\frac{\sin(k_y b)}{k_y}\right]\left[\frac{\sin(k_z c)}{k_z}\right]$$

6-5 楕円体状析出粒子の界面積

回転楕円体形状の析出物の界面積$S(p)$は軸比pの関数として以下の様に与えられる。

$$S(p) = \pi r_0^2 p^{-2/3}[2 + f(p)] \tag{6-5-1}$$

$$f(p) = \frac{2p^2}{(1-p^2)^{1/2}} \log\left\{\frac{1+(1-p^2)^{1/2}}{p}\right\} \quad (p<1) \tag{6-5-2}$$
$$f(p) = 2 \quad (p=1) \tag{6-5-3}$$
$$f(p) = \frac{2p^2}{(p^2-1)^{1/2}} \tan^{-1}(p^2-1)^{1/2} \quad (p>1) \tag{6-5-4}$$

ここでr_0は回転楕円体と同体積の球の半径である。界面エネルギー密度をγ_sとすると式(6-5-1)より界面エネルギーE_{surf}は次式にて与えられる。

$$E_{surf} = S(p)\gamma_s \tag{6-5-5}$$