

斜方晶の弾性自己
エネルギー - の理論式
(等価介在物)

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。

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

ここで、 u_i は変位場を表す。

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

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

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

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

式(6)は簡易表記で、式(8)にて表されるので、

$$\begin{array}{c}
 \left. \begin{array}{l} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sigma_{23} \\ \sigma_{31} \\ \sigma_{12} \end{array} \right\} = \begin{array}{cccccc} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ * & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\ * & * & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ * & * & * & C_{44} & 0 & 0 \\ * & * & * & * & C_{55} & 0 \\ * & * & * & * & * & C_{66} \end{array} \left. \begin{array}{l} e_{11} \\ e_{22} \\ e_{33} \\ e_{23} \\ e_{31} \\ e_{12} \end{array} \right\}
 \end{array} \tag{8}$$

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。

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

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。）、

$\frac{\partial E_{str}}{\partial \varepsilon_{11}} = 0$, $\frac{\partial E_{str}}{\partial \varepsilon_{22}} = 0$, $\frac{\partial E_{str}}{\partial \varepsilon_{33}} = 0$ が成立する。したがって、

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

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

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

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

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

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にならなくてならない。したがって $g(c)$ は次式にて与えられる。

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

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

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

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、 $\frac{1}{2} \left[C_{ijkl} e_{ij}^c \eta_{kl} (c - c_0) \right] d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \left[C_{ijkl} e_{ij}^c e_{kl}^c \right] d\mathbf{r}$ 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。

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

次に濃度変動場をフ - リエ級数展開にて、式(10)にて定義する。

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

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）

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

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

次にグリ - ン関数を次式定義する。

$$G_{pj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \equiv \sum_{\mathbf{h}} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) \exp\{i\mathbf{h}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\} \tag{13}$$

これより、

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathbf{r}'} G_{pj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \{c(\mathbf{r}') - c_0\} d\mathbf{r}' \\
&= \int \sum_{\mathbf{r}'} \sum_{\mathbf{h}} \sum_{\mathbf{h}'} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) \exp\{i\mathbf{h}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\} Q(\mathbf{h}') \exp(i\mathbf{h}'\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\
&= \sum_{\mathbf{h}} \sum_{\mathbf{h}'} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) Q(\mathbf{h}') \exp(i\mathbf{h}\mathbf{r}) \int_{\mathbf{r}'} \exp\{i(\mathbf{h}' - \mathbf{h})\mathbf{r}'\} d\mathbf{r}' \\
&= \sum_{\mathbf{h}} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) Q(\mathbf{h}) \exp(i\mathbf{h}\mathbf{r})
\end{aligned} \tag{14}$$

である。式(11)より、Pure dilatationの固有歪場の場合、

$$\begin{aligned}
e_{ij}^c(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{h}} C_{ppmm} \eta_{mm} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) Q(\mathbf{h}) \exp(i\mathbf{h}\mathbf{r}) \\
&= C_{ppmm} \eta_{mm} \sum_{\mathbf{h}} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) Q(\mathbf{h}) \exp(i\mathbf{h}\mathbf{r})
\end{aligned} \tag{15}$$

であり、式(15)を代入すると、式(16)が得られる。

$$e_{ij}^c(\mathbf{r}) = C_{ppmm} \eta_{mm} \int_{\mathbf{r}'} G_{pj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \{c(\mathbf{r}') - c_0\} d\mathbf{r}' \tag{16}$$

ここで、無限のマトリックス中に 1 個の楕円体析出粒子が存在する場合を想定し、また析

出粒子の濃度を c_P 、マトリックスの濃度を c_M とする。これより、 c_0 は c_M にて代用できるので、式(16)内の $\{c(\mathbf{r}') - c_0\}$ は $\{c(\mathbf{r}') - c_M\}$ に置き換えることができ、 \mathbf{r}' は析出粒子内部のみを考えれば良いことになる。なぜなら、 \mathbf{r}' が粒子外部(すなわちマトリックス内)にあれば、 $c(\mathbf{r}') = c_M$ 、 $\{c(\mathbf{r}') - c_M\} = 0$ となるので、式(16)の積分において最初から除外することができるのである。つまり、式(16)の積分は析出内部のみとれば良い。以上の仮定から、式(16)は式(17)のように書き換えられる。

$$e_{jj}^c(\mathbf{r}) = \eta_{mm}(c_P - c_M) \int_{\mathbf{r}'} C_{ppmm} G_{pj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' = e_{mm}^T \int_{\mathbf{r}'} C_{ppmm} G_{pj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (17)$$

e_{mm}^T は等価変態歪で、 $e_{mm}^T = \eta_{mm}(c_P - c_M)$ にて定義される。

さて、式(17)右辺の積分を具体的に求めてみよう。まず式(13)を用いることにより、

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbf{r}'} C_{ppmm} G_{pj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\ &= \int_{\mathbf{r}'} C_{ppmm} \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{n}} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) \exp\{i\mathbf{h}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\} d\mathbf{h} d\mathbf{r}' \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{r}'} C_{ppmm} \int_{S(\mathbf{n})} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) \left[\int_{h=0}^{\infty} h^2 \exp\{i\mathbf{h}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\} dh \right] dS(\mathbf{n}) d\mathbf{r}' \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\mathbf{r}'} C_{ppmm} \int_{S(\mathbf{n})} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) \left[\Delta_{\mathbf{r}} \frac{1}{2} \int_{h=-\infty}^{\infty} \exp\{i\mathbf{h}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\} dh \right] dS(\mathbf{n}) d\mathbf{r}' \\ &= \frac{1}{2(2\pi)^2} \int_{\mathbf{r}'} C_{ppmm} \int_{S(\mathbf{n})} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) \left[-\Delta_{\mathbf{r}} \delta\{\mathbf{n}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\} \right] dS(\mathbf{n}) d\mathbf{r}' \\ &= -\frac{1}{2(2\pi)^2} C_{ppmm} \int_{S(\mathbf{n})} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) \left[\Delta_{\mathbf{r}} \int_{\mathbf{r}'} \delta\{\mathbf{n}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\} d\mathbf{r}' \right] dS(\mathbf{n}) \end{aligned} \quad (18)$$

と変形できる。さて、式(18)を整理しよう。ここで、楕円体の実空間における形状を以下のように定義する。

$$\frac{x_1^2}{a_1^2} + \frac{x_2^2}{a_2^2} + \frac{x_3^2}{a_3^2} = 1 \quad (19)$$

また、次のような変数変換を行う。

$$\begin{aligned} x_1 / a_1 &= y_1, & x_2 / a_2 &= y_2, & x_3 / a_3 &= y_3 \\ x_1' / a_1 &= y_1', & x_2' / a_2 &= y_2', & x_3' / a_3 &= y_3' \\ a_1 n_1 &= l_1, & a_2 n_2 &= l_2, & a_3 n_3 &= l_3 \\ l_1 / l &= m_1, & l_2 / l &= m_2, & l_3 / l &= m_3 \\ l &= \sqrt{l_1^2 + l_2^2 + l_3^2} = \sqrt{a_1^2 n_1^2 + a_2^2 n_2^2 + a_3^2 n_3^2} \end{aligned} \quad (20)$$

これらの変数は、すべて同一の座標軸にて表現されるが、 \mathbf{x} と \mathbf{y} は必ずしも平行ではない。また \mathbf{n} と \mathbf{m} も平行ではないのが普通である \mathbf{x} また \mathbf{x}' が楕円体内を動くと、 \mathbf{y} と \mathbf{y}' は単位球内を動く。 \mathbf{n} と \mathbf{m} の先端は単位球上を動く。

さて、式(18)右辺のデルタ関数は、式(20)を用いることにより、式(21)にて表される。

$$\begin{aligned}
& \delta\{\mathbf{n} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')\} \\
&= \delta\{n_1(x_1 - x_1') + n_2(x_2 - x_2') + n_3(x_3 - x_3')\} \\
&= \delta\{a_1 n_1(y_1 - y_1') + a_2 n_2(y_2 - y_2') + a_3 n_3(y_3 - y_3')\} \\
&= \delta\{l_1(y_1 - y_1') + l_2(y_2 - y_2') + l_3(y_3 - y_3')\} \\
&= \delta\{lm_1(y_1 - y_1') + lm_2(y_2 - y_2') + lm_3(y_3 - y_3')\} \\
&= \delta\{\mathbf{lm} \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{y}')\}
\end{aligned} \tag{21}$$

\mathbf{n} と \mathbf{r} が与えられた時に、 \mathbf{r}' が変数として楕円体内を動くとする。つまり、 \mathbf{m} と \mathbf{y} が与えられた時に、 \mathbf{y}' が変数として単位球内を動く場合を考える。(\mathbf{y}' は必ず単位球内にあるが、 \mathbf{y} はそうとは限らない。) この時、式(18)のデルタ関数が0となるのは、「 \mathbf{y} を通り \mathbf{m} に垂直な平面と単位球の交わりの円内に \mathbf{y}' が存在する場合」となる。 \mathbf{y} が単位球内にあれば、必ず交わり円は出来るが、問題は、 \mathbf{y} が単位球外に位置する時に、ある \mathbf{m} について交わり円が出来ない場合が存在することである。このことが、析出粒子外部の歪場の計算を困難にしている。しかし、eigen歪が粒子内部のみに存在する場合は、自動的に粒子外部の歪場に関する積分計算は0になるので、このことを考慮する必要はない。なお、このような仮定がおけるのは、無限のマトリックス中の析出粒子のみである。

さて、交わり円の半径を R とすると、原点から交わり円までの距離は $(\mathbf{y} \cdot \mathbf{m})$ であるので、

$$R = \sqrt{1 - (\mathbf{y} \cdot \mathbf{m})^2} \tag{22}$$

にて与えられる。ここで、 \mathbf{y}' を記述するために、円柱座標系 (r, θ, z) を定義する。 r は交わり円中心から \mathbf{y}' 点までの距離、 z は座標原点から交わり円までの距離で、 $(\mathbf{y}' \cdot \mathbf{m})$ にて与えられる。(いま、変数は \mathbf{y}' である。したがって変数 z は、 \mathbf{y}' から定義しなくてはならない。)
 θ は交わり円内の \mathbf{y}' 点の回転角である。また、 $R = \sqrt{1 - z^2}$ である。これより式(18)内のデルタ関数の積分は以下ようになる。

$$\begin{aligned}
& \int_{\mathbf{r}'} \delta\{\mathbf{n}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\} d\mathbf{r}' \\
&= \int_{x_3'} \int_{x_2'} \int_{x_1'} \delta\{\mathbf{n}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\} dx_1' dx_2' dx_3' \\
&= a_1 a_2 a_3 \int_{y_3'} \int_{y_2'} \int_{y_1'} \delta\{\mathbf{lm} \cdot (\mathbf{y} - \mathbf{y}')\} dy_1' dy_2' dy_3' \\
&= a_1 a_2 a_3 \int_z \int_{\theta'} \delta(\mathbf{lm} \cdot \mathbf{y} - lz) r dz d\theta dr \\
&= a_1 a_2 a_3 \int_{-1}^1 \delta(\mathbf{lm} \cdot \mathbf{y} - lz) dz \int_0^{2\pi} d\theta r \int_0^R r dr \\
&= \pi a_1 a_2 a_3 \int_{-1}^1 \delta(\mathbf{lm} \cdot \mathbf{y} - lz) R^2 dz \\
&= \pi a_1 a_2 a_3 \int_{-1}^1 (1 - z^2) \delta(\mathbf{lm} \cdot \mathbf{y} - lz) dz \\
&= \pi a_1 a_2 a_3 \int_{-1}^1 (1 - z^2) \delta(\mathbf{lm} \cdot \mathbf{y} - lz) dz \\
&= \pi a_1 a_2 a_3 \int_{-1}^1 (1 - z'^2/l^2) \delta(\mathbf{lm} \cdot \mathbf{y} - z') \frac{1}{l} dz' \\
&= \pi a_1 a_2 a_3 \{1 - (\mathbf{lm} \cdot \mathbf{y})^2 / l^2\} / l \\
&= \pi a_1 a_2 a_3 \{1 - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{y})^2\} / l
\end{aligned} \tag{23}$$

最後の部分で、 $z' = lz$ と置いた。

ここで、

$$\begin{aligned}
& (\mathbf{m} \cdot \mathbf{y}) \\
&= m_1 y_1 + m_2 y_2 + m_3 y_3 \\
&= \frac{a_1 n_1}{l} \frac{x_1}{a_1} + \frac{a_2 n_2}{l} \frac{x_2}{a_2} + \frac{a_3 n_3}{l} \frac{x_3}{a_3} \\
&= \frac{1}{l} (n_1 x_1 + n_2 x_2 + n_3 x_3) \\
&= \frac{(\mathbf{n} \cdot \mathbf{r})}{l} = \frac{(\mathbf{n} \cdot \mathbf{r})}{\sqrt{a_1^2 n_1^2 + a_2^2 n_2^2 + a_3^2 n_3^2}}
\end{aligned}$$

であるので、

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbf{r}'} \delta\{\mathbf{n}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\} d\mathbf{r}' &= \pi a_1 a_2 a_3 \{1 - (\mathbf{m} \cdot \mathbf{y})^2\} / l \\
&= \pi a_1 a_2 a_3 \left\{ \frac{1}{l} - \frac{(\mathbf{n} \cdot \mathbf{r})^2}{l^3} \right\}
\end{aligned} \tag{24}$$

となる。これより、

$$\begin{aligned}
& \Delta_r \int_{\mathbf{r}'} \delta\{\mathbf{n}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\} d\mathbf{r}' \\
&= \Delta_r \pi a_1 a_2 a_3 \int_{\mathbf{r}'} \frac{1}{l} - \frac{(\mathbf{n} \cdot \mathbf{r})^2}{l^3} \\
&= \Delta_r \pi a_1 a_2 a_3 \int_{\mathbf{r}'} \frac{1}{l} - \frac{(n_1 x_1 + n_2 x_2 + n_3 x_3)^2}{l^3} \\
&= - \frac{2\pi a_1 a_2 a_3 (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)}{l^3} \\
&= - \frac{2\pi a_1 a_2 a_3}{l^3}
\end{aligned} \tag{25}$$

式(25)を式(18)へ代入する。

$$\begin{aligned}
& \int_{\mathbf{r}'} C_{ppmm} G_{pj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\
&= - \frac{1}{2(2\pi)^2} C_{ppmm} \int_{S(\mathbf{n})} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) \left[\Delta_r \int_{\mathbf{r}'} \delta\{\mathbf{n}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\} d\mathbf{r}' \right] dS(\mathbf{n}) \\
&= - \frac{1}{2(2\pi)^2} C_{ppmm} \int_{S(\mathbf{n})} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) \left[- \frac{2\pi a_1 a_2 a_3}{l^3} \right] dS(\mathbf{n}) \\
&= \frac{a_1 a_2 a_3}{4\pi} C_{ppmm} \int_{S(\mathbf{n})} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) l^{-3} dS(\mathbf{n})
\end{aligned} \tag{26}$$

ここで、 $l = \sqrt{a_1^2 n_1^2 + a_2^2 n_2^2 + a_3^2 n_3^2}$ である。興味深い点は、式(26)において \mathbf{r} 依存性が消えてしまったことである。つまり粒子形状が楕円体で、内部のeigen歪場が均一であり、かつ弾性率が定数である場合には、析出粒子の内部全歪場も均一になるのである。

ところで、 \mathbf{n} に垂直な微小ベクトルを、 $d\mathbf{n}$ および $\delta\mathbf{n}$ とすると、 $|\mathbf{n}|=1$ であるので、

$$dS(\mathbf{n}) = \begin{vmatrix} n_1 & n_2 & n_3 \\ dn_1 & dn_2 & dn_3 \\ \delta n_1 & \delta n_2 & \delta n_3 \end{vmatrix} \tag{27}$$

が成立する。したがって、

$$dS(\mathbf{m}) = \begin{vmatrix} m_1 & m_2 & m_3 \\ dm_1 & dm_2 & dm_3 \\ \delta m_1 & \delta m_2 & \delta m_3 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} a_1 n_1 / l & a_2 n_2 / l & a_3 n_3 / l \\ a_1 dn_1 / l & a_2 dn_2 / l & a_3 dn_3 / l \\ a_1 \delta n_1 / l & a_2 \delta n_2 / l & a_3 \delta n_3 / l \end{vmatrix} = \frac{a_1 a_2 a_3}{l^3} dS(\mathbf{n}) \tag{28}$$

式(28)を式(26)に代入する。

$$\begin{aligned}
& \int_{\mathbf{r}'} C_{ppmm} G_{pj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\
&= \frac{a_1 a_2 a_3}{4\pi} C_{ppmm} \int_{S(\mathbf{n})} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) l^{-3} dS(\mathbf{n}) \\
&= \frac{1}{4\pi} C_{ppmm} \int_{S(\mathbf{m})} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) dS(\mathbf{m})
\end{aligned} \tag{29}$$

mとnの関係は

$$\begin{aligned}
m_1 &= \frac{a_1 n_1}{\sqrt{a_1^2 n_1^2 + a_2^2 n_2^2 + a_3^2 n_3^2}} \\
m_2 &= \frac{a_2 n_2}{\sqrt{a_1^2 n_1^2 + a_2^2 n_2^2 + a_3^2 n_3^2}} \\
m_3 &= \frac{a_3 n_3}{\sqrt{a_1^2 n_1^2 + a_2^2 n_2^2 + a_3^2 n_3^2}}
\end{aligned} \tag{30}$$

にて与えられる。
式(26)を改めて

$$S_{jjmm} = \int_{\mathbf{r}'} C_{ppmm} G_{pj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' = \frac{a_1 a_2 a_3}{4\pi} C_{ppmm} \int_{S(\mathbf{n})} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) l^{-3} dS(\mathbf{n}) = C_{pm} A_{pj} \tag{31}$$

$$A_{pj} = \frac{a_1 a_2 a_3}{4\pi} \int_{S(\mathbf{n})} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) l^{-3} dS(\mathbf{n}) = \frac{1}{4\pi} \int_{S(\mathbf{m})} n_p n_j \Omega_{pj}(\mathbf{n}) dS(\mathbf{m}) \tag{32}$$

と置くと、式(17)は、

$$\begin{aligned}
e_{jj}^c &= \eta_{mm} (c_p - c_M) \int_{\mathbf{r}'} C_{ppmm} G_{pj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' \\
&= e_{mm}^T \int_{\mathbf{r}'} C_{ppmm} G_{pj}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') d\mathbf{r}' = S_{jjmm} e_{mm}^T = C_{pm} A_{pj} e_{mm}^T
\end{aligned} \tag{33}$$

となる。なお、ここで、 \mathbf{r} 依存性がなくなるので変数 \mathbf{r} を省略した。結局、以上から、式(31)を計算し、式(33)を用いると等価変態歪と拘束歪の関係が得られる。

また等価介在物の基本式は、次式にて与えられる。

$$-\sigma_{ij} = C_{ijkl} (e_{kl}^c - e_{kl}^T) = C_{ijkl}^* (e_{kl}^c - e_{kl}^{T*}) \tag{34}$$

ここで、 C_{ijkl} と C_{ijkl}^* はそれぞれマトリックスと析出相の弾性率である。 e_{kl}^{T*} はeigen歪で、 e_{kl}^T が等価変態歪である。いま、境界条件で与えられる変数は、 C_{ijkl} , C_{ijkl}^* , e_{kl}^{T*} であり、関係式が(33)(34)で、知りたい変数が e_{kl}^c および e_{kl}^T である。以下、具体的に関係式を導こう。式(34)を書き下すことにより、

$$\begin{aligned}
C_{11}(e_{11}^c - e_{11}^T) + C_{12}(e_{22}^c - e_{22}^T) + C_{13}(e_{33}^c - e_{33}^T) &= C_{11}^*(e_{11}^c - e_{11}^{T*}) + C_{12}^*(e_{22}^c - e_{22}^{T*}) + C_{13}^*(e_{33}^c - e_{33}^{T*}) \\
C_{12}(e_{11}^c - e_{11}^T) + C_{22}(e_{22}^c - e_{22}^T) + C_{23}(e_{33}^c - e_{33}^T) &= C_{12}^*(e_{11}^c - e_{11}^{T*}) + C_{22}^*(e_{22}^c - e_{22}^{T*}) + C_{23}^*(e_{33}^c - e_{33}^{T*}) \\
C_{13}(e_{11}^c - e_{11}^T) + C_{23}(e_{22}^c - e_{22}^T) + C_{33}(e_{33}^c - e_{33}^T) &= C_{13}^*(e_{11}^c - e_{11}^{T*}) + C_{23}^*(e_{22}^c - e_{22}^{T*}) + C_{33}^*(e_{33}^c - e_{33}^{T*}) \\
e_{11}^c &= S_{1111}e_{11}^T + S_{1122}e_{22}^T + S_{1133}e_{33}^T \\
e_{22}^c &= S_{2211}e_{11}^T + S_{2222}e_{22}^T + S_{2233}e_{33}^T \\
e_{33}^c &= S_{3311}e_{11}^T + S_{3322}e_{22}^T + S_{3333}e_{33}^T
\end{aligned} \tag{35}$$

式(35)の6式を連立させることによって、未知数 $e_{11}^c, e_{22}^c, e_{33}^c$ および $e_{11}^T, e_{22}^T, e_{33}^T$ が選られる。式(35)を連立方程式形式に変形すると、

$$\begin{aligned}
(C_{11} - C_{11}^*)e_{11}^c + (C_{12} - C_{12}^*)e_{22}^c + (C_{13} - C_{13}^*)e_{33}^c - C_{11}e_{11}^T - C_{12}e_{22}^T - C_{13}e_{33}^T &= -C_{11}^*e_{11}^{T*} - C_{12}^*e_{22}^{T*} - C_{13}^*e_{33}^{T*} \\
(C_{12} - C_{12}^*)e_{11}^c + (C_{22} - C_{22}^*)e_{22}^c + (C_{23} - C_{23}^*)e_{33}^c - C_{12}e_{11}^T - C_{22}e_{22}^T - C_{23}e_{33}^T &= -C_{12}^*e_{11}^{T*} - C_{22}^*e_{22}^{T*} - C_{23}^*e_{33}^{T*} \\
(C_{13} - C_{13}^*)e_{11}^c + (C_{23} - C_{23}^*)e_{22}^c + (C_{33} - C_{33}^*)e_{33}^c - C_{13}e_{11}^T - C_{23}e_{22}^T - C_{33}e_{33}^T &= -C_{13}^*e_{11}^{T*} - C_{23}^*e_{22}^{T*} - C_{33}^*e_{33}^{T*} \\
e_{11}^c - S_{1111}e_{11}^T - S_{1122}e_{22}^T - S_{1133}e_{33}^T &= 0 \\
e_{22}^c - S_{2211}e_{11}^T - S_{2222}e_{22}^T - S_{2233}e_{33}^T &= 0 \\
e_{33}^c - S_{3311}e_{11}^T - S_{3322}e_{22}^T - S_{3333}e_{33}^T &= 0
\end{aligned} \tag{36}$$

である。なお、 S_{ijkl} は、以下のように展開される。

$$\begin{aligned}
C_{p1}A_{p1} \\
S_{1111} &= C_{p1}A_{p1} = C_{11}A_{11} + C_{21}A_{21} + C_{31}A_{31} \\
S_{2222} &= C_{p2}A_{p2} = C_{12}A_{12} + C_{22}A_{22} + C_{32}A_{32} \\
S_{3333} &= C_{p3}A_{p3} = C_{13}A_{13} + C_{23}A_{23} + C_{33}A_{33} \\
S_{1122} &= C_{p2}A_{p1} = C_{12}A_{11} + C_{22}A_{21} + C_{32}A_{31} \\
S_{2211} &= C_{p1}A_{p2} = C_{11}A_{12} + C_{21}A_{22} + C_{31}A_{32} \\
S_{2233} &= C_{p3}A_{p2} = C_{13}A_{12} + C_{23}A_{22} + C_{33}A_{32} \\
S_{3322} &= C_{p2}A_{p3} = C_{12}A_{13} + C_{22}A_{23} + C_{32}A_{33} \\
S_{1133} &= C_{p3}A_{p1} = C_{13}A_{11} + C_{23}A_{21} + C_{33}A_{31} \\
S_{3311} &= C_{p1}A_{p3} = C_{11}A_{13} + C_{21}A_{23} + C_{31}A_{33}
\end{aligned} \tag{37}$$

$$\begin{aligned}
A_{11} &= \frac{a_1 a_2 a_3}{4\pi} \int_{S(\mathbf{n})} n_1 n_1 \Omega_{11}(\mathbf{n}) l^{-3} dS(\mathbf{n}) = \frac{1}{4\pi} \int_{S(\mathbf{m})} n_1 n_1 \Omega_{11}(\mathbf{n}) dS(\mathbf{m}) \\
A_{22} &= \frac{a_1 a_2 a_3}{4\pi} \int_{S(\mathbf{n})} n_2 n_2 \Omega_{22}(\mathbf{n}) l^{-3} dS(\mathbf{n}) = \frac{1}{4\pi} \int_{S(\mathbf{m})} n_2 n_2 \Omega_{22}(\mathbf{n}) dS(\mathbf{m}) \\
A_{33} &= \frac{a_1 a_2 a_3}{4\pi} \int_{S(\mathbf{n})} n_3 n_3 \Omega_{33}(\mathbf{n}) l^{-3} dS(\mathbf{n}) = \frac{1}{4\pi} \int_{S(\mathbf{m})} n_3 n_3 \Omega_{33}(\mathbf{n}) dS(\mathbf{m}) \\
A_{12} &= \frac{a_1 a_2 a_3}{4\pi} \int_{S(\mathbf{n})} n_1 n_2 \Omega_{12}(\mathbf{n}) l^{-3} dS(\mathbf{n}) = \frac{1}{4\pi} \int_{S(\mathbf{m})} n_1 n_2 \Omega_{12}(\mathbf{n}) dS(\mathbf{m}) = A_{21} \\
A_{23} &= \frac{a_1 a_2 a_3}{4\pi} \int_{S(\mathbf{n})} n_2 n_3 \Omega_{23}(\mathbf{n}) l^{-3} dS(\mathbf{n}) = \frac{1}{4\pi} \int_{S(\mathbf{m})} n_2 n_3 \Omega_{23}(\mathbf{n}) dS(\mathbf{m}) = A_{32} \\
A_{13} &= \frac{a_1 a_2 a_3}{4\pi} \int_{S(\mathbf{n})} n_1 n_3 \Omega_{13}(\mathbf{n}) l^{-3} dS(\mathbf{n}) = \frac{1}{4\pi} \int_{S(\mathbf{m})} n_1 n_3 \Omega_{13}(\mathbf{n}) dS(\mathbf{m}) = A_{31}
\end{aligned} \tag{38}$$

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

$$\begin{aligned}
\Omega_{11}^{-1}(\mathbf{n}) &= C_{1qi1} n_q n_i = C_{1111} n_1 n_1 + C_{1221} n_2 n_2 + C_{1331} n_3 n_3 = C_{11} n_1^2 + C_{66} n_2^2 + C_{55} n_3^2 \\
\Omega_{22}^{-1}(\mathbf{n}) &= C_{2qi2} n_q n_i = C_{2112} n_1 n_1 + C_{2222} n_2 n_2 + C_{2332} n_3 n_3 = C_{66} n_1^2 + C_{22} n_2^2 + C_{44} n_3^2 \\
\Omega_{33}^{-1}(\mathbf{n}) &= C_{3qi3} n_q n_i = C_{3113} n_1 n_1 + C_{3223} n_2 n_2 + C_{3333} n_3 n_3 = C_{55} n_1^2 + C_{44} n_2^2 + C_{33} n_3^2 \\
\Omega_{12}^{-1}(\mathbf{n}) &= C_{1qi2} n_q n_i = C_{1122} n_1 n_2 + C_{1212} n_2 n_1 = (C_{12} + C_{66}) n_1 n_2 = \Omega_{21}^{-1}(\mathbf{n}) \\
\Omega_{23}^{-1}(\mathbf{n}) &= C_{2qi3} n_q n_i = C_{2233} n_2 n_3 + C_{2323} n_3 n_2 = (C_{23} + C_{44}) n_2 n_3 = \Omega_{32}^{-1}(\mathbf{n}) \\
\Omega_{31}^{-1}(\mathbf{n}) &= C_{3qi1} n_q n_i = C_{3311} n_3 n_1 + C_{3131} n_1 n_3 = (C_{13} + C_{55}) n_1 n_3 = \Omega_{13}^{-1}(\mathbf{n})
\end{aligned} \tag{39}$$

この逆行列から $\Omega_{pj}(\mathbf{n})$ を求めることが出来る。

式(36)をもう少し整理しておこう。式(36)の下の方の3式を上3式に代入し、拘束歪を消去すると次式が得られる。

$$\begin{aligned}
&-C_{11} e_{11}^T - C_{12} e_{22}^T - C_{13} e_{33}^T \\
&(C_{11} - C_{11}^*) e_{11}^c + (C_{12} - C_{12}^*) e_{22}^c + (C_{13} - C_{13}^*) e_{33}^c - C_{11} e_{11}^T - C_{12} e_{22}^T - C_{13} e_{33}^T \\
&= \{(C_{11} - C_{11}^*) S_{1111} + (C_{12} - C_{12}^*) S_{2211} + (C_{13} - C_{13}^*) S_{3311} - C_{11}\} e_{11}^T \\
&\quad + \{(C_{11} - C_{11}^*) S_{1122} + (C_{12} - C_{12}^*) S_{2222} + (C_{13} - C_{13}^*) S_{3322} - C_{12}\} e_{22}^T \\
&\quad + \{(C_{11} - C_{11}^*) S_{1133} + (C_{12} - C_{12}^*) S_{2233} + (C_{13} - C_{13}^*) S_{3333} - C_{13}\} e_{33}^T \\
&= -C_{11}^* e_{11}^{T*} - C_{12}^* e_{22}^{T*} - C_{13}^* e_{33}^{T*} \\
&(C_{21} - C_{21}^*) e_{11}^c + (C_{22} - C_{22}^*) e_{22}^c + (C_{23} - C_{23}^*) e_{33}^c - C_{21} e_{11}^T - C_{22} e_{22}^T - C_{23} e_{33}^T \\
&= \{(C_{21} - C_{21}^*) S_{1111} + (C_{22} - C_{22}^*) S_{2211} + (C_{23} - C_{23}^*) S_{3311} - C_{21}\} e_{11}^T \\
&\quad + \{(C_{21} - C_{21}^*) S_{1122} + (C_{22} - C_{22}^*) S_{2222} + (C_{23} - C_{23}^*) S_{3322} - C_{22}\} e_{22}^T \\
&\quad + \{(C_{21} - C_{21}^*) S_{1133} + (C_{22} - C_{22}^*) S_{2233} + (C_{23} - C_{23}^*) S_{3333} - C_{23}\} e_{33}^T \\
&= -C_{21}^* e_{11}^{T*} - C_{22}^* e_{22}^{T*} - C_{23}^* e_{33}^{T*}
\end{aligned} \tag{40}$$

$$\begin{aligned}
& (C_{31} - C_{31}^*)e_{11}^c + (C_{32} - C_{32}^*)e_{22}^c + (C_{33} - C_{33}^*)e_{33}^c - C_{31}e_{11}^T - C_{32}e_{22}^T - C_{33}e_{33}^T \\
& = \{(C_{31} - C_{31}^*)S_{1111} + (C_{32} - C_{32}^*)S_{2211} + (C_{33} - C_{33}^*)S_{3311} - C_{31}\}e_{11}^T \\
& \quad + \{(C_{31} - C_{31}^*)S_{1122} + (C_{32} - C_{32}^*)S_{2222} + (C_{33} - C_{33}^*)S_{3322} - C_{32}\}e_{22}^T \\
& \quad + \{(C_{31} - C_{31}^*)S_{1133} + (C_{32} - C_{32}^*)S_{2233} + (C_{33} - C_{33}^*)S_{3333} - C_{33}\}e_{33}^T \\
& = -C_{31}^*e_{11}^{T*} - C_{32}^*e_{22}^{T*} - C_{33}^*e_{33}^{T*}
\end{aligned}$$

ここで、変数は等価変態歪3つのみであるから、あらかじめ S_{ijmm} を数値計算しておけば、等価変態歪を解析的に導くことが出来る。等価変態歪が得られれば、式(35)から拘束歪も計算される。

また弾性歪エネルギー - は、以上の結果をふまえて、楕円体状析出粒子の場合、式(9)を変形することによって、

$$\begin{aligned}
E_{str} &= \frac{1}{2}C_{ijkl}\eta_{ij}\eta_{kl} \int (c - c_0)^2 d\mathbf{r} - \frac{1}{2}C_{ijkl}\eta_{kl} \int e_{ij}^c (c - c_0) d\mathbf{r} \\
&= -\frac{1}{2} \int [C_{ijkl}^* \eta_{kl} (c - c_0) e_{ij}^c - C_{ijkl}^* \eta_{ij} \eta_{kl} (c - c_0)^2] d\mathbf{r} \\
&= -\frac{1}{2} \int [C_{ijkl}^* e_{kl}^{T*} e_{ij}^c - C_{ijkl}^* e_{kl}^{T*} e_{ij}^{T*}] d\mathbf{r} \\
&= -\frac{1}{2} \int e_{kl}^{T*} C_{ijkl}^* (e_{ij}^c - e_{ij}^{T*}) d\mathbf{r} \\
&= \frac{V_p}{2} C_{ijkl}^* e_{kl}^{T*} (e_{ij}^{T*} - e_{ij}^c) \\
&= \frac{V_p}{2} C_{ijkl}^* e_{kl}^{T*} (e_{ij}^T - e_{ij}^c)
\end{aligned} \tag{41}$$

にて与えられる。 V_p は析出粒子の体積である。もう少し、書き下しておく。

$$E_{str} = \frac{V_p}{2} C_{ijkl}^* e_{kl}^{T*} (e_{ij}^{T*} - e_{ij}^c) = \frac{V_p}{2} [C_{ijkl}^* e_{ij}^{T*} e_{kl}^{T*} - C_{ijkl}^* e_{ij}^c e_{kl}^{T*}] \tag{42}$$

$$\begin{aligned}
C_{ijkl}^* e_{ij}^{T*} e_{kl}^{T*} &= C_{11}^* e_{11}^{T*} e_{11}^{T*} + C_{12}^* e_{11}^{T*} e_{22}^{T*} + C_{13}^* e_{11}^{T*} e_{33}^{T*} \\
& \quad + C_{21}^* e_{22}^{T*} e_{11}^{T*} + C_{22}^* e_{22}^{T*} e_{22}^{T*} + C_{23}^* e_{22}^{T*} e_{33}^{T*} \\
& \quad + C_{31}^* e_{33}^{T*} e_{11}^{T*} + C_{32}^* e_{33}^{T*} e_{22}^{T*} + C_{33}^* e_{33}^{T*} e_{33}^{T*}
\end{aligned} \tag{43}$$

$$\begin{aligned}
C_{ijkl}^* e_{ij}^c e_{kl}^{T*} &= C_{11}^* e_{11}^c e_{11}^{T*} + C_{12}^* e_{11}^c e_{22}^{T*} + C_{13}^* e_{11}^c e_{33}^{T*} \\
& \quad + C_{21}^* e_{22}^c e_{11}^{T*} + C_{22}^* e_{22}^c e_{22}^{T*} + C_{23}^* e_{22}^c e_{33}^{T*} \\
& \quad + C_{31}^* e_{33}^c e_{11}^{T*} + C_{32}^* e_{33}^c e_{22}^{T*} + C_{33}^* e_{33}^c e_{33}^{T*}
\end{aligned} \tag{44}$$

また、

$$m_1 = \frac{a_1 n_1}{\sqrt{a_1^2 n_1^2 + a_2^2 n_2^2 + a_3^2 n_3^2}}, \quad m_2 = \frac{a_2 n_2}{\sqrt{a_1^2 n_1^2 + a_2^2 n_2^2 + a_3^2 n_3^2}}, \quad m_3 = \frac{a_3 n_3}{\sqrt{a_1^2 n_1^2 + a_2^2 n_2^2 + a_3^2 n_3^2}}$$

より、 $\frac{a_1 n_1}{m_1} = \frac{a_2 n_2}{m_2} = \frac{a_3 n_3}{m_3} = \alpha = \sqrt{a_1^2 n_1^2 + a_2^2 n_2^2 + a_3^2 n_3^2}$ となる。

これより、 $n_1 = \frac{\alpha m_1}{a_1}$, $n_2 = \frac{\alpha m_2}{a_2}$, $n_3 = \frac{\alpha m_3}{a_3}$

ここで、 m_1, m_2, m_3 , と a_1, a_2, a_3 が与えられている場合、 $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1$ でなければならないので、 α は、

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = \alpha^2 \left(\frac{m_1^2}{a_1^2} + \frac{m_2^2}{a_2^2} + \frac{m_3^2}{a_3^2} \right) = 1$$

$$\alpha = \frac{1}{\sqrt{\frac{m_1^2}{a_1^2} + \frac{m_2^2}{a_2^2} + \frac{m_3^2}{a_3^2}}} \quad (45)$$

にて与えられる。これより、

$$n_1 = \frac{\alpha m_1}{a_1}, \quad n_2 = \frac{\alpha m_2}{a_2}, \quad n_3 = \frac{\alpha m_3}{a_3} \quad (46)$$

となる。