

Phase-field 微視力学に基づく 弾性歪エネルギー - の評価

by T.Koyama

1 . 変数設定

\mathbf{r} : 位置ベクトル

$\varepsilon_{ij}(\mathbf{r})$: 弾性歪

$\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r})$: 拘束歪 (全歪)

$\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r})$: eigen 歪

$\sigma_{ij}(\mathbf{r})$: 弾性応力

C_{ijkl} : 弾性率

F_{int} : 外力と eigen 歪場との相互作用エネルギー -

E_{inh} : 外力と内部不均一場 (elastic inhomogeneity) との相互作用エネルギー -

$\sigma_{ij}^A(\mathbf{r})$: 外部応力

$\varepsilon_{kl}^A(\mathbf{r})$: 外部応力に起因する弾性歪成分

X_i^A : 外部応力に起因する物体の表面力

σ_{ij}^{Inh} : inhomogeneousな析出物が存在することによる応力の変化量

u_i^{Inh} : inhomogeneousな析出物が存在することによる変位の変化量

S_{ijkl} : 弾性コンプライアンス ($S_{ijkl} = C_{ijkl}^{-1}$)

$G_{jk}^{-1}(\mathbf{k})$: $G_{jk}^{-1}(\mathbf{k}) \equiv C_{jlmk} k_l k_m$

$\eta(\alpha, p_\alpha, \mathbf{r})$: phase-field 変数

α : phase-field を定義する第一変数 (結晶方位や、すべり面番号等)

p_α : phase-field を定義する第二変数 (バリエーション番号や、すべり方向等)

$\varepsilon_{ij}^{00}(\alpha, p_\alpha)$: α および p_α によって規定される eigen 歪

\mathbf{k} : フーリエ空間の位置ベクトル (波数ベクトル)

$\tilde{\eta}(\alpha, p_\alpha, \mathbf{k})$: $\eta(\alpha, p_\alpha, \mathbf{r})$ のフーリエ変換

$\tilde{\sigma}_{ij}^0(\mathbf{k})$: $\sigma_{ij}^0(\mathbf{r}) \equiv C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r})$ のフーリエ変換

2 . 外力下における自由エネルギー - について

外力が存在することによって新たに生じる過剰エネルギー - には2種類ある。1つは外力とeigen歪場との相互作用エネルギー - F_{int} で、もう1つは地相内にinhomogeneityが存在する場合に生じる外力と内部不均一場との相互作用に起因する弾性歪エネルギー - E_{inh} である。まず F_{int} の評価法から説明しよう。まず初めに議論を簡単にするためhomogeneousな場合を考え、内部応力場を以下のように定義する。

$$\varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r})$$

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r}) = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}(\mathbf{r})$$

$$\sigma_{ij,j} = 0$$

$$\sigma_{ij} n_j = 0$$

(2-1)

以上は内部応力場のみに関連する関係式であるので、外力が作用していない状態に対応している。したがって体積力と面積力は共に0と仮定した。

一方、eigen歪が0で、外部応力のみが存在する場合の内部応力場および歪場を以下のように定義することができる (固溶体における応力場と考えると理解しやすい)。

$$\begin{aligned}
\sigma_{ij}^A(\mathbf{r}) &= C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^A(\mathbf{r}) \\
\sigma_{ij,j}^A &= 0 \\
\sigma_{ij}^A n_j &= X_i^A
\end{aligned} \tag{2-2}$$

以上でAが付いている変数は全て外部応力に関する項である（ここでも体積力は0と仮定した）、外力下であるので面積力は明らかに存在し、これが X_i^A である。

以上より整合析出物を含む固体に外部応力が作用している状態における全自由エネルギー - F は、物体の変位場に因する内部エネルギー - および面積力に起因する外部からの仕事の和として、次式にて与えられる。

$$\begin{aligned}
F &= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} (\sigma_{ij} + \sigma_{ij}^A)(\varepsilon_{ij} + \varepsilon_{ij}^A) d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{s}} X_i^A (u_i + u_i^A) d\mathbf{S} \\
&= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A \varepsilon_{ij}^A d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij}^A d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A \varepsilon_{ij} d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{s}} X_i^A u_i^A d\mathbf{S} - \int_{\mathbf{s}} X_i^A u_i d\mathbf{S}
\end{aligned} \tag{2-3}$$

ここで、 $\sigma_{ij}(\mathbf{r}) \varepsilon_{ij}^A(\mathbf{r}) = C_{ijkl}(\mathbf{r}) \varepsilon_{kl}(\mathbf{r}) \varepsilon_{ij}^A(\mathbf{r}) = \sigma_{kl}^A(\mathbf{r}) \varepsilon_{kl}(\mathbf{r}) = \sigma_{ij}^A(\mathbf{r}) \varepsilon_{ij}(\mathbf{r})$ であるから、

$$\int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}(\mathbf{r}) \varepsilon_{ij}^A(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A(\mathbf{r}) \varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \tag{2-4}$$

であり、さらにガウスの定理より導かれる

$$\int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}(\mathbf{r}) \varepsilon_{ij}^A(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int_{\mathbf{s}} \sigma_{ij} u_i^A n_j d\mathbf{S} - \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij,j} u_i^A d\mathbf{r} = 0 \tag{2-5}$$

を考慮すると、結局

$$\int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A(\mathbf{r}) \varepsilon_{ij}^A(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A(\mathbf{r}) \varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 0 \tag{2-6}$$

であることがわかる。これより式(2-3)は、

$$F = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A \varepsilon_{ij}^A d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{s}} X_i^A u_i^A d\mathbf{S} - \int_{\mathbf{s}} X_i^A u_i d\mathbf{S} \tag{2-7}$$

と表現できる。さらにこの4項目を改めて F_{int} と置く。式(2-2)と(2-6)から、

$$\begin{aligned}
F_{int} &= - \int_{\mathbf{s}} X_i^A u_i d\mathbf{S} = 0 - \int_{\mathbf{s}} X_i^A u_i d\mathbf{S} \\
&= \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij,j}^A u_i d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{s}} \sigma_{ij}^A u_i n_j d\mathbf{S} \\
&= - \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A(\mathbf{r}) u_{i,j}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
&= - \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A(\mathbf{r}) \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
&= - \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A(\mathbf{r}) \{ \varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) + \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \} d\mathbf{r} \\
&= - \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A(\mathbf{r}) \varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A(\mathbf{r}) \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = - \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A(\mathbf{r}) \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r}
\end{aligned} \tag{2-8}$$

となる。これより、 F_{int} が外部応力と内部eigen歪場の相互作用エネルギー - であることがわかる。なお、式(2-7)の第1項は内部応力のみが存在する時の弾性歪エネルギー - 、第2と第3項が外力のみ存

在した時の物体の有する力学的エネルギー - である。また式(2-6)のように外部応力 σ_{ij}^A と析出物のみが作る内部応力 σ_{ij} は相互作用しない。これはColonnettiの定理と呼ばれる。以上から、 F は

$$F = \frac{1}{2} \int_r \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_r \sigma_{ij}^A \varepsilon_{ij}^A d\mathbf{r} - \int_s X_i^A u_i^A d\mathbf{S} - \int_r \sigma_{ij}^A \varepsilon_{ij}^0 d\mathbf{r} \quad (2-9)$$

にて与えられる。

次にもう1つの外力との相互作用エネルギー - E_{inh} の評価法について説明する。議論を簡単化するため、eigen歪が0でinhomogeneousな析出物を含む固体に外力(面積力)のみが作用している場合を考える。外力のみが存在した時の応力を σ_{ij}^A 、および変位を u_i^A とし、inhomogeneousな析出物が存在することによる応力の変化量を σ_{ij}^{Inh} 、および変位の変化量を u_i^{Inh} とする。これより全応力 σ_{ij}^{total} および全変位 u_i^{total} は以下のように表される。

$$\begin{aligned} \sigma_{ij}^{total} &= \sigma_{ij}^A + \sigma_{ij}^{Inh} \\ u_i^{total} &= u_i^A + u_i^{Inh} \\ \sigma_{ij,j}^A &= \sigma_{ij,j}^{Inh} = 0 \\ \sigma_{ij}^{total} n_j &= \sigma_{ij}^A n_j = X_i^A \end{aligned}$$

外力のみの場合も、inhomogeneousな析出物が存在する場合も平衡方程式は満足される。また物体表面における面積力 X_i^A は、両場合において変化していないので、上式の最後の式が成立する。これより全自由エネルギー - F は次式にて与えられる。

$$\begin{aligned} F &= \frac{1}{2} \int_r \sigma_{ij}^{total} u_{i,j}^{total} d\mathbf{r} - \int_s X_i^A u_i^{total} d\mathbf{S} \\ &= \frac{1}{2} \int_r (\sigma_{ij}^A + \sigma_{ij}^{Inh})(u_{i,j}^A + u_{i,j}^{Inh}) d\mathbf{r} - \int_s X_i^A (u_i^A + u_i^{Inh}) d\mathbf{S} \\ &= \left[\frac{1}{2} \int_r \sigma_{ij}^A u_{i,j}^A d\mathbf{r} - \int_s X_i^A u_i^A d\mathbf{S} \right] \\ &\quad + \left[\frac{1}{2} \int_r \sigma_{ij}^A u_{i,j}^{Inh} d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_r \sigma_{ij}^{Inh} u_{i,j}^A d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_r \sigma_{ij}^{Inh} u_{i,j}^{Inh} d\mathbf{r} - \int_s X_i^A u_i^{Inh} d\mathbf{S} \right] \end{aligned} \quad (2-10)$$

第1項は外力のみ存在した時の弾性歪エネルギー - で、第2項が外力とinhomogeneousな析出物との相互作用エネルギー - である。第2項のみをを改めて E_{inh} と書くと、

$$\begin{aligned} E_{inh} &= \frac{1}{2} \int_r \sigma_{ij}^A u_{i,j}^{Inh} d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_r \sigma_{ij}^{Inh} u_{i,j}^A d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_r \sigma_{ij}^{Inh} u_{i,j}^{Inh} d\mathbf{r} - \int_s X_i^A u_i^{Inh} d\mathbf{S} \\ &= \frac{1}{2} \int_r \sigma_{ij}^A u_{i,j}^{Inh} d\mathbf{r} - \int_s X_i^A u_i^{Inh} d\mathbf{S} \\ &= \frac{1}{2} \int_s X_i^A u_i^{Inh} d\mathbf{S} - \int_s X_i^A u_i^{Inh} d\mathbf{S} = -\frac{1}{2} \int_s X_i^A u_i^{Inh} d\mathbf{S} = -\frac{1}{2} \int_r \sigma_{ij}^A u_{i,j}^{Inh} d\mathbf{r} \end{aligned} \quad (2-11)$$

と変形できる。ここで、

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^{Inh} u_{i,j}^A d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^{Inh} u_{i,j}^{Inh} d\mathbf{r} &= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^{Inh} u_{i,j}^{total} d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} (\sigma_{ij}^{total} - \sigma_{ij}^A) u_{i,j}^{total} d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{s}} (\sigma_{ij}^{total} - \sigma_{ij}^A) u_i^{total} n_j d\mathbf{S} - \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} (\sigma_{ij,j}^{total} - \sigma_{ij,j}^A) u_i^{total} d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{s}} (X_i^A - X_i^A) u_i^{total} d\mathbf{S} - 0 = 0
\end{aligned}$$

および

$$\frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A u_{i,j}^{Inh} d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{s}} \sigma_{ij}^A u_i^{Inh} n_j d\mathbf{S} - \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij,j}^A u_i^{Inh} d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{s}} X_i^A u_i^{Inh} d\mathbf{S}$$

を用いた。以上から F は、

$$\begin{aligned}
F &= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A u_{i,j}^A d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{s}} X_i^A u_i^A d\mathbf{S} + E_{inh} \\
&= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A u_{i,j}^A d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{s}} X_i^A u_i^A d\mathbf{S} - \frac{1}{2} \int_{\mathbf{s}} X_i^A u_i^{Inh} d\mathbf{S} \\
&= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A u_{i,j}^A d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{s}} X_i^A u_i^A d\mathbf{S} - \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A u_{i,j}^{Inh} d\mathbf{r}
\end{aligned} \tag{2-12}$$

にて与えられる。

さらに等価介在物の概念を用いて、inhomogeneousな応力場をhomogeneousな応力場で再現する等価変態歪 ε_{ij}^{0Inh} を導入したとしよう。これはエネルギー - の面から言えば、 E_{inh} を、 $F_{int}(\varepsilon_{ij}^{0Inh}$ と外力との相互作用エネルギー -) で書き直すことに他ならない。この場合、

$$E_{inh} = -\frac{1}{2} \int_{\mathbf{s}} X_i^A u_i^{Inh} d\mathbf{S} = -\frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A u_{i,j}^{Inh} d\mathbf{r} = -\frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A \varepsilon_{ij}^{0Inh} d\mathbf{r} = F_{int} \tag{2-13}$$

となるので、 $\varepsilon_{ij}^{0Inh} = u_{i,j}^{Inh}$ であることがわかる。

最後に式(2-9)と(2-12)より、eigen 歪による内部応力場、外力、および inhomogeneity が存在する場合は、

$$\begin{aligned}
F &= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A \varepsilon_{ij}^A d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{s}} X_i^A u_i^A d\mathbf{S} - \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A \varepsilon_{ij}^0 d\mathbf{r} - \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A u_{i,j}^{Inh} d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij} \varepsilon_{ij} d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A \varepsilon_{ij}^A d\mathbf{r} - \int_{\mathbf{s}} X_i^A u_i^A d\mathbf{S} - \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A (\varepsilon_{ij}^0 + \varepsilon_{ij}^{0Inh}) d\mathbf{r}
\end{aligned} \tag{2-14}$$

となるのがわかる (内部応力 σ_{ij} と ε_{ij}^{0Inh} のカップリング項が生じるが、Colonnetti の定理によりこの項は0となっている)

3 . Phase-field micromechanics に基づく弾性歪エネルギー - の基礎式

弾性歪エネルギー - は、

$$\begin{aligned}
E_{str} &= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) \varepsilon_{kl}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \frac{1}{V} \int_s X_i^A \bar{u}_i d\mathbf{S} \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) \varepsilon_{kl}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \{ \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \} \{ \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \} d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left[\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle - \delta\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \right] \left[\varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \rangle - \delta\varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \right] d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \{ \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \} \{ \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \rangle \} d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \\
&\quad - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left[\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \right] \delta\varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \delta\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \delta\varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \{ \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \} \{ \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \rangle \} d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \\
&\quad - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \delta\varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \delta\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \delta\varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r}
\end{aligned} \tag{3-1}$$

と表現できる。ここで、

$$\begin{aligned}
u_i(\mathbf{r}) &= \langle u_i(\mathbf{r}) \rangle + \delta u_i(\mathbf{r}) = \bar{u}_i + \delta u_i(\mathbf{r}) \\
\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) &= \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle + \delta\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r})
\end{aligned} \tag{3-2}$$

$$\begin{aligned}
\delta\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2} \{ \delta u_{i,j}(\mathbf{r}) + \delta u_{j,i}(\mathbf{r}) \}, \quad \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle = \frac{1}{2} (\bar{u}_{i,j} + \bar{u}_{j,i}) \\
\frac{1}{V} \int_s X_i^A \bar{u}_i d\mathbf{S} &= \frac{1}{V} \int_s \sigma_{ij}^A n_j \bar{u}_i d\mathbf{S} = \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij,j}^A \bar{u}_i d\mathbf{r} + \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A \bar{u}_{i,j} d\mathbf{r} = \sigma_{ij}^A \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle
\end{aligned} \tag{3-3}$$

である。 C_{ijkl} は弾性率で、ここではまず定数と仮定する。また σ_{ij}^A は外力で位置 \mathbf{r} に依存しない定数と仮定する。 $\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r})$ は物体内の位置 \mathbf{r} における全歪（拘束歪）で、 $\langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle$ はその空間平均値である。 $\delta\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r})$ は $\varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r})$ の平均値 $\langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle$ からの変動量で、この変動量分が変位場の勾配から導かれる。 $\langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle$ は、物体表面が拘束されていない場合、

$$\frac{\partial E_{str}}{\partial \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle} = 0 \tag{3-4}$$

を満たすように決定される。弾性歪エネルギー - 式(3-1)において、 $\langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle$ が関連する項は、

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \{ \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \} \{ \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \rangle \} d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \{ \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \langle \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \rangle + \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \langle \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \rangle \} d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \langle \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \rangle d\mathbf{r} - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2} C_{ijkl} \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \langle \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \rangle - C_{ijkl} \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2} C_{ijkl} \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \langle \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \rangle - C_{ijkl} \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle - \sigma_{ij}^A \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle
\end{aligned}$$

であるので、これを $\langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle$ で微分して、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E_{str}}{\partial \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle} &= C_{ijkl} \langle \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \rangle - C_{ijkl} \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle - \sigma_{ij}^A = 0 \\
C_{ijkl} \langle \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \rangle &= \sigma_{ij}^A + C_{ijkl} \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle \\
\langle \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \rangle &= S_{ijkl} \sigma_{ij}^A + \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle \\
\therefore \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle &= S_{klij} \sigma_{kl}^A + \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle = S_{ijkl} \sigma_{kl}^A + \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle
\end{aligned}$$

を得る。 S_{ijkl} は弾性コンプライアンス ($S_{ijkl} = C_{ijkl}^{-1}$) である。もし外力が存在しなければ、 $\langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle = \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle$ であることがわかる。さらに $\sigma_{ij}^A = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^A$ にて ε_{kl}^A を定義すると、

$$\langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle = S_{ijkl} \sigma_{kl}^A + \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle = \varepsilon_{ij}^A + \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \tag{3-5}$$

を得る。つまり全歪の平均値は、外力のみによる正味の歪量 ε_{ij}^A と eigen 歪の空間平均値 $\langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle$ の和にて与えられる。さて、これをあらためて式(3-1)に代入すると、

$$\begin{aligned}
E_{str} &= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left\{ \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \right\} \left\{ \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \rangle \right\} d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \\
&\quad - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \delta \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left[\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \left\{ \varepsilon_{ij}^A + \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \right\} \right] \left[\varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \left\{ \varepsilon_{kl}^A + \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle \right\} \right] d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \left\{ \varepsilon_{ij}^A + \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \right\} \\
&\quad - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \delta \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left[\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle - \varepsilon_{ij}^A \right] \left[\varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle - \varepsilon_{kl}^A \right] d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \left\{ \varepsilon_{ij}^A + \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \right\} d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \delta \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left[\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] \left[\varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left[\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] \varepsilon_{kl}^A d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^A \varepsilon_{kl}^A d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \left\{ \varepsilon_{ij}^A + \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \right\} d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \delta \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left[\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] \left[\varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \varepsilon_{kl}^A d\mathbf{r} + \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \varepsilon_{kl}^A d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^A \varepsilon_{kl}^A d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \left\{ \varepsilon_{ij}^A + \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \right\} d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \delta \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left[\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] \left[\varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^A \varepsilon_{kl}^A d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \left\{ \varepsilon_{ij}^A + \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \right\} d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \delta \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r}
\end{aligned} \tag{3-6}$$

となる。

さて、フックの法則、内部応力の釣り合い条件、および物体表面における面力と表面における応力の釣り合い条件

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r}) = C_{ijkl} \varepsilon_{kl}(\mathbf{r}) = C_{ijkl} \left\{ \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \right\} = C_{ijkl} \left[\langle \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \rangle + \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \right] \tag{3-4}$$

$$\sigma_{ij,j}(\mathbf{r}) = 0 \tag{3-5}$$

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r}_S) n_j(\mathbf{r}_S) = X_i^A(\mathbf{r}_S)$$

を仮定すると、

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} &= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}_S} \sigma_{ij}(\mathbf{r}_S) \delta u_i(\mathbf{r}_S) n_j(\mathbf{r}_S) d\mathbf{S} - \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij,j}(\mathbf{r}) \delta u_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
\frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left[\langle \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \rangle + \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \right] \delta \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} &= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}_S} X_i^A(\mathbf{r}_S) \delta u_i(\mathbf{r}_S) d\mathbf{S} \\
\frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \delta \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \delta \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} &= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}_S} X_i^A(\mathbf{r}_S) \delta u_i(\mathbf{r}_S) d\mathbf{S} \\
\therefore \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \delta \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} &= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \delta \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}_S} X_i^A(\mathbf{r}_S) \delta u_i(\mathbf{r}_S) d\mathbf{S}
\end{aligned}$$

であることがわかる。これを式(3-6)に代入して、

$$\begin{aligned}
E_{str} &= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left[\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] \left[\varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^A \varepsilon_{kl}^A d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \{ \varepsilon_{ij}^A + \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \} d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \delta \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left[\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] \left[\varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^A \varepsilon_{kl}^A d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \{ \varepsilon_{ij}^A + \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \} d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \delta \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{s}} X_i^A(\mathbf{r}_s) \delta u_i(\mathbf{r}_s) d\mathbf{S} \quad (3-6) \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left[\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] \left[\varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
&\quad + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^A \varepsilon_{kl}^A d\mathbf{r} - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A \varepsilon_{ij}^A d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{s}} X_i^A(\mathbf{r}_s) \delta u_i(\mathbf{r}_s) d\mathbf{S}
\end{aligned}$$

を得る。さらに、

$$-\frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij}^A \varepsilon_{ij}^A d\mathbf{r} = -\frac{1}{V} \left\{ \int_{\mathbf{s}} \sigma_{ij}^A(\mathbf{r}_s) u_i^A(\mathbf{r}_s) n_j(\mathbf{r}_s) d\mathbf{S} - \int_{\mathbf{r}} \sigma_{ij,j}^A(\mathbf{r}) u_i^A(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right\} = -\frac{1}{V} \int_{\mathbf{s}} X_i^A(\mathbf{r}_s) u_i^A(\mathbf{r}_s) d\mathbf{S}$$

および、

$$\frac{1}{2V} \int_{\mathbf{s}} X_i^A(\mathbf{r}_s) \delta u_i(\mathbf{r}_s) d\mathbf{S} = 0$$

(この項は物体表面における外力に起因する面力と全歪変動量に起因する変位変動から構成される仕事であるが、定義から $\int_{\mathbf{s}} \delta u_i(\mathbf{r}_s) d\mathbf{S} = 0$ であり、 $X_i^A(\mathbf{r}_s)$ と $\delta u_i(\mathbf{r}_s)$ が独立であれば、統計的にこの項は0となると考えられる。また、もともと物体が十分に大きいと仮定すると表面項は体積に対して無限小となり省略することができる。)

を考慮して、最終的に弾性歪エネルギー - は、

$$\begin{aligned}
E_{str} &= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left[\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] \left[\varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (3-7) \\
&\quad + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^A \varepsilon_{kl}^A d\mathbf{r} - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{s}} X_i^A(\mathbf{r}_s) u_i^A(\mathbf{r}_s) d\mathbf{S}
\end{aligned}$$

にて与えられる(式(2-9)と対応している)。特に最後の2項は外力のみに関係したエネルギー - であるので、これを改めてエネルギー - の基準にとり、弾性歪エネルギー - を、

$$\begin{aligned}
E_{str} &= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left[\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] \left[\varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r}
\end{aligned}$$

と表現する場合もある。

さてこの式を逆空間にて表現しよう。先に結果を示す。

$$\begin{aligned}\tilde{\sigma}_{ij}^0(\mathbf{k}) &= \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ G_{jk}^{-1}(\mathbf{k}) &\equiv C_{jlmk} k_l k_m\end{aligned}\quad (3-8)$$

を定義すると、弾性歪エネルギー - 式(3-7)は、

$$\begin{aligned}E_{str} &= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left[\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] \left[\varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &\quad - \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \tilde{\sigma}_{ij}^0(\mathbf{k}) k_i G_{jk}(\mathbf{k}) k_l \tilde{\sigma}_{kl}^{0*}(\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\ &\quad + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^A \varepsilon_{kl}^A d\mathbf{r} - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{s}} X_i^A(\mathbf{r}_S) u_i^A(\mathbf{r}_S) d\mathbf{S}\end{aligned}\quad (3-9)$$

にて与えられる。以下この式の定式化について説明する。まず eigen 歪は、

$$\begin{aligned}\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) &= \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \sum_{p_\alpha=1}^{n_p} \varepsilon_{ij}^{00}(\alpha, p_\alpha) \eta(\alpha, p_\alpha, \mathbf{r}) \\ &= \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \sum_{p_\alpha=1}^{n_p} \varepsilon_{ij}^{00}(\alpha, p_\alpha) \int_{\mathbf{k}} \tilde{\eta}(\alpha, p_\alpha, \mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\ &= \int_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \sum_{p_\alpha=1}^{n_p} \varepsilon_{ij}^{00}(\alpha, p_\alpha) \tilde{\eta}(\alpha, p_\alpha, \mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\end{aligned}\quad (3-10)$$

となり、また拘束歪は、

$$\begin{aligned}\delta\varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} C_{pqmn} \{k_q G_{pl}(\mathbf{k}) k_k + k_q G_{pk}(\mathbf{k}) k_l\} \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \sum_{p_\alpha=1}^{n_p} \varepsilon_{mn}^{00}(\alpha, p_\alpha) \tilde{\eta}(\alpha, p_\alpha, \mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\ &= \int_{\mathbf{k}} C_{pqmn} k_q G_{pl}(\mathbf{k}) k_k \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \sum_{p_\alpha=1}^{n_p} \varepsilon_{mn}^{00}(\alpha, p_\alpha) \tilde{\eta}(\alpha, p_\alpha, \mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\end{aligned}\quad (3-11)$$

と表現されるので、

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \delta\varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left\{ \int_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \sum_{p_\alpha=1}^{n_p} \varepsilon_{ij}^{00}(\alpha, p_\alpha) \tilde{\eta}(\alpha, p_\alpha, \mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \right\} \left\{ \int_{\mathbf{k}'} k_q G_{pl}(\mathbf{k}') k_k C_{pqmn} \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \sum_{p_\alpha=1}^{n_p} \varepsilon_{mn}^{00}(\alpha, p_\alpha) \tilde{\eta}(\alpha, p_\alpha, \mathbf{k}') \exp(i\mathbf{k}'\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \right\} d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left\{ \int_{\mathbf{k}} \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \sum_{p_\alpha=1}^{n_p} \varepsilon_{ij}^{00}(\alpha, p_\alpha) \tilde{\eta}(\alpha, p_\alpha, \mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \right\} \left\{ \int_{\mathbf{k}'} k_q G_{pl}(\mathbf{k}') k_k C_{pqmn} \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \sum_{p_\alpha=1}^{n_p} \varepsilon_{mn}^{00}(\alpha, p_\alpha) \tilde{\eta}(\alpha, p_\alpha, \mathbf{k}') \exp(i\mathbf{k}'\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \right\} d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \int_{\mathbf{k}'} k_q G_{pl}(\mathbf{k}) k_k C_{pqmn} C_{ijkl} \left\{ \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \sum_{p_\alpha=1}^{n_p} \varepsilon_{mn}^{00}(\alpha, p_\alpha) \tilde{\eta}(\alpha, p_\alpha, \mathbf{k}) \right\} \left\{ \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \sum_{p_\alpha=1}^{n_p} \varepsilon_{ij}^{00}(\alpha, p_\alpha) \tilde{\eta}(\alpha, p_\alpha, \mathbf{k}') \right\} \left[\frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \exp\{i(\mathbf{k}'+\mathbf{k})\mathbf{r}\} d\mathbf{r} \right] \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \int_{\mathbf{k}'} k_q G_{pl}(\mathbf{k}) k_k C_{pqmn} C_{ijkl} \left\{ \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \sum_{p_\alpha=1}^{n_p} \varepsilon_{mn}^{00}(\alpha, p_\alpha) \tilde{\eta}(\alpha, p_\alpha, \mathbf{k}) \right\} \left\{ \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \sum_{p_\alpha=1}^{n_p} \varepsilon_{ij}^{00}(\alpha, p_\alpha) \tilde{\eta}(\alpha, p_\alpha, \mathbf{k}') \right\} \delta(\mathbf{k}'+\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} k_q G_{pl}(\mathbf{k}) k_k \left\{ \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \sum_{p_\alpha=1}^{n_p} C_{pqmn} \varepsilon_{mn}^{00}(\alpha, p_\alpha) \tilde{\eta}(\alpha, p_\alpha, \mathbf{k}) \right\} \left\{ \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \sum_{p_\alpha=1}^{n_p} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^{00}(\alpha, p_\alpha) \tilde{\eta}(\alpha, p_\alpha, -\mathbf{k}) \right\} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \tilde{\sigma}_{pq}^0(\mathbf{k}) k_q G_{pl}(\mathbf{k}) k_k \tilde{\sigma}_{kl}^0(-\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \tilde{\sigma}_{ij}^0(\mathbf{k}) k_j G_{il}(\mathbf{k}) k_k \tilde{\sigma}_{kl}^0(-\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \tilde{\sigma}_{ij}^0(\mathbf{k}) k_i G_{jk}(\mathbf{k}) k_l \tilde{\sigma}_{kl}^0(-\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\end{aligned}$$

であり、

$$\frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \tilde{\sigma}_{ij}^0(\mathbf{k}) k_i G_{jk}(\mathbf{k}) k_l \tilde{\sigma}_{kl}^0(-\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \quad (3-12)$$

であることがわかる。式(3-9)は式(3-7)に上式を代入した結果である。ここで、

$$\tilde{\sigma}_{ij}^0(\mathbf{k}) = \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \sum_{p_\alpha=1}^{n_p} C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^{00}(\alpha, p_\alpha) \tilde{\eta}(\alpha, p_\alpha, \mathbf{k}) \quad (3-13)$$

である。先に式(3-8)にて $\tilde{\sigma}_{ij}^0(\mathbf{k}) = \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ としたが、これに式(3-10)を代入して、

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{ij}^0(\mathbf{k}) &= \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left[\int_{\mathbf{k}'} \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \sum_{p_\alpha=1}^{n_p} \varepsilon_{kl}^{00}(\alpha, p_\alpha) \tilde{\eta}(\alpha, p_\alpha, \mathbf{k}') \exp(i\mathbf{k}'\mathbf{r}) \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \right] \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\ &= \int_{\mathbf{k}'} \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \sum_{p_\alpha=1}^{n_p} C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^{00}(\alpha, p_\alpha) \tilde{\eta}(\alpha, p_\alpha, \mathbf{k}') \left[\frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \exp\{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k})\mathbf{r}\} d\mathbf{r} \right] \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \\ &= \int_{\mathbf{k}'} \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \sum_{p_\alpha=1}^{n_p} C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^{00}(\alpha, p_\alpha) \tilde{\eta}(\alpha, p_\alpha, \mathbf{k}') \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \\ &= \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \sum_{p_\alpha=1}^{n_p} C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^{00}(\alpha, p_\alpha) \tilde{\eta}(\alpha, p_\alpha, \mathbf{k}) \end{aligned}$$

となり、式(3-8)と(3-13)が対応していることがわかる。

さて、弾性ポテンシャルを算出しよう。ポテンシャルを計算する際には、平衡方程式を用いる以前の弾性歪エネルギー - 式を基礎に出発する。弾性歪エネルギー - は式(3-6)から、

$$\begin{aligned} E_{str} &= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left[\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] \left[\varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^A \varepsilon_{kl}^A d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \{ \varepsilon_{ij}^A + \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \} d\mathbf{r} \\ &\quad - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \delta \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \end{aligned}$$

と表現できる。したがって、弾性ポテンシャルは、

$$\begin{aligned} \chi_{str}(\mathbf{r}) &= \frac{\partial E_{str}}{\partial \eta(\alpha, p_\alpha, \mathbf{r})} = \frac{\partial E_{str}}{\partial \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r})} \frac{\partial \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r})}{\partial \eta(\alpha, p_\alpha, \mathbf{r})} \\ &= - \left\{ C_{ijkl} \left[\delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) - \{ \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle \} \right] - \sigma_{ij}^A \right\} \frac{\partial \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r})}{\partial \eta(\alpha, p_\alpha, \mathbf{r})} \end{aligned} \quad (3-14)$$

にて与えられる。実空間表示で、eigen 歪は、

$$\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha=1}^{n_\alpha} \sum_{p_\alpha=1}^{n_p} \varepsilon_{ij}^{00}(\alpha, p_\alpha) \eta(\alpha, p_\alpha, \mathbf{r})$$

であるので、

$$\frac{\partial \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r})}{\partial \eta(\alpha, p_\alpha, \mathbf{r})} = \varepsilon_{ij}^{00}(\alpha, p_\alpha) \quad (3-15)$$

である。したがって、弾性ポテンシャルは、

$$\chi_{str}(\mathbf{r}) = -\left\{ C_{ijkl} \left[\delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) - \left\{ \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle \right\} \right] - \sigma_{ij}^A \right\} \varepsilon_{ij}^{00}(\alpha, p_\alpha) \quad (3-16)$$

にて与えられる。

4 . 外力の分類

外力の取扱い方には物体の外形に関する境界条件に基づき大きく次の2通りに分かれる。

- (1) 物体外部を拘束し外形を固定する場合
- (2) 物体外部を拘束せず外形変形を許容する場合

外力下で (1) の条件が成立するということは、全歪の平均値 $\langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle$ が ε_{ij}^A に一致すれば良い。すなわち、

$$\langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle = \varepsilon_{ij}^A, \quad \bar{u}_i = 0 \quad (4-1)$$

が条件となる。また境界条件からすでに $\langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle$ が固定されているので、 $\partial E_{str} / \partial \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle = 0$ の条件は成立していない。したがって、弾性歪エネルギー - は直接、式(3-1)より導かなくてはならない。つまり、

$$\begin{aligned}
E_{str} &= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) \varepsilon_{kl}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \frac{1}{V} \int_s X_i^A \bar{u}_i d\mathbf{S} = \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}(\mathbf{r}) \varepsilon_{kl}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \{ \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \} \{ \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \} d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left[\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle - \delta \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \right] \left[\varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \rangle - \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \right] d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \{ \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \} \{ \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \rangle \} d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left[\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \right] \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \delta \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \{ \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle \} \{ \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) \rangle \} d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \delta \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \{ \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \varepsilon_{ij}^a \} \{ \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \varepsilon_{kl}^a \} d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \delta \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \varepsilon_{kl}^a d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^a \varepsilon_{kl}^a d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \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} \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle - C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^a \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle + \frac{1}{2} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^a \varepsilon_{kl}^a \\
&\quad - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \delta \varepsilon_{kl}^c(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \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} \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle - C_{ijkl} \varepsilon_{kl}^a \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle + \frac{1}{2} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^a \varepsilon_{kl}^a - \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \tilde{\sigma}_{ij}^0(\mathbf{k}) k_i G_{jk}(\mathbf{k}) k_l \tilde{\sigma}_{kl}^{0*}(\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}
\end{aligned} \tag{4-2}$$

となる。

一方、(2)の場合、物体は $\partial E_{str} / \partial \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle = 0$ の条件を満たすように変形できるので、全歪の平均値は、 $\partial E_{str} / \partial \langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle = 0$ の条件より eigen 歪と外力による歪の和となり、

$$\langle \varepsilon_{ij}^c(\mathbf{r}) \rangle = \varepsilon_{ij}^A + \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \tag{4-3}$$

と表現される。したがって、弾性歪エネルギー - は、式(3-9)

$$\begin{aligned}
E_{str} &= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left[\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] \left[\varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] d\mathbf{r} \\
&\quad + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^A \varepsilon_{kl}^A d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \{ \varepsilon_{ij}^A + \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \} d\mathbf{r} - \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \tilde{\sigma}_{ij}^0(\mathbf{k}) k_i G_{jk}(\mathbf{k}) k_l \tilde{\sigma}_{kl}^{0*}(\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \left[\varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] \left[\varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) - \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle \right] d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^A \varepsilon_{kl}^A d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \tilde{\sigma}_{ij}^0(\mathbf{k}) k_i G_{jk}(\mathbf{k}) k_l \tilde{\sigma}_{kl}^{0*}(\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{2V} \int_{\mathbf{r}} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^A \varepsilon_{kl}^A d\mathbf{r} - \sigma_{ij}^A \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \tilde{\sigma}_{ij}^0(\mathbf{k}) k_i G_{jk}(\mathbf{k}) k_l \tilde{\sigma}_{kl}^{0*}(\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= \frac{1}{2} C_{ijkl} \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle - C_{ijkl} \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle + \frac{1}{2} C_{ijkl} \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle \\
&\quad - \frac{1}{2} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^A \varepsilon_{kl}^A - \sigma_{ij}^A \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \tilde{\sigma}_{ij}^0(\mathbf{k}) k_i G_{jk}(\mathbf{k}) k_l \tilde{\sigma}_{kl}^{0*}(\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= \frac{1}{2} C_{ijkl} \left\{ \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle - \langle \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) \rangle \langle \varepsilon_{kl}^0(\mathbf{r}) \rangle \right\} - \frac{1}{2} C_{ijkl} \varepsilon_{ij}^A \varepsilon_{kl}^A - \sigma_{ij}^A \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} \varepsilon_{ij}^0(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \\
&\quad - \frac{1}{2} \int_{\mathbf{k}} \tilde{\sigma}_{ij}^0(\mathbf{k}) k_i G_{jk}(\mathbf{k}) k_l \tilde{\sigma}_{kl}^{0*}(\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}
\end{aligned} \tag{4-4}$$

となる。