結晶の対称性と弾性定数

–(まだ少々間違いが潜んでゐると思われるので注意)–

1　準備体操

1.1　ベクトルの成分表示

３次元の空間において、３つの基本ベクトル (基底) を $\boldsymbol{e}_x = (1,0,0)$、$\boldsymbol{e}_y = (0,1,0)$、$\boldsymbol{e}_z = (0,0,1)$ としたとき、位置やベクトルは、

$$\boldsymbol{x} = x\boldsymbol{e}_x + y\boldsymbol{e}_y + z\boldsymbol{e}_z$$

で表される。通常は基本ベクトルについては省略し、成分だけを用いて $\boldsymbol{x} = (x,y,z)$ と表記する。**同一のベクトル**について、基本ベクトルを別のもの ($\boldsymbol{f}_x$、$\boldsymbol{f}_y$、$\boldsymbol{f}_z$ とする) に変えた場合でも、その表記は同様であり、

$$\boldsymbol{x}' = x'\boldsymbol{f}_x + y'\boldsymbol{f}_y + z'\boldsymbol{f}_z$$

あるいは $\boldsymbol{x}' = (x', y', z')$ のように成分で表示する。成分どうしの変換は、行列を使って次のように記述する。

$$\begin{bmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} q_{11} & q_{12} & q_{13} \\ q_{21} & q_{22} & q_{23} \\ q_{31} & q_{32} & q_{33} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix} \tag{1}$$

この行列 $\boldsymbol{Q} = q_{ij}$ が、座標変換 ($\boldsymbol{e}$ 系 $\rightarrow$ $\boldsymbol{f}$ 系) に伴う、成分の変換行列である[1]。逆変換、すなわち $\boldsymbol{f}$ 系→ $\boldsymbol{e}$ 系への変換行列は、もとの行列の逆行列である。

上記の変換の中でとくに重要なものは、$\boldsymbol{e}$ 系と $\boldsymbol{f}$ 系がともに正規直交基底 (３つの基本ベクトルの大きさが１で、互いに直交する座標系) の場合である。この場合、$\boldsymbol{Q}$ の成分 q_{ij} は、変換後の基底 f_i と変換前の基底 e_j の内積 (方向余弦になる)、すなわち

$$q_{ij} = \boldsymbol{f}_i \cdot \boldsymbol{e}_j$$

で表される。また逆行列は、もとの行列の転置行列となる。すなわち $\boldsymbol{Q}^{-1} = {}^t\boldsymbol{Q}$ である。

[1] 通常は「座標変換行列」と言うが、以下に記す「基本ベクトルの変換式」とごっちゃになって、添字の順番を間違いそうになるので、本稿ではこのように呼ぶことにする。「成分の変換行列」の成分 q_{ij} を使って、基本ベクトル自体がどのように変換されるかを記述する場合、各 $\boldsymbol{e}_i$ を $\boldsymbol{f}_j$ の線形結合で記述することになるので、以下のようになる。

$$\begin{aligned} \boldsymbol{e}_x &= q_{11}\boldsymbol{f}_x + q_{21}\boldsymbol{f}_y + q_{31}\boldsymbol{f}_z \\ \boldsymbol{e}_y &= q_{12}\boldsymbol{f}_x + q_{22}\boldsymbol{f}_y + q_{32}\boldsymbol{f}_z \\ \boldsymbol{e}_z &= q_{13}\boldsymbol{f}_x + q_{23}\boldsymbol{f}_y + q_{33}\boldsymbol{f}_z \end{aligned}$$

式 (1) とは違って、$\boldsymbol{e}$ 系が左、$\boldsymbol{f}$ 系が右に来ているので、添字の順が逆転して見えることに注意されたい。

1.2　演算子／写像を座標変換すると...

ある座標系 ($\boldsymbol{e}$ 系) において、ベクトル $\boldsymbol{x}$ と ベクトル $\boldsymbol{y}$ が、行列 $\boldsymbol{A} = (a_{ij})$ によって $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ のように関係づけられていたとする。このとき $\boldsymbol{A}$ は、演算子や写像 (関数)、あるいは２階テンソルに相当するものであって、先に出て来た座標変換にともなう成分の変換行列とは別モノであるから注意すること (同じ形になってややこしいが、区別をしっかり付けること)。具体的な例を挙げると、例えば、誘電率 $\boldsymbol{\varepsilon}$ の誘電体に電場 $\boldsymbol{E}$ をかけたときに生じる分極 $\boldsymbol{p}$ は

$$\boldsymbol{p} = \boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{E} \tag{2}$$

である。$\boldsymbol{p}$、$\boldsymbol{E}$ はそれぞれベクトルであり、$\boldsymbol{\varepsilon}$ は、もし材料に異方性がなければただの定数であるが、異方性がある場合は 2x2 行列で表される２階テンソルである。式 (2) で表されるような、２階テンソルを介しての二つのベクトルの関係を表す式は、物理法則でよく現れる。

物理法則において、ベクトルやテンソルは通常、正規直交系で表示する。「物理法則」であるからには、別の正規直交系で表示した場合でもまったく同じ形で表されなくてはならない。すなわち $\boldsymbol{e}$ 系における式 (2) の関係は、$\boldsymbol{f}$ 系でも同様に、

$$\boldsymbol{p}' = \boldsymbol{\varepsilon}'\boldsymbol{E}' \tag{3}$$

のように記述されなければならない。ただし、成分の数値はある規則に従って変換される。今までどおり、基底 (直交基底) を $\boldsymbol{e}$ 系から $\boldsymbol{f}$ 系へ変換した場合の成分変換を表す行列を $\boldsymbol{Q} = (q_{ij})$ で表すことにすると、$\boldsymbol{e}$ 系における $\boldsymbol{p}$ と $\boldsymbol{E}$ はそれぞれベクトルだから、$\boldsymbol{f}$ 系におけるそれらの成分は、変換行列 $\boldsymbol{Q}$ を作用させることにより、$\boldsymbol{p}' = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{p}$、$\boldsymbol{E}' = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{E}$ で表される。では $\boldsymbol{\varepsilon}$ と $\boldsymbol{\varepsilon}'$ の関係はどう記述されるであろうか？

まず、式 (2) の両辺に、左側から $\boldsymbol{Q}$ を作用させてみる。

$$\boldsymbol{Q}\boldsymbol{p} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{E}$$

この式で、$\boldsymbol{\varepsilon}$ と $\boldsymbol{E}$ の間に、単位行列 $\boldsymbol{I}$ に $\boldsymbol{I} = \boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{Q}$ という小細工を加えて挿入し、結合を変えてみる。

$$\boldsymbol{Q}\boldsymbol{p} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{\varepsilon}(\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{Q})\boldsymbol{E} \quad \rightarrow \quad \therefore \boldsymbol{Q}\boldsymbol{p} = (\boldsymbol{Q}\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{Q}^{-1})(\boldsymbol{Q}\boldsymbol{E})$$

つまり、$\boldsymbol{\varepsilon}' = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{Q}^{-1}$ と書いてやれば、$\boldsymbol{p}' = \boldsymbol{\varepsilon}'\boldsymbol{E}'$ の形で記述できたと言うことができる。これらをまとめると、

成分の変換が行列 $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{q}_{ij}$ で表されるような座標変換を行うことによって、

1) **ベクトル $\boldsymbol{x}$ は $\boldsymbol{Qx}$ に変換され、**

2) **演算子・写像・テンソル (２階)$\boldsymbol{T}$ は $\boldsymbol{QTQ}^{-1}$ に変換される。**

ということである。

2　線型弾性論における Hooke の法則

結晶の対称性と弾性定数の関係を考察するにあたって、ここでは応力・歪みについて、最小限の概略を述べる。詳細は固体力学の本を別途あたっていただきたい。

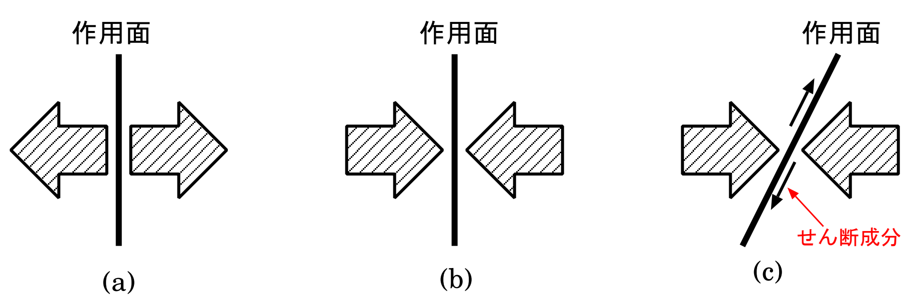
2.1　応力テンソル

物体に力が加わると、加速度が発生する。動かないように反対側から力を加えると、物体を介して力の和はゼロになるが、力自体はゼロになるわけではなく、圧力あるいは張力のような形で物体にかかる。その結果、物体は変形する (歪む)。変形を考察する場合、物体が動くのは都合が悪いので、力はつねに釣り合っていて、合力はゼロであるとする。

物体の中に、一つの平面があるとする (切り口というワケではないので注意)。この面の両側から、面に垂直な力をかけて物体を引っ張った場合は、その面を介して両側から張力がかかる (Fig.1 (a))。逆に圧縮した場合は、面を介して両側に圧力がかかる (Fig.1 (b))。このような力を垂直応力と言う。「応力」は単位面積あたりにかかる力である。垂直応力は、圧縮の場合をマイナス、引っ張りの場合をプラスとする。

力のかかる方向が面内にある場合は剪断 (せんだん) 応力と言う。この場合は、面を押したり引っ張ったりするのではなく、ずらすような力である。

面が力の方向に対して平行でも垂直でもない場合は、垂直応力と剪断応力に分解して考えることが多い。



ここで Fig.1(b) と (c) を見てほしい。面を考えないならば、力のかかりかたは両者とも同じである。しかし面にかかる力を考えると、(b) は垂直応力だけであり、(c) には剪断成分が生じている。面のとり方によって、剪断成分が生じたり生じなかったりする。応力とはこのように、**力の作用する方向と作用する面の向きの両方を指定して初めて記述できるもの**なのである。作用する方向はベクトルであり、面も法線ベクトルによって指定されるものだから、応力は「２個のベクトルの関数である」と言うことができる。２個のベクトルに依存する、このような物理量を「２階テンソル」と言う[2]。一般に、n 個のベクトルに線形的に依存する量は n 階テンソルと言う。２階テンソルは二つのベクトルに依存するから、応力の場合、その 9 個の成分は二つの添字 i, j を使って σ_{ij}(i, j は x, y, z のいずれか) のように書ける。先に「2 階テンソルは 2 個のベクトルの関数である」と記したが、応力については最初の添字が面の法線ベクトルに関するもの、後の添字が力の方向に関するものである。すなわち σ_{ij} とは、i 軸方向に垂直な面についての j 軸方向の力 (単位面積あたり) を表す。$i = j$ なら垂直応力、$i \neq j$ なら剪断応力である。また、２階テンソルは成分を並べて行列のような形にも書くことができる。

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \quad \text{あるいは} \quad \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{pmatrix} \tag{4}$$

成分の数は座標軸の数の自乗すなわち $3 \times 3 = 9$ 個であるが、応力の場合は力が釣合うこと・回転しないこと等[3]を考慮すると、$\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$ という制限が生まれるので、9 個の成分のうち、独立な成分の数は 6 個になる。

2.2 歪みテンソル

歪みも応力と同様に、$3 \times 3 = 9$ の成分を持つ２階テンソルである。したがって、添字を二つ持ち、ε_{ij} で表される。これは、「i 軸に垂直な面に関する、j 軸方向の歪み」を表しており、応力と同様に、$i = j$ なら垂直歪み、$i \neq j$ なら剪断歪みであり、また $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ が成立し、独立な成分は 6 個である。応力と同じ２階テンソルであり、成分は応力と同様の対称性を持つが、それが導出される根拠は少し違っている。ここでは詳細は述べないが、簡単に定義だけ記しておく。

[2] 田代嘉宏「テンソル解析」裳華房 (1981)、石原繁「テンソル」裳華房 (1991) 等
[3] これだけでは無いのですが、本テキストでは詳細は略します。

2.2.1 歪みの定義：概略

歪みは物体の変形を示す数値であるから、変形前後の位置の変化に依存することは言うまでもない。しかし、歪みを記述する指標として「位置」を選んだ場合、単純な平行移動も検知してしまうことになる。これを除外したいなら、位置 (x, y, z) ではなく各点の変位 $u(x, y, z)$ を指標として選び、**位置の微小変化に伴う変位の微小変化**をもとにして記述する。そうすれば、平行移動においては、各点での変位は同じになるから、変位の微小変化はゼロになる。変位の微小変化は変位の偏微分 $\partial u_i/\partial j$ 等を使って表すことができる。ここで、i, j は x, y, z のいずれかで、u_i は変位の成分である。

しかし、単純にこれらの偏微分係数だけでは、歪みを表すためにはまだ不充分である。変位の微小変化というだけでは、「歪みを伴わない純粋回転」というケースを除外できない。$\partial u_i/\partial j$ をそのまま使うだけだと、純粋回転の場合であっても、ゼロではない何らかの値が出てしまう。

それなら、物体の純粋回転については、変な数値を生み出さないような別の量をうまく作って歪みを定義するのが得策である。ただ、これを書くと長くなってしまうので、詳細は別の本[4]で勉強していただくこととして、ここでは結果だけを記しておく。歪みを

$$\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(\frac{\partial u_i}{\partial j} + \frac{\partial u_j}{\partial i}) \quad (i, j = x, y, z) \tag{5}$$

で定義すると、並行移動も回転も除去された、物体の変形だけを見ることができる。この式で定義される歪みは「歪みテンソル」と呼ばれる。応力の場合と同様に、$i = j$ では垂直歪み、$i \neq j$ なら剪断歪みである。また、この式を見れば対称性 $\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ はすぐに判る。

2.2.2 工学歪みと歪みテンソル

工学歪みの場合、垂直歪みについては歪みテンソルと同じであるが、剪断歪みは歪みテンソルの 2 倍の値になる。

工学歪みも重要なのだが、扱いやすさを考えて、しばらくは歪みテンソル $\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}(\frac{\partial u_i}{\partial j} + \frac{\partial u_j}{\partial i})$ を使って話を進める。

2.3 弾性定数

歪みも応力も 2 階テンソルであるから、両者を関係づける係数は、4 階テンソルとなる。先に書いたように、「応力＝係数×歪み」としても「歪み＝係数×応力」としてもよいの

[4]例えば 井上達雄著「弾性力学の基礎」日刊工業新聞社；1979 など

で、両方とも書けば、工学歪みでは

$$\sigma_{ij} = E_{ijkl} e_{kl} \quad \text{または} \quad e_{pq} = C_{pqrs} \sigma_{rs}$$

歪みテンソルで表記すると、

$$\sigma_{ij} = E'_{ijkl} \varepsilon_{kl} \quad \text{または} \quad \varepsilon_{pq} = C'_{pqrs} \sigma_{rs}$$

である。前者の E_{ijkl}、E'_{ijkl} を弾性定数 (弾性スティフネス定数)、後者の C_{pqrs}、C'_{pqrs} をコンプライアンス定数 (弾性コンプライアンス定数) と呼ぶ。単に「弾性定数」と言うときはスティフネス定数を指す場合が多い。これら 2 つの定数行列が互いに逆行列となっていることはただちに判る。いずれの定数も $(3 \times 3) \times (3 \times 3) = 81$ 個 の成分があるが、応力も歪みも先に書いたとおり、独立なものはそれぞれ 6 個である。このため、弾性定数の独立な成分の数は 6 × 6=36 個まで減る。これに加えて、弾性定数の 4 階テンソルにも $E_{ijkl} = E_{klij}$ という対称性がある (エネルギー関数を導入することで判るのだが、ここでは詳細は述べない → 結構面倒くさい....) ので、独立成分の数はさらに減って 21 個まで落ちる。

2.4 Voigt(フォークト／ヴォイト) の表記による Hooke(フック) の法則

歪みテンソルと応力を関係づける弾性定数は $\boldsymbol{E}'$、$\boldsymbol{C}'$ のようにプライムをつけて表していたが、これを省いて $\boldsymbol{E}$、$\boldsymbol{C}$ で表記することにする。繰り返しになるが (重要なので...)、応力と歪みの成分には $\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$、$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}$ なる対称性があり、さらに弾性定数の成分にも $E_{ijkl} = E_{klij}$ という対称性がある。独立成分としては、応力と歪みにはそれぞれ 6 個あり、弾性定数には 21 個あるが、添字を 4 つも書くのは大変であるから、Voigt(フォークト) が考案した略式の表記法を使う。これは、 2 つの添字を 1 つにまとめて表すものであり、添字の数が半減するので見やすくなる。

ij または kl	xx	yy	zz	yz	zx	xy
Voigt の表記	1	2	3	4	5	6

上記の表記法を使うと、応力と歪みの関係は、

$$\begin{bmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} E_{11} & E_{12} & E_{13} & E_{14} & E_{15} & E_{16} \\ & E_{22} & E_{23} & E_{24} & E_{25} & E_{26} \\ & & E_{33} & E_{34} & E_{35} & E_{36} \\ & & & E_{44} & E_{45} & E_{46} \\ & \text{sym.} & & & E_{55} & E_{56} \\ & & & & & E_{66} \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{bmatrix} \tag{6}$$

と書くことができる。これが弾性体における Hooke の法則である。

3　結晶の対称性と弾性定数

材料が単結晶でできている場合、材料物性の対称性は結晶構造の対称性を直接反映するはずである。弾性定数テンソルは対称テンソルであり、36 個の成分のうち、独立なものはせいぜい 21 個であった。これは、結晶構造の中で最も対称性が低い三斜晶の弾性率テンソルが、21 個の独立成分を持つことを意味する。結晶の対称性が高くなれば、独立な成分の数は更に減少する。**「対称性がある」ということは、対称操作に対応する座標変換を施したあとの弾性率テンソルの各成分が、もとテンソルの成分と一致するということである。**これを比較することにより、同じ値を持つ成分やゼロになる成分が抽出できる。最初は対称性が低い単斜晶から始めて、立方晶に至るまでの独立成分の変化について、順次調べて行くことにする。

3.1　単斜晶

単斜晶は、z 軸方向に 2 回回転軸を有する。座標軸を z 軸周りに π 回転させる (z 軸の上から見て反時計回りに π、すなわち z 軸の進行方向に対して右ネジ方向に π) と、

$$\boldsymbol{f}_x = -\boldsymbol{e}_x, \qquad \boldsymbol{f}_y = -\boldsymbol{e}_y, \qquad \boldsymbol{f}_z = \boldsymbol{e}_z$$

であるから、座標変換にともなう成分変換行列は、

$$\boldsymbol{Q}_z = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{7}$$

である。応力テンソルを Voigt 表記と並べて記すと

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{zx} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{yz} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \sigma_6 & \sigma_2 & \sigma_4 \\ \sigma_5 & \sigma_4 & \sigma_3 \end{pmatrix} \tag{8}$$

であり、$\boldsymbol{Q}_z$ で変換する (前後から $\boldsymbol{Q}_z$、$\boldsymbol{Q}_z^{-1}$ を作用させる) と、

$$\boldsymbol{Q}_z \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{Q}_z^{-1} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_6 & -\sigma_5 \\ \sigma_6 & \sigma_2 & -\sigma_4 \\ -\sigma_5 & -\sigma_4 & \sigma_3 \end{pmatrix} \tag{9}$$

となる。

3.1.1 単斜晶における Hooke の法則の Voigt 表記

この結果を、先に出て来た 6×6 の Voigt 表記にも適用する。歪みと応力をそれぞれ 6 成分のベクトル (本当はテンソルなので注意) と考え、6×6 の弾性定数テンソル (E_{ij}) を、写像を表す行列と考える。そして、歪みの 6 成分が、E_{ij} によって応力の 6 成分に写されると考えるのである。そこでまず、成分変換 $\boldsymbol{Q}_z$ を、Voigt 表記の 6×6 に拡張し ($\boldsymbol{Q}_{z6}$ とする)、その成分を求めておく。応力成分は $\boldsymbol{Q}_{z6}$ によって

$$\begin{aligned}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5, \sigma_6) &\rightarrow (\sigma'_1, \sigma'_2, \sigma'_3, \sigma'_4, \sigma'_5, \sigma'_6) \\ &= (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, -\sigma_4, -\sigma_5, \sigma_6)\end{aligned}$$

のように変換される。歪みについても全く同じ形になる。従って、成分変換行列 $\boldsymbol{Q}_{z6}$ は、

$$\boldsymbol{Q}_{z6} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{10}$$

となる ($\boldsymbol{Q}_{z6}^{-1} = \boldsymbol{Q}_{z6}$ であることはすぐに判る)。「対称性」の要請とは、弾性率テンソルの Voigt 表記行列が $\boldsymbol{Q}_{z6}$ による変換に対して不変であること、すなわち

$$\boldsymbol{Q}_{z6} \boldsymbol{E} \boldsymbol{Q}_{z6}^{-1} = \boldsymbol{E}$$

ということであるから、単斜晶については以下のようになる。

$$\begin{pmatrix} E_{11} & E_{12} & E_{13} & -E_{14} & -E_{15} & E_{16} \\ & E_{22} & E_{23} & -E_{24} & -E_{25} & E_{26} \\ & & E_{33} & -E_{34} & -E_{35} & E_{36} \\ & & & E_{44} & E_{45} & -E_{46} \\ & & & & E_{55} & -E_{56} \\ & & & & & E_{66} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_{11} & E_{12} & E_{13} & E_{14} & E_{15} & E_{16} \\ & E_{22} & E_{23} & E_{24} & E_{25} & E_{26} \\ & & E_{33} & E_{34} & E_{35} & E_{36} \\ & & & E_{44} & E_{45} & E_{46} \\ & & & & E_{55} & E_{56} \\ & & & & & E_{66} \end{pmatrix}$$

これより、単斜晶の弾性率テンソルは、

$$\boldsymbol{E}_{\text{monoclinic}} = \begin{pmatrix} E_{11} & E_{12} & E_{13} & 0 & 0 & E_{16} \\ & E_{22} & E_{23} & 0 & 0 & E_{26} \\ & & E_{33} & 0 & 0 & E_{36} \\ & & & E_{44} & E_{45} & 0 \\ & & & & E_{55} & 0 \\ & & & & & E_{66} \end{pmatrix}$$

であることが判る。独立成分は、13 個である。

3.2 直方晶

直方晶は x、y、z の全ての軸について、その周りに π 回転できる対称性を持つ。単斜晶において z 軸周りに行った対称操作を x 軸、y 軸でも行なえばよい。よって直方晶の弾性率テンソルは、

$$
\boldsymbol{E}_{\mathrm{orthorhombic}} = \begin{pmatrix} E_{11} & E_{12} & E_{13} & 0 & 0 & 0 \\ & E_{22} & E_{23} & 0 & 0 & 0 \\ & & E_{33} & 0 & 0 & 0 \\ & & & E_{44} & 0 & 0 \\ & & & & E_{55} & 0 \\ & & & & & E_{66} \end{pmatrix}
$$

であることが判る。独立成分は、9 個である。

ここから先は演習問題とする

(と言うことにして手を抜くタヌキな教員....)

3.3 正方晶

z 軸周りに x, y 平面を θ 回転 (z 軸の上から見て反時計回りに θ、あるいは z 軸の進行方向に見て右ネジ方向に θ 回転) させるとき、成分の変換行列は

$$
\boldsymbol{Q}_{z(\theta)} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & & 1 \end{pmatrix} \tag{11}
$$

である。正方晶では $\theta = \pi/2$ なので、弾性率テンソルの成分は、変換

$$
\boldsymbol{Q}_{z(\pi/2)} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{12}
$$

に対して不変となる ($\boldsymbol{Q}^2$、$\boldsymbol{Q}^3$ についても不変)。

演習問題 1

1) 式 (**??**) に対する 6×6Voigt 行列の成分変換行列 $\boldsymbol{Q}_{z6}$ を求めよ。

2) 正方晶の弾性率を表す Voigt 行列の成分のうち、独立なものを求めよ (正方晶は単斜晶の対称性を引き継いでいることを考慮すること)。

3) 立方晶についても同様に考察せよ。まず座標変換行列を求め、ついで Voigt 行列を変換する行列 $\boldsymbol{Q}_{z6}$ を求めよ。さらに、それを基に、弾性率テンソルの独立成分が 3 つであることを示せ。(注意 : これは完全等方体ではない。完全等方体の独立成分は 2 つである)。

3.4　三方晶・六方晶・二次元等方体・完全等方体

以下同様に考えれば、三方晶・六方晶・完全等方体などについて、弾性率テンソル成分の独立変数を求めることができる。

例えば六方晶については、座標軸を z 軸周りに $\pi/3$ 回転する場合の座標変換行列 $\boldsymbol{Q}_{z(\pi/3)}$ をまず求め、その成分から 6×6 の Voigt 行列 $\boldsymbol{Q}_{z6(\pi/3)}$ の成分を決定する。対称性があるということは 6×6 の Voigt 行列がこの座標変換に対して不変であるということなので、

$$\boldsymbol{E}'_{ij} = \boldsymbol{Q}_{z6(\pi/3)}\boldsymbol{E}_{ij}\boldsymbol{Q}^{-1}_{z6(\pi/3)} \tag{13}$$

として、係数を比較してやればよい。その際に、下位の対称性を継承していることを考慮すること。例えば六方晶の場合では、$\pi/3$ 回転を 2 回、3 回繰り返しても不変なわけだから、三方晶、単斜晶の対称性も継承している。つまり、独立成分を抽出するには、全成分について吟味する必要はなく、単斜晶で独立として残っている 13 個の成分についてだけ吟味すれば良い。三方晶はこの段階ではまだ計算していないので判らないが、これらの条件から計算した結果を全て併せると独立成分が求まる。

式 (**??**) の両辺は、もとの式と同様に対称な行列になるはずである。計算の結果が対称にならなかった場合は、それで間違っていることが判るので、検算もできる。しかしやってみると判るが、**この計算はかなり面倒な場合が多い**。一番キツいのが三方晶で、まともにも計算しようとすると、おそらくやる気を無くすと思う (タヌキは無くした)。これについては、単斜晶で求めた π 回転による対称性すら持ってゐないので、全部丁寧に計算しなくてはならない。この場合、式 (**??**) の代わりに、その両辺に左から $\boldsymbol{Q}_{z6(\pi/3)}$ を作用させて、

$$\boldsymbol{Q}_{z6(\pi/3)}\boldsymbol{E}'_{ij} = \boldsymbol{E}_{ij}\boldsymbol{Q}^{-1}_{z6(\pi/3)} \tag{14}$$

としたものを使って比較するほうがずっとラクになる。ただし、式 (**??**) の両辺については、対称行列になるとは限らないので注意すること。

演習問題 2

1)　二次元等方体とは、ある軸 z 軸の周りの任意の回転に対して弾性率成分が不変であるようなものを指す。弾性率テンソルの独立成分を求め、二次元等方体の対称性が六方晶の対称性と同じであることを確認せよ。

2)　三方晶の弾性率テンソルの独立成分を求めよ。(しんどいで~ ....)

3)　完全等方体の独立成分は E_{11} と E_{12} の 2 個だけであることを示せ。また Lame(ラメ) 定数について調べ、これら 2 つの独立変数との関係を記せ。

3.5　立方晶は「等方性ではない」のか「等方性」なのか？

材料系のテキストを読んでいると、時たま「この物性については、材料が立方晶だから等方性である」という表現を目にするが、立方晶が弾性力学的に等方性でないことはここで既に見た通りである。では、これは間違っているかというと必ずしもそうではなく、**「物性 (のテンソルとしての性質) による」**ということである。立方晶については、拡散係数とか熱伝導等の２階テンソルは等方性となる。

演習問題 3

問　立方対称性を持つ材料が、２階テンソルで表される物性値を持つ時、この物性は等方性であることを示せ。

– (ヤング率・剛性率と弾性定数の関係、および多結晶体の等方性について追加する必要がある) –