Publication: lifemater.com, Author: peekAboo
Creation: 2022/3/11, Update: 2024/11/22
© 2022 peekAboo. All rights reserved.

弾性定数の対称性

1. Hooke の法則

Hooke の法則の一般形として以下の式が成立する。

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}\varepsilon_{kl}\ . \tag{1-1}$$

ここで、σ_{ij} は応力、ε_{ij} はひずみ、C_{ijkl} は弾性定数である。Eq. (1-1)の表現には Einstein の総和則を用いている。なお、本書では特に言及しない限り、Einstein の総和則を用いて式を表現する。

C_{ijkl} は 81 成分を有しているが、C_{ijkl} の対称性を考慮すると C_{ijkl} の独立成分は 21 成分となる。さらに、結晶構造の対称性などを考えると C_{ijkl} の独立成分数は減少する。本書では、21 成分まで C_{ijkl} の独立成分を減じる手順を示す。

2. 応力とひずみの対称性

応力の対称性とひずみの対称性を考える。

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ji}\ , \tag{2-1}$$

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ji}\ , \tag{2-2}$$

この関係式から、応力、ひずみの独立成分はそれぞれ 6 つとなる。そこで、本来、Hooke の法則は、下式のように、6×6 の 36 成分のテンソル A_{IJKL} で十分に記述できる。

$$\sigma_{IJ} = A_{IJKL}\varepsilon_{KL}\ , \tag{2-3}$$

ここで、下付きの添え字 I, J, K, L は 1～3 の値をとり、$I \le J$, $K \le L$ を満たす。この A_{IJKL}

© 2022 peekAboo. All rights reserved.

は対称性が低いため、対称性を高めるため A_{IJKL} を拡張したのが C_{ijkl} である。前述の通り、A_{IJKL} は 36 成分、C_{ijkl} は 81 成分であり、A_{IJKL} から C_{ijkl} の成分を全て決定することはできないため、任意性がある場合には対称性が高くなるように C_{ijkl} を決定するとする。A_{IJKL} と C_{ijkl} の関係を考える。Eq .(1-1)より、

$$\sigma_{IJ} = C_{IJkl}\varepsilon_{kl} = C_{IJKL}\varepsilon_{KL} + (1-\delta_{KL})C_{IJLK}\varepsilon_{LK},$$

とできる。さらに、Eq. (2-2)より、

$$\sigma_{IJ} = C_{IJKL}\varepsilon_{KL} + (1-\delta_{KL})C_{IJLK}\varepsilon_{KL} = \left\{C_{IJKL} + (1-\delta_{KL})C_{IJLK}\right\}\varepsilon_{KL}, \tag{2-4}$$

となる。この式を Eq. (2-3)と比較すると、

$$A_{IJKL}\varepsilon_{KL} = \left\{C_{IJKL} + (1-\delta_{KL})C_{IJLK}\right\}\varepsilon_{KL},$$

が成立する。この式は任意の ε_{KL} について成立するので、

$$\varepsilon_{IJ} = \begin{cases} \varepsilon & I=K, J=L \\ 0 & \text{Others} \end{cases},$$

とすると、下式が成立する。

$$A_{IJKL} = \left\{C_{IJKL} + (1-\delta_{KL})C_{IJLK}\right\}. \tag{2-5}$$

よって、

$$A_{IJKL} = \begin{cases} C_{IJKL} & (K=L) \\ C_{IJKL} + C_{IJLK} & (K \neq L) \end{cases}, \tag{2-6}$$

となる。この式において、C_{IJKL} と C_{IJLK} には任意性があるため、対称性を考え下式を導入する。

$$C_{IJKL} = C_{IJLK}. \tag{2-7}$$

また、Eq. (2-4)と同様にして、

© 2022 peekAboo. All rights reserved.

$$\sigma_{JI} = \left\{ C_{JIKL} + \left(1 - \delta_{KL}\right) C_{JILK} \right\} \varepsilon_{KL}, \tag{2-8}$$

が成立するので、Eqs. (2-1, 2-3)より、

$$A_{IJKL}\varepsilon_{KL} = \left\{ C_{JIKL} + \left(1 - \delta_{KL}\right) C_{JILK} \right\} \varepsilon_{KL},$$

となる。Eq. (2-5)と同様にすると、

$$A_{IJKL} = C_{JIKL} + \left(1 - \delta_{KL}\right) C_{JILK}, \tag{2-9}$$

となるので、Eq. (2-7)と同様に対称性の観点から下式を導入する。

$$C_{JIKL} = C_{JILK}. \tag{2-10}$$

ここで、Eqs. (2-6, 2-10)をまとめると下式が成立する。

$$C_{ijkl} = C_{ijlk}. \tag{2-11}$$

続いて、Eq. (2-1)より、Eqs. (2-4, 2-8)を比較すると、

$$C_{IJKL} + \left(1 - \delta_{KL}\right) C_{IJLK} = C_{JIKL} + \left(1 - \delta_{KL}\right) C_{JILK},$$

となる。ここで、Eq. (2-11)を用いると、

$$C_{IJKL}\left(2 - \delta_{KL}\right) = C_{IJLK}\left(2 - \delta_{KL}\right) = C_{JIKL}\left(2 - \delta_{KL}\right) = C_{JILK}\left(2 - \delta_{KL}\right),$$

が成立するので、つまり、

$$C_{IJKL} = C_{JIKL} = C_{IJLK} = C_{JILK},$$

が成立する。よって、

$$C_{ijkl} = C_{jikl}, \tag{2-12}$$

が成立する。Eqs. (2-11, 2-12)により、C_{ijkl} の独立成分数は 36 となる。

3. 弾性ひずみエネルギー

単位体積当たりの弾性ひずみエネルギー E_{str} は以下の式で与えられる。

© 2022 peekAboo. All rights reserved.

$$E_{\mathrm{str}} = \frac{1}{2}\sigma_{ij}\varepsilon_{ij} = \frac{1}{2}C_{ijkl}\varepsilon_{ij}\varepsilon_{kl} \,. \tag{3-1}$$

この式の微分を考えると、以下のようになる。

$$\begin{aligned}
\frac{\partial E_{\mathrm{str}}}{\partial \varepsilon_{mn}} &= \frac{\partial}{\partial \varepsilon_{mn}}\frac{1}{2}C_{ijkl}\varepsilon_{ij}\varepsilon_{kl} = \frac{1}{2}\left\{C_{ijkl}\frac{\partial \varepsilon_{ij}}{\partial \varepsilon_{mn}}\varepsilon_{kl} + C_{ijkl}\varepsilon_{ij}\frac{\partial \varepsilon_{kl}}{\partial \varepsilon_{mn}}\right\} \\
&= \frac{1}{2}\left\{C_{ijkl}\delta_{im}\delta_{jn}\varepsilon_{kl} + C_{ijkl}\varepsilon_{ij}\delta_{km}\delta_{ln}\right\} = \frac{1}{2}\left\{C_{mnkl}\varepsilon_{kl} + C_{ijmn}\varepsilon_{ij}\right\} \quad , \\
&= \frac{1}{2}\left(C_{mnkl}\varepsilon_{kl} + C_{klmn}\varepsilon_{kl}\right) = \frac{1}{2}\left(C_{mnkl} + C_{klmn}\right)\varepsilon_{kl}
\end{aligned}$$

ここで、δ_{ij} は Kronecker のデルタである。熱力学的には E_{str} は Helmholtz エネルギーなので、均一変形を考えると、

$$\frac{\partial F}{\partial V} = -P \,, \tag{3-2}$$

の関係式より、

$$\frac{\partial E_{\mathrm{str}}}{\partial \varepsilon_{ij}} = \sigma_{ij} \,, \tag{3-3}$$

となる。ここで、F は Helmholtz エネルギー、V は体積、P は圧力である。なお、圧力と応力は正の向きが逆であるため、Eqs. (4-2, 4-3)で符号が反転する。

Eq. (4-3)より、Eq. (4-1)を用いると、

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2}\left(C_{mnkl} + C_{klmn}\right)\varepsilon_{kl} = \sigma_{mn} \\
&\frac{1}{2}\left(C_{mnkl} + C_{klmn}\right)\varepsilon_{kl} = C_{mnkl}\varepsilon_{kl} \\
&\frac{1}{2}\left(-C_{mnkl} + C_{klmn}\right)\varepsilon_{kl} = 0 \\
&\left(C_{mnkl} - C_{klmn}\right)\varepsilon_{kl} = 0
\end{aligned} \quad ,$$

となる。これを、K, L で記述すると、

$$\left(C_{mnkl} - C_{klmn}\right)\varepsilon_{kl} = \left(C_{mnKL} - C_{KLmn}\right)\varepsilon_{KL} + \left(1 - \delta_{KL}\right)\left(C_{mnLK} - C_{LKmn}\right)\varepsilon_{LK} = 0$$

Eqs. (2-2, 2-11, 2-12)を用いると、

© 2022 peekAboo. All rights reserved.

$$\begin{aligned}\left(C_{mnkl}-C_{klmn}\right)\varepsilon_{kl}&=\left(C_{mnKL}-C_{KLmn}\right)\varepsilon_{KL}+\left(1-\delta_{KL}\right)\left(C_{mnKL}-C_{KLmn}\right)\varepsilon_{KL}\\&=\left(2-\delta_{KL}\right)\left(C_{mnKL}-C_{KLmn}\right)\varepsilon_{KL}=0\end{aligned},$$

となる。この式は任意の ε_{KL} に対して成立するため、

$$C_{mnKL}=C_{KLmn},$$

なる。Eqs. (2-11, 2-12)を用いると、

$$C_{mnKL}=C_{mnLK}=C_{KLmn}=C_{LKmn},$$

となるので、C_{KLmn}

$$C_{ijkl}=C_{klij}, \tag{3-4}$$

が成立する。

4. 弾性定数の対称性

Eqs. (2-11, 2-12, 3-4)をまとめると、

$$C_{ijkl}=C_{jikl}=C_{ijlk}=C_{klij} \tag{4-1}$$

が C_{ijkl} の対称性を表す式として成立する。この式により、C_{ijkl} の独立成分は 21 成分となる。