転位の応力場について

by T.Koyama

１．等方弾性体における構成方程式

まず、フーリエ変換および逆フーリエ変換を、関数 $f(\mathbf{r})$ のフーリエ変換を $F(\mathbf{k})$ として、

$$F(\mathbf{k}) = \frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r})\exp(-i\mathbf{kr})d\mathbf{r}$$
$$f(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

にて定義しよう。関係式として、デルタ関数はフーリエ変換にて

$$\frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}} \exp(-i\mathbf{kr})d\mathbf{r} = \delta(\mathbf{k})$$

と表現できる。なぜなら、デルタ関数の定義から、 $F(\mathbf{k}) = \delta(\mathbf{k})$ と置くと、

$$f(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{k}} \delta(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = 1$$

であり、 $f(\mathbf{r}) = 1$ であるので、

$$\delta(\mathbf{k}) = F(\mathbf{k}) = \frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r})\exp(-i\mathbf{kr})d\mathbf{r} = \frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}} \exp(-i\mathbf{kr})d\mathbf{r}$$

となるからである。ちなみに、この関係を用いて、

$$\begin{aligned}
F(\mathbf{k}) &= \frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r})\exp(-i\mathbf{kr})d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}}\int_{\mathbf{k'}} F(\mathbf{k'})\exp(i\mathbf{k'r})\frac{d\mathbf{k'}}{(2\pi)^3}\exp(-i\mathbf{kr})d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3}\frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}}\int_{\mathbf{k'}} F(\mathbf{k'})\exp\{i(\mathbf{k'}-\mathbf{k})\mathbf{r}\}d\mathbf{k'}d\mathbf{r} \\
&= \int_{\mathbf{k'}} F(\mathbf{k'})\left[\frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}} \exp\{i(\mathbf{k'}-\mathbf{k})\mathbf{r}\}d\mathbf{r}\right]\frac{d\mathbf{k'}}{(2\pi)^3} \\
&= \int_{\mathbf{k'}} F(\mathbf{k'})\delta(\mathbf{k'}-\mathbf{k})\frac{d\mathbf{k'}}{(2\pi)^3} = F(\mathbf{k})
\end{aligned}$$

となっていることがわかる。

さて、原子の変位場と eigen 歪場をそれぞれ $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ および $e_{kl}^T(\mathbf{r})$ とし、そのフーリエ表現を

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{k}} \mathbf{U}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$
$$e_{kl}^T(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{k}} \tilde{e}_{kl}^T(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

と定義する。これより拘束歪の変動量 $\delta e_{kl}^c(\mathbf{r}) = e_{kl}^c(\mathbf{r}) - \overline{e}_{kl}^c$ はその定義から、

$$\delta e_{kl}^{c}(\mathbf{r})=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_k}{\partial r_l}+\frac{\partial u_l}{\partial r_k}\right)=\frac{1}{2}\int_{\mathbf{k}} i\{k_l U_k(\mathbf{k})+k_k U_l(\mathbf{k})\}\exp(i\mathbf{k}\mathbf{r})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

にて与えられる。また、弾性歪エネルギーは、

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

にて与えられるので、平均拘束歪については、力の釣り合い条件から、

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial E_{str}}{\partial \overline{e}_{ij}^{c}}=\frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}}C_{ijkl}(\overline{e}_{kl}^{c}+\delta e_{kl}^{c}-e_{kl}^{T})d\mathbf{r}=0 \\
&\frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}}C_{ijkl}\overline{e}_{kl}^{c}d\mathbf{r}+\frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}}C_{ijkl}\delta e_{kl}^{c}d\mathbf{r}-\frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}}C_{ijkl}e_{kl}^{T}d\mathbf{r}=0 \\
&\frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}}C_{ijkl}\overline{e}_{kl}^{c}d\mathbf{r}-\frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}}C_{ijkl}e_{kl}^{T}d\mathbf{r}=0 \\
&C_{ijkl}\overline{e}_{kl}^{c}-C_{ijkl}\frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}}e_{kl}^{T}d\mathbf{r}=0 \\
&C_{ijkl}\left(\overline{e}_{kl}^{c}-\frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}}e_{kl}^{T}d\mathbf{r}\right)=0 \\
&\therefore\ \overline{e}_{kl}^{c}=\frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}}e_{kl}^{T}(\mathbf{r})d\mathbf{r}=\left\langle e_{kl}^{T}(\mathbf{r})\right\rangle
\end{aligned}$$

が成立している。つまり、平均の拘束歪$\overline{e}_{kl}^{c}$は、eigen 歪の平均値に等しい。

次に平衡方程式を定義しよう。ただし弾性率は定数と仮定する。

$$\sigma_{ij,j}=C_{ijkl}\left\{\frac{\partial\delta e_{kl}^{c}(\mathbf{r})}{\partial r_j}-\frac{\partial e_{kl}^{T}(\mathbf{r})}{\partial r_j}\right\}=0,\qquad \therefore\ C_{ijkl}\left\{\frac{\partial\delta e_{kl}^{c}(\mathbf{r})}{\partial r_j}-\frac{\partial e_{kl}^{T}(\mathbf{r})}{\partial r_j}\right\}=0$$

これより、平衡方程式のフーリエ表現

$$C_{ijkl}\left\{\frac{\partial\delta e_{kl}^{c}(\mathbf{r})}{\partial r_j}-\frac{\partial e_{kl}^{T}(\mathbf{r})}{\partial r_j}\right\}=0$$

$$C_{ijkl}\left\{-\frac{1}{2}\int_{\mathbf{k}}k_j\{k_lU_k(\mathbf{k})+k_kU_l(\mathbf{k})\}\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}-\int_{\mathbf{k}}ik_j\tilde{e}_{kl}^{T}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\right\}=0$$

$$\int_{\mathbf{k}}\left[-C_{ijkl}\frac{1}{2}k_j\{k_lU_k(\mathbf{k})+k_kU_l(\mathbf{k})\}-iC_{ijkl}k_j\tilde{e}_{kl}^{T}(\mathbf{k})\right]\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}=0$$

$$-C_{ijkl}\frac{1}{2}k_j\{k_lU_k(\mathbf{k})+k_kU_l(\mathbf{k})\}-iC_{ijkl}k_j\tilde{e}_{kl}^{T}(\mathbf{k})=0$$

$$\frac{C_{ijkl}k_jk_lU_k(\mathbf{k})+C_{ijkl}k_jk_kU_l(\mathbf{k})}{2}=-iC_{ijkl}k_j\tilde{e}_{kl}^{T}(\mathbf{k})$$

を得る。ここで、両辺の ij を pq に、また右辺の kl を mn に変える。両辺の ij を pq に変える理由は、虚数 i と添え字の i が紛らわしいからである。また右辺の kl を mn に変える理由は、本来、拘束歪($k_kU_l(\mathbf{k})$ に関係する部分)と固有歪($\eta_{kl}Q(\mathbf{k})$ に関係する部分)は常に同じ方向を向く必要はないからである。したがって、前者の添え字はそのままに、また後者の添え字を mn に変える。また j (もしくは i)方向は、平衡方程式にて応力を微分する方向であり、これは両辺とも共通しているので、ij を pq に変える際には両辺の全てを同時に変えなくてはならない。したがって、平衡方程式のフーリエ表現は、

$$\frac{C_{pqkl}k_qk_lU_k(\mathbf{k})+C_{pqkl}k_qk_kU_l(\mathbf{k})}{2}=-iC_{pqmn}k_q\tilde{e}_{mn}^{T}(\mathbf{k})$$

にて与えられる。さらに、弾性定数の対称性から、$C_{pqkl}k_qk_lU_k(\mathbf{k})=C_{pqkl}k_qk_kU_l(\mathbf{k})$ であるので、最終的に、

$$C_{pqkl}k_qk_kU_l(\mathbf{k})=-iC_{pqmn}k_q\tilde{e}_{mn}^{T}(\mathbf{k})$$

が得られる。ここで、

$$G_{pl}^{-1}(\mathbf{k})=C_{pqkl}k_qk_k$$

を定義すると、$U_l(\mathbf{k})$ は、

$$C_{pqkl}k_qk_kU_l(\mathbf{k})=-iC_{pqmn}k_q\tilde{e}_{mn}^{T}(\mathbf{k})$$
$$\therefore\ U_l(\mathbf{k})=-iG_{pl}(\mathbf{k})C_{pqmn}k_q\tilde{e}_{mn}^{T}(\mathbf{k})$$

となるので、

$$\delta e_{kl}^{c}(\mathbf{r})=\frac{1}{2}\int_{\mathbf{k}} i\{k_l U_k(\mathbf{k})+k_k U_l(\mathbf{k})\}\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$
$$=\frac{1}{2}\int_{\mathbf{k}}\{G_{pk}(\mathbf{k})k_q k_l+G_{pl}(\mathbf{k})k_q k_k\}C_{pqmn}\tilde{e}_{mn}^{T}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

より、拘束歪は、

$$e_{kl}^{c}(\mathbf{r})=\bar{e}_{kl}^{c}+\delta e_{kl}^{c}(\mathbf{r})$$
$$=\bar{e}_{kl}^{c}+\frac{1}{2}\int_{\mathbf{k}}\{G_{pk}(\mathbf{k})k_q k_l+G_{pl}(\mathbf{k})k_q k_k\}C_{pqmn}\tilde{e}_{mn}^{T}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$
$$=\left\langle e_{kl}^{T}(\mathbf{r})\right\rangle+\frac{1}{2}\int_{\mathbf{k}}\{\Omega_{pk}(\mathbf{n})n_q n_l+\Omega_{pl}(\mathbf{n})n_q n_k\}C_{pqmn}\tilde{e}_{mn}^{T}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

と計算できることがわかる。ここで、$G_{pl}(\mathbf{k})=\dfrac{\Omega_{pl}(\mathbf{n})}{k^2}$であり、

$$G_{pl}(\mathbf{k})k_q k_k=\frac{\Omega_{pl}(\mathbf{n})}{k^2}k^2 n_q n_k=\Omega_{pl}(\mathbf{n})n_q n_k$$

の関係を用いた。また等方体の場合、

$$G_{pl}(\mathbf{k})=\frac{k^2\{\delta_{pl}(\lambda+2\mu)k^2-(\lambda+\mu)k_p k_l\}}{(\lambda+2\mu)\mu k^6}=\frac{\delta_{pl}(\lambda+2\mu)-(\lambda+\mu)n_p n_l}{(\lambda+2\mu)\mu k^2}$$
$$\Omega_{pl}(\mathbf{n})=\frac{\delta_{pl}(\lambda+2\mu)-(\lambda+\mu)n_p n_l}{(\lambda+2\mu)\mu}$$

である。応力についてはフックの法則から

$$\sigma_{ij}(\mathbf{r})=C_{ijkl}\{e_{kl}^{c}(\mathbf{r})-e_{kl}^{T}(\mathbf{r})\}$$
$$=C_{ijkl}\left[\left\langle e_{kl}^{T}(\mathbf{r})\right\rangle+\frac{1}{2}\int_{\mathbf{k}}\{\Omega_{pk}(\mathbf{n})n_q n_l+\Omega_{pl}(\mathbf{n})n_q n_k\}C_{pqmn}\tilde{e}_{mn}^{T}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}-e_{kl}^{T}(\mathbf{r})\right]$$
$$=\frac{1}{2}C_{ijkl}\int_{\mathbf{k}}\{\Omega_{pk}(\mathbf{n})n_q n_l+\Omega_{pl}(\mathbf{n})n_q n_k\}C_{pqmn}\tilde{e}_{mn}^{T}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}-C_{ijkl}\left\{e_{kl}^{T}(\mathbf{r})-\left\langle e_{kl}^{T}(\mathbf{r})\right\rangle\right\}$$

と計算される。また弾性歪$e_{kl}(\mathbf{r})$は

$$e_{kl}(\mathbf{r})=e_{kl}^{c}(\mathbf{r})-e_{kl}^{T}(\mathbf{r})$$
$$=\left\langle e_{kl}^{T}(\mathbf{r})\right\rangle+\frac{1}{2}\int_{\mathbf{k}}\{\Omega_{pk}(\mathbf{n})n_q n_l+\Omega_{pl}(\mathbf{n})n_q n_k\}C_{pqmn}\tilde{e}_{mn}^{T}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}-e_{kl}^{T}(\mathbf{r})$$
$$=\frac{1}{2}\int_{\mathbf{k}}\{\Omega_{pk}(\mathbf{n})n_q n_l+\Omega_{pl}(\mathbf{n})n_q n_k\}C_{pqmn}\tilde{e}_{mn}^{T}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}-\left\{e_{kl}^{T}(\mathbf{r})-\left\langle e_{kl}^{T}(\mathbf{r})\right\rangle\right\}$$

である。変位場は、

$$u_l(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{k}} U_l(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{kr}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = \int_{\mathbf{k}} -iG_{pl}(\mathbf{k}) C_{pqmn} k_q \tilde{e}^T_{mn}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{kr}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

である。

　以上から、弾性歪エネルギーは、

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

と計算される。ここで、

$$\frac{\partial E_{str}}{\partial e^T_{kl}(\mathbf{r})} = -C_{ijkl}\left[\left\langle e^T_{ij}(\mathbf{r})\right\rangle + \delta e^c_{ij}(\mathbf{r}) - e^T_{ij}(\mathbf{r})\right] = C_{ijkl}\left[e^T_{ij}(\mathbf{r}) - \left\langle e^T_{ij}(\mathbf{r})\right\rangle - \delta e^c_{ij}(\mathbf{r})\right] = -\sigma_{ij}(\mathbf{r})$$

である。

２．らせん転位の変位場

　らせん転位の eigen 歪場は、

$$e^T_{23}(\mathbf{r}) = e^T_{32}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} b\delta(r_2) H(-r_1)$$

にて表現できる（付録参照）。ここで、H はステップ関数で、

$$\begin{aligned}
&H(-r_1) = 1, \quad (r_1 < 0) \\
&H(-r_1) = 0, \quad (r_1 > 0)
\end{aligned}$$

である。eigen 歪場のフーリエ変換は、

$$
\begin{aligned}
\tilde{e}_{23}^{T}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}} e_{23}^{T}(\mathbf{r})\exp(-i\mathbf{kr})d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}} \frac{1}{2} b\delta(r_2)H(-r_1)\exp(-i\mathbf{kr})d\mathbf{r} \\
&= \frac{b}{2V}\int_{r_1}\int_{r_2}\int_{r_3} \delta(r_2)H(-r_1)\exp\{-i(k_1r_1+k_2r_2+k_3r_3)\}dr_1dr_2dr_3 \\
&= \frac{b}{2V}\left\{\int_{r_1} H(-r_1)\exp(-ik_1r_1)dr_1\right\}\left\{\int_{r_2} \delta(r_2)\exp(-ik_2r_2)dr_2\right\}\left\{\int_{r_3} \exp(-ik_3r_3)dr_3\right\} \\
&= \frac{b}{2V}\frac{L}{-ik_1}LL\delta(k_3) = -\frac{1}{2}b\frac{\delta(k_3)}{ik_1}
\end{aligned}
$$

と計算できる。ここで、δ関数のフーリエ表現

$$
\frac{1}{L}\int_{r} \exp(-ikr)dr = \delta(k)
$$

と、ステップ関数の空間微分がδ関数に等しいとして、以下の関係式を用いた。

$$
F(k) = \frac{1}{L}\int_{r} \delta(r)\exp(-ikr)dr = 1
$$

$$
\delta(r) = \int_{k} F(k)\exp(ikr)\frac{dk}{2\pi} = \int_{k} \exp(ikr)\frac{dk}{2\pi}
$$

$$
H(r) = \int_{k} \frac{1}{ik}\exp(ikr)\frac{dk}{2\pi}
$$

$$
\frac{1}{ik} = \frac{1}{L}\int_{r} H(r)\exp(-ikr)dr
$$

$$
\frac{1}{L}\int_{r} H(-r)\exp(-ikr)dr = \frac{1}{-ik}
$$

以上から、らせん転位による変位場は、

$$
\begin{aligned}
u_3(\mathbf{r}) &= \int_{\mathbf{k}} -iG_{p3}(\mathbf{k})C_{pqmn}k_q\tilde{e}^T_{mn}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= -i\int_{\mathbf{k}}\left\{G_{p3}(\mathbf{k})C_{pq23}k_q\tilde{e}^T_{23}(\mathbf{k}) + G_{p3}(\mathbf{k})C_{pq32}k_q\tilde{e}^T_{32}(\mathbf{k})\right\}\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= -2i\int_{\mathbf{k}}\left\{G_{p3}(\mathbf{k})C_{pq23}k_q\tilde{e}^T_{23}(\mathbf{k})\right\}\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= -2i\int_{\mathbf{k}}\left\{G_{23}(\mathbf{k})C_{2323}k_3\tilde{e}^T_{23}(\mathbf{k}) + G_{33}(\mathbf{k})C_{3223}k_2\tilde{e}^T_{23}(\mathbf{k})\right\}\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= -2i\int_{\mathbf{k}}\left\{\frac{-(\lambda+\mu)k_2k_3}{(\lambda+2\mu)\mu k^4}\mu k_3 + \frac{(\lambda+2\mu)k^2-(\lambda+\mu)k_3^2}{(\lambda+2\mu)\mu k^4}\mu k_2\right\}\left\{-\frac{1}{2}b\frac{\delta(k_3)}{ik_1}\right\}\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= b\int_{\mathbf{k}}\left\{\frac{-(\lambda+\mu)k_2k_3}{(\lambda+2\mu)k^4}\frac{k_3}{k_1} + \frac{(\lambda+2\mu)k^2-(\lambda+\mu)k_3^2}{(\lambda+2\mu)k^4}\frac{k_2}{k_1}\right\}\delta(k_3)\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= \frac{b}{(\lambda+2\mu)}\int_{\mathbf{k}}\left\{\frac{(\lambda+2\mu)k^2k_2-2(\lambda+\mu)k_2k_3^2}{k^4k_1}\right\}\delta(k_3)\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= \frac{b}{2}\int_{\mathbf{k}}\frac{k_2}{k_1k^2}\delta(k_3)\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} - \frac{b(\lambda+\mu)}{(\lambda+2\mu)}\int_{\mathbf{k}}\frac{k_2k_3^2}{k_1k^4}\delta(k_3)\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= b\int_{\mathbf{k}}\frac{k_2}{k_1(k_1^2+k_2^2+k_3^2)}\delta(k_3)\exp\{i(k_1r_1+k_2r_2+k_3r_3)\}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= b\int_{\mathbf{k}}\frac{k_2}{k_1(k_1^2+k_2^2)}\exp\{i(k_1r_1+k_2r_2)\}\frac{dk_1dk_2}{(2\pi)^2} \\
&= \frac{b}{(2\pi)^2}2\pi\tan^{-1}\left(\frac{r_2}{r_1}\right) = \frac{b}{2\pi}\tan^{-1}\left(\frac{r_2}{r_1}\right)
\end{aligned}
$$

と計算される。ここで、積分の公式、

$$
\begin{aligned}
&\int_{\mathbf{k}}\frac{1}{k_1^2+k_2^2}\exp\{i(k_1r_1+k_2r_2)\}dk_1dk_2 = -\pi\log(r_1^2+r_2^2) \\
&\int_{\mathbf{k}}\frac{k_2}{k_1}\frac{1}{k_1^2+k_2^2}\exp\{i(k_1r_1+k_2r_2)\}dk_1dk_2 = 2\pi\tan^{-1}\left(\frac{r_2}{r_1}\right) \\
&\int_{\mathbf{k}}\frac{k_1k_2}{(k_1^2+k_2^2)^2}\exp\{i(k_1r_1+k_2r_2)\}dk_1dk_2 = -\pi\frac{r_1r_2}{r_1^2+r_2^2} \\
&\int_{\mathbf{k}}\frac{k_2^2}{(k_1^2+k_2^2)^2}\exp\{i(k_1r_1+k_2r_2)\}dk_1dk_2 = -\frac{1}{2}\pi\log(r_1^2+r_2^2) - \pi\frac{r_1r_2}{r_1^2+r_2^2}
\end{aligned}
$$

を用いた。また、

$$u_2(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{k}} -iG_{p2}(\mathbf{k})C_{pqmn}k_q\tilde{e}^T_{mn}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$
$$= -2i\int_{\mathbf{k}} \left\{G_{p2}(\mathbf{k})C_{pq23}k_q\tilde{e}^T_{23}(\mathbf{k})\right\}\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$
$$= -2i\int_{\mathbf{k}} \left\{G_{32}(\mathbf{k})C_{3223}k_2 + G_{22}(\mathbf{k})C_{2323}k_3\right\}\tilde{e}^T_{23}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$
$$= -2i\int_{\mathbf{k}} \left\{\frac{-(\lambda+\mu)k_3k_2}{(\lambda+2\mu)\mu k^4}\mu k_2 + \frac{(\lambda+2\mu)k^2-(\lambda+\mu)k_2^2}{(\lambda+2\mu)\mu k^4}\mu k_3\right\}\left\{-\frac{1}{2}b\frac{\delta(k_3)}{ik_1}\right\}\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$
$$= 0$$
$$u_1(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{k}} -iG_{p1}(\mathbf{k})C_{pqmn}k_q\tilde{e}^T_{mn}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$
$$= -2i\int_{\mathbf{k}} \left\{G_{p1}(\mathbf{k})C_{pq23}k_q\tilde{e}^T_{23}(\mathbf{k})\right\}\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$
$$= -2i\int_{\mathbf{k}} \left\{G_{31}(\mathbf{k})C_{3223}k_2 + G_{21}(\mathbf{k})C_{2323}k_3\right\}\tilde{e}^T_{23}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$
$$= -2i\int_{\mathbf{k}} \left\{\frac{-(\lambda+\mu)k_3k_1}{(\lambda+2\mu)\mu k^4}\mu k_2 + \frac{-(\lambda+\mu)k_2k_1}{(\lambda+2\mu)\mu k^4}\mu k_3\right\}\left\{-\frac{1}{2}b\frac{\delta(k_3)}{ik_1}\right\}\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$
$$= 0$$

である。

３．刃状転位の変位場

刃状転位の eigen 歪場は、

$$e^T_{21}(\mathbf{r}) = e^T_{12}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}b\delta(r_2)H(-r_1)$$

にて与えられる（付録参照）。このフーリエ変換は、らせん転位の場合と同様に、

$$\tilde{e}^T_{21}(\mathbf{k}) = \frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}} e^T_{21}(\mathbf{r})\exp(-i\mathbf{kr})d\mathbf{r}$$
$$= \frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}} \frac{1}{2}b\delta(r_2)H(-r_1)\exp(-i\mathbf{kr})d\mathbf{r}$$
$$= -\frac{1}{2}b\frac{\delta(k_3)}{ik_1}$$

となる。これより、刃状転位による変位場は、

$$
\begin{aligned}
u_1(\mathbf{r}) &= \int_{\mathbf{k}} -iG_{p1}(\mathbf{k})C_{pqmn}k_q\tilde{e}^T_{mn}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= -i\int_{\mathbf{k}}\left\{G_{p1}(\mathbf{k})C_{pq12}k_q\tilde{e}^T_{12}(\mathbf{k}) + G_{p1}(\mathbf{k})C_{pq21}k_q\tilde{e}^T_{21}(\mathbf{k})\right\}\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= -2i\int_{\mathbf{k}}\left\{G_{p1}(\mathbf{k})C_{pq12}k_q\tilde{e}^T_{12}(\mathbf{k})\right\}\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= -2i\int_{\mathbf{k}}\left\{G_{21}(\mathbf{k})C_{2112}k_1\tilde{e}^T_{12}(\mathbf{k}) + G_{11}(\mathbf{k})C_{1212}k_2\tilde{e}^T_{12}(\mathbf{k})\right\}\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= -2i\int_{\mathbf{k}}\left\{\frac{-(\lambda+\mu)k_2k_1}{(\lambda+2\mu)\mu k^4}\mu k_1 + \frac{(\lambda+2\mu)k^2-(\lambda+\mu)k_1^2}{(\lambda+2\mu)\mu k^4}\mu k_2\right\}\left\{-\frac{1}{2}b\frac{\delta(k_3)}{ik_1}\right\}\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= b\int_{\mathbf{k}}\left\{\frac{-(\lambda+\mu)k_2k_1}{(\lambda+2\mu)k^4}\frac{k_1}{k_1} + \frac{(\lambda+2\mu)k^2-(\lambda+\mu)k_1^2}{(\lambda+2\mu)k^4}\frac{k_2}{k_1}\right\}\delta(k_3)\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= \frac{b}{(\lambda+2\mu)}\int_{\mathbf{k}}\left\{\frac{(\lambda+2\mu)k^2k_2 - 2(\lambda+\mu)k_2k_1^2}{k^4k_1}\right\}\delta(k_3)\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= b\int_{\mathbf{k}}\frac{k_2}{k_1k^2}\delta(k_3)\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} - \frac{b(\lambda+\mu)}{(\lambda+2\mu)}\int_{\mathbf{k}}\frac{k_1k_2}{k^4}\delta(k_3)\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= b\int_{\mathbf{k}}\frac{k_2}{k_1(k_1^2+k_2^2+k_3^2)}\delta(k_3)\exp\{i(k_1r_1+k_2r_2+k_3r_3)\}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&\quad -\frac{2b(\lambda+\mu)}{(\lambda+2\mu)}\int_{\mathbf{k}}\frac{k_1k_2}{(k_1^2+k_2^2+k_3^2)^2}\delta(k_3)\exp\{i(k_1r_1+k_2r_2+k_3r_3)\}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \\
&= b\int_{\mathbf{k}}\frac{k_2}{k_1(k_1^2+k_2^2)}\exp\{i(k_1r_1+k_2r_2)\}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} - \frac{2b(\lambda+\mu)}{(\lambda+2\mu)}\int_{\mathbf{k}}\frac{k_1k_2}{(k_1^2+k_2^2)^2}\exp\{i(k_1r_1+k_2r_2)\}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \\
&= \frac{b}{(2\pi)^2}2\pi\tan^{-1}\left(\frac{r_2}{r_1}\right) + \frac{2b(\lambda+\mu)}{(\lambda+2\mu)}\frac{\pi}{(2\pi)^2}\frac{r_1r_2}{r_1^2+r_2^2} \\
&= \frac{b}{2\pi}\tan^{-1}\left(\frac{r_2}{r_1}\right) + \frac{b}{4\pi}\frac{2(\lambda+\mu)}{(\lambda+2\mu)}\frac{r_1r_2}{r_1^2+r_2^2} \\
&= \frac{b}{2\pi}\tan^{-1}\left(\frac{r_2}{r_1}\right) + \frac{b}{4\pi}\frac{1}{(1-\nu)}\frac{r_1r_2}{r_1^2+r_2^2}
\end{aligned}
$$

$$u_2(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{k}} -iG_{p2}(\mathbf{k})C_{pqmn}k_q\tilde{e}^T_{mn}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

$$= -2i\int_{\mathbf{k}}\left\{G_{p2}(\mathbf{k})C_{pq12}k_q\tilde{e}^T_{12}(\mathbf{k})\right\}\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

$$= -2i\int_{\mathbf{k}}\left\{G_{12}(\mathbf{k})C_{1212}k_2\tilde{e}^T_{12}(\mathbf{k}) + G_{22}(\mathbf{k})C_{2112}k_1\tilde{e}^T_{12}(\mathbf{k})\right\}\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

$$= -2i\int_{\mathbf{k}}\left\{\frac{-(\lambda+\mu)k_1k_2}{(\lambda+2\mu)\mu k^4}\mu k_2 + \frac{(\lambda+2\mu)k^2-(\lambda+\mu)k_2^2}{(\lambda+2\mu)\mu k^4}\mu k_1\right\}\left\{-\frac{1}{2}b\frac{\delta(k_3)}{ik_1}\right\}\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

$$= b\int_{\mathbf{k}}\left\{\frac{-(\lambda+\mu)k_2^2}{(\lambda+2\mu)k^4} + \frac{(\lambda+2\mu)k^2-(\lambda+\mu)k_2^2}{(\lambda+2\mu)k^4}\right\}\delta(k_3)\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

$$= \frac{b}{(\lambda+2\mu)}\int_{\mathbf{k}}\left\{\frac{(\lambda+2\mu)k^2k_2 - 2(\lambda+\mu)k_2k_1^2}{k^4k_1}\right\}\delta(k_3)\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

$$= b\int_{\mathbf{k}}\frac{1}{k^2}\delta(k_3)\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} - \frac{2b(\lambda+\mu)}{(\lambda+2\mu)}\int_{\mathbf{k}}\frac{k_2^2}{k^4}\delta(k_3)\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

$$= b\int_{\mathbf{k}}\frac{1}{(k_1^2+k_2^2+k_3^2)}\delta(k_3)\exp\{i(k_1r_1+k_2r_2+k_3r_3)\}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

$$-\frac{2b(\lambda+\mu)}{(\lambda+2\mu)}\int_{\mathbf{k}}\frac{k_2^2}{(k_1^2+k_2^2+k_3^2)^2}\delta(k_3)\exp\{i(k_1r_1+k_2r_2+k_3r_3)\}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

$$= b\int_{\mathbf{k}}\frac{1}{(k_1^2+k_2^2)}\exp\{i(k_1r_1+k_2r_2)\}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} - \frac{2b(\lambda+\mu)}{(\lambda+2\mu)}\int_{\mathbf{k}}\frac{k_2^2}{(k_1^2+k_2^2)^2}\exp\{i(k_1r_1+k_2r_2)\}\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2}$$

$$= -\frac{b}{(2\pi)^2}\pi\log(r_1^2+r_2^2) - \frac{2b(\lambda+\mu)}{(\lambda+2\mu)}\frac{1}{(2\pi)^2}\left\{-\frac{1}{2}\pi\log(r_1^2+r_2^2) - \pi\frac{r_2^2}{r_1^2+r_2^2}\right\}$$

$$= -\frac{b}{4\pi}\log(r_1^2+r_2^2) - \frac{b}{4\pi}\frac{1}{(1-\nu)}\left\{-\frac{1}{2}\log(r_1^2+r_2^2) - \frac{r_2^2}{r_1^2+r_2^2}\right\}$$

$$= \frac{b}{8\pi}\left(\frac{2\nu-1}{1-\nu}\right)\log(r_1^2+r_2^2) + \frac{b}{4\pi}\frac{1}{(1-\nu)}\frac{r_2^2}{r_1^2+r_2^2}$$

および

$$u_3(\mathbf{r}) = \int_{\mathbf{k}} -iG_{p3}(\mathbf{k})C_{pqmn}k_j\tilde{e}^T_{mn}(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{kr})\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = 0$$

にて与えられる。またラーメの定数とポアソン比の関係は、$\nu = \dfrac{\lambda}{2(\lambda+\mu)}$ より、

$$\frac{2(\lambda+\mu)}{\lambda+2\mu} = \frac{1}{\dfrac{\lambda+2\mu}{2\lambda+2\mu}} = \frac{1}{1-\dfrac{\lambda}{2\lambda+2\mu}} = \frac{1}{1-\dfrac{\lambda}{2(\lambda+\mu)}} = \frac{1}{1-\nu}$$

である。

４．らせん転位の応力場

らせん転位の変位場が得られたので、これを微分することによって応力場は以下のように計算される。まず変位場をまとめると、

$$u_1(\mathbf{r}) = u_2(\mathbf{r}) = 0$$
$$u_3(\mathbf{r}) = \frac{b}{2\pi}\tan^{-1}\left(\frac{r_2}{r_1}\right)$$

である。これより、

$$\frac{\partial u_3}{\partial r_1} = \frac{b}{2\pi}\frac{1}{1+\left(\frac{r_2}{r_1}\right)^2}\left(-\frac{r_2}{r_1^2}\right) = -\frac{b}{2\pi}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2}$$
$$\frac{\partial u_3}{\partial r_2} = \frac{b}{2\pi}\frac{1}{1+\left(\frac{r_2}{r_1}\right)^2}\left(\frac{1}{r_1}\right) = \frac{b}{2\pi}\frac{r_1}{r_1^2+r_2^2}$$
$$\frac{\partial u_1}{\partial r_1} = \frac{\partial u_1}{\partial r_2} = \frac{\partial u_1}{\partial r_3} = \frac{\partial u_2}{\partial r_1} = \frac{\partial u_2}{\partial r_2} = \frac{\partial u_2}{\partial r_3} = \frac{\partial u_3}{\partial r_3} = 0$$

となり、拘束歪変動量は、

$$\delta e_{11}^c = \frac{\partial u_1}{\partial r_1} = 0,\quad \delta e_{22}^c = \frac{\partial u_2}{\partial r_2} = 0,\quad \delta e_{33}^c = \frac{\partial u_3}{\partial r_3} = 0$$
$$\delta e_{12}^c = \delta e_{21}^c = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_1}{\partial r_2} + \frac{\partial u_2}{\partial r_1}\right) = 0$$
$$\delta e_{13}^c = \delta e_{31}^c = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_1}{\partial r_3} + \frac{\partial u_3}{\partial r_1}\right) = \frac{1}{2}\left(-\frac{b}{2\pi}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2}\right) = -\frac{b}{4\pi}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2}$$
$$\delta e_{23}^c = \delta e_{32}^c = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_2}{\partial r_3} + \frac{\partial u_3}{\partial r_2}\right) = \frac{1}{2}\left(\frac{b}{2\pi}\frac{r_1}{r_1^2+r_2^2}\right) = \frac{b}{4\pi}\frac{r_1}{r_1^2+r_2^2}$$

と計算される。ここで、らせん転位の eigen 歪場 $e_{23}^T(\mathbf{r}) = e_{32}^T(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}b\delta(r_2)H(-r_1)$ の空間平均は、

$$\begin{aligned}\left\langle e_{23}^T(\mathbf{r})\right\rangle &= \frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}} e_{23}^T(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\ &= \frac{1}{V}\int_{r_1}\int_{r_2}\int_{r_3}\frac{1}{2}b\delta(r_2)H(-r_1)dr_1dr_2dr_3 \\ &= \frac{1}{2}b\frac{1}{V}\int_{r_1}H(-r_1)dr_1\int_{r_2}\delta(r_2)dr_2\int_{r_3}dr_3 \\ &= \frac{1}{2}b\frac{1}{V}\frac{L}{2}L = \frac{b}{2L}\end{aligned}$$

であるので、$L \to \infty$ において $\left\langle e_{23}^T(\mathbf{r})\right\rangle \to 0$ となる。したがって、平均の拘束歪 $\bar{e}_{ij}^c$ は 0 とおい

て良い。したがって、拘束歪は、

$$
\begin{aligned}
&e_{11}^{c}=e_{22}^{c}=e_{33}^{c}=e_{12}^{c}=e_{21}^{c}=0\\
&e_{13}^{c}=e_{31}^{c}=-\frac{b}{4\pi}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2}\\
&e_{23}^{c}=e_{32}^{c}=\frac{b}{4\pi}\frac{r_1}{r_1^2+r_2^2}
\end{aligned}
$$

と表現される。これより応力場は、

$$
\begin{aligned}
\sigma_{11}&=C_{11kl}(e_{kl}^{c}-e_{kl}^{T})=C_{1111}(e_{11}^{c}-e_{11}^{T})+C_{1122}(e_{22}^{c}-e_{22}^{T})+C_{1133}(e_{33}^{c}-e_{33}^{T})=0\\
\sigma_{22}&=C_{22kl}(e_{kl}^{c}-e_{kl}^{T})=C_{2211}(e_{11}^{c}-e_{11}^{T})+C_{2222}(e_{22}^{c}-e_{22}^{T})+C_{2233}(e_{33}^{c}-e_{33}^{T})=0\\
\sigma_{33}&=C_{33kl}(e_{kl}^{c}-e_{kl}^{T})=C_{3311}(e_{11}^{c}-e_{11}^{T})+C_{3322}(e_{22}^{c}-e_{22}^{T})+C_{3333}(e_{33}^{c}-e_{33}^{T})=0\\
\sigma_{12}&=C_{12kl}(e_{kl}^{c}-e_{kl}^{T})=C_{1212}(e_{12}^{c}-e_{12}^{T})+C_{1221}(e_{21}^{c}-e_{21}^{T})=0\\
\sigma_{13}&=C_{13kl}(e_{kl}^{c}-e_{kl}^{T})=C_{1313}(e_{13}^{c}-e_{13}^{T})+C_{1331}(e_{31}^{c}-e_{31}^{T})=2\mu(e_{13}^{c}-e_{13}^{T})\\
\sigma_{23}&=C_{23kl}(e_{kl}^{c}-e_{kl}^{T})=C_{2323}(e_{23}^{c}-e_{23}^{T})+C_{2332}(e_{32}^{c}-e_{32}^{T})=2\mu(e_{23}^{c}-e_{23}^{T})
\end{aligned}
$$

にて与えられるので、先の拘束歪式を代入して、らせん転位の応力場は、

$$
\begin{aligned}
&\sigma_{11}=\sigma_{22}=\sigma_{33}=\sigma_{12}=0\\
&\sigma_{13}=2\mu(e_{13}^{c}-e_{13}^{T})=2\mu e_{13}^{c}-2\mu e_{13}^{T}=-\frac{\mu b}{2\pi}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2}-2\mu e_{13}^{T}\\
&\sigma_{23}=2\mu(e_{23}^{c}-e_{23}^{T})=2\mu e_{23}^{c}-2\mu e_{23}^{T}=\frac{\mu b}{2\pi}\frac{r_1}{r_1^2+r_2^2}-2\mu e_{23}^{T}
\end{aligned}
$$

と計算される。

５．刃状転位の応力場

刃状転位の変位場が得られたので、これを微分することによって応力場は以下のように計算される。まず変位場をまとめると、

$$
\begin{aligned}
&u_1(\mathbf{r})=\frac{b}{2\pi}\tan^{-1}\left(\frac{r_2}{r_1}\right)+\frac{b}{4\pi(1-\nu)}\frac{r_1r_2}{r_1^2+r_2^2}\\
&u_2(\mathbf{r})=\frac{b}{8\pi}\frac{2\nu-1}{1-\nu}\log(r_1^2+r_2^2)+\frac{b}{4\pi(1-\nu)}\frac{r_2^2}{r_1^2+r_2^2}\\
&u_3(\mathbf{r})=0
\end{aligned}
$$

である。これより、

$$\frac{\partial u_1}{\partial r_1}=\frac{b}{2\pi}\frac{1}{1+\left(\frac{r_2}{r_1}\right)^2}\left(-\frac{r_2}{r_1^2}\right)+\frac{b}{4\pi(1-\nu)}\frac{r_2(r_1^2+r_2^2)-2r_1^2r_2}{(r_1^2+r_2^2)^2}=-\frac{b}{2\pi}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2}+\frac{b}{4\pi(1-\nu)}\frac{r_2(r_2^2-r_1^2)}{(r_1^2+r_2^2)^2}$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial r_2}=\frac{b}{2\pi}\frac{1}{1+\left(\frac{r_2}{r_1}\right)^2}\left(\frac{1}{r_1}\right)+\frac{b}{4\pi(1-\nu)}\frac{r_1(r_1^2+r_2^2)-2r_1r_2^2}{(r_1^2+r_2^2)^2}=\frac{b}{2\pi}\frac{r_1}{r_1^2+r_2^2}+\frac{b}{4\pi(1-\nu)}\frac{r_1(r_1^2-r_2^2)}{(r_1^2+r_2^2)^2}$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial r_1}=\frac{b}{4\pi}\frac{2\nu-1}{1-\nu}\frac{r_1}{r_1^2+r_2^2}-\frac{b}{2\pi(1-\nu)}\frac{r_1r_2^2}{(r_1^2+r_2^2)^2}$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial r_2}=\frac{b}{4\pi}\frac{2\nu-1}{1-\nu}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2}+\frac{b}{2\pi(1-\nu)}\frac{r_1^2r_2}{(r_1^2+r_2^2)^2}$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial r_3}=\frac{\partial u_2}{\partial r_3}=\frac{\partial u_3}{\partial r_1}=\frac{\partial u_3}{\partial r_2}=\frac{\partial u_3}{\partial r_3}=0$$

となり、拘束歪の変動量は、

$$\delta e_{11}^c=\frac{\partial u_1}{\partial r_1}=-\frac{b}{2\pi}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2}+\frac{b}{4\pi(1-\nu)}\frac{r_2(r_2^2-r_1^2)}{(r_1^2+r_2^2)^2}$$

$$\delta e_{22}^c=\frac{\partial u_2}{\partial r_2}=\frac{b}{4\pi}\frac{2\nu-1}{1-\nu}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2}+\frac{b}{2\pi(1-\nu)}\frac{r_1^2r_2}{(r_1^2+r_2^2)^2}$$

$$\begin{aligned}\delta e_{12}^c&=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial u_1}{\partial r_2}+\frac{\partial u_2}{\partial r_1}\right)\\&=\frac{1}{2}\left[\frac{b}{2\pi}\frac{r_1}{r_1^2+r_2^2}+\frac{b}{4\pi(1-\nu)}\frac{r_1(r_1^2-r_2^2)}{(r_1^2+r_2^2)^2}+\frac{b}{4\pi}\frac{2\nu-1}{1-\nu}\frac{r_1}{r_1^2+r_2^2}-\frac{b}{2\pi(1-\nu)}\frac{r_1r_2^2}{(r_1^2+r_2^2)^2}\right]\\&=\frac{1}{2}\left[\frac{b}{2\pi}\left(1+\frac{2\nu-1}{2-2\nu}\right)\frac{r_1}{r_1^2+r_2^2}+\frac{b}{4\pi(1-\nu)}\frac{r_1(r_1^2-r_2^2)-2r_1r_2^2}{(r_1^2+r_2^2)^2}\right]\\&=\frac{b}{8\pi}\left(\frac{1}{1-\nu}\right)\frac{r_1}{r_1^2+r_2^2}+\frac{b}{8\pi(1-\nu)}\frac{r_1(r_1^2-3r_2^2)}{(r_1^2+r_2^2)^2}\\&=\frac{b}{4\pi(1-\nu)}\frac{r_1(r_1^2-r_2^2)}{(r_1^2+r_2^2)^2}\end{aligned}$$

$$\delta e_{13}^c=\delta e_{23}^c=\delta e_{31}^c=\delta e_{32}^c=\delta e_{33}^c=0$$

$$\begin{aligned}\delta e_{11}^c+\delta e_{22}^c&=-\frac{b}{2\pi}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2}+\frac{b}{4\pi(1-\nu)}\frac{r_2(r_2^2-r_1^2)}{(r_1^2+r_2^2)^2}+\frac{b}{4\pi}\frac{2\nu-1}{1-\nu}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2}+\frac{b}{2\pi(1-\nu)}\frac{r_1^2r_2}{(r_1^2+r_2^2)^2}\\&=-\frac{b}{4\pi}\frac{2(1-\nu)}{1-\nu}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2}+\frac{b}{4\pi}\frac{2\nu-1}{1-\nu}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2}+\frac{b}{4\pi(1-\nu)}\frac{r_2(r_2^2-r_1^2)}{(r_1^2+r_2^2)^2}+\frac{b}{4\pi(1-\nu)}\frac{2r_1^2r_2}{(r_1^2+r_2^2)^2}\\&=\frac{b}{4\pi}\frac{4\nu-3}{1-\nu}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2}+\frac{b}{4\pi(1-\nu)}\frac{r_2(r_1^2+r_2^2)}{(r_1^2+r_2^2)^2}\\&=\frac{b}{2\pi}\frac{2\nu-1}{1-\nu}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2}\end{aligned}$$

と計算される。ここで、刃状転位の eigen 歪場 $e_{21}^T(\mathbf{r})=e_{12}^T(\mathbf{r})=\frac{1}{2}b\delta(r_2)H(-r_1)$ の空間平均は、

$$
\begin{aligned}
\left\langle e_{21}^{T}(\mathbf{r})\right\rangle &= \frac{1}{V}\int_{\mathbf{r}} e_{21}^{T}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \\
&= \frac{1}{V}\int_{r_1}\int_{r_2}\int_{r_3}\frac{1}{2}b\delta(r_2)H(-r_1)dr_1dr_2dr_3 \\
&= \frac{1}{2}b\frac{1}{V}\int_{r_1}H(-r_1)dr_1\int_{r_2}\delta(r_2)dr_2\int_{r_3}dr_3 \\
&= \frac{1}{2}b\frac{1}{V}\frac{L}{2}L = \frac{b}{2L}
\end{aligned}
$$

であるので、$L\to\infty$において$\left\langle e_{21}^{T}(\mathbf{r})\right\rangle \to 0$となる。したがって、平均の拘束歪$\bar{e}_{ij}^{c}$は０とおいて良い。したがって、拘束歪は、

$$
\begin{aligned}
e_{11}^{c} &= -\frac{b}{2\pi}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2}+\frac{b}{4\pi(1-\nu)}\frac{r_2(r_2^2-r_1^2)}{(r_1^2+r_2^2)^2} = -\frac{b}{2\pi}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2}+\frac{b}{2\pi}\frac{(\lambda+\mu)}{\lambda+2\mu}\frac{r_2(r_2^2-r_1^2)}{(r_1^2+r_2^2)^2} \\
e_{22}^{c} &= \frac{b}{4\pi}\frac{2\nu-1}{1-\nu}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2}+\frac{b}{2\pi(1-\nu)}\frac{r_1^2r_2}{(r_1^2+r_2^2)^2} = -\frac{b}{2\pi}\frac{\mu}{\lambda+2\mu}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2}+\frac{b}{\pi}\frac{(\lambda+\mu)}{\lambda+2\mu}\frac{r_1^2r_2}{(r_1^2+r_2^2)^2} \\
e_{12}^{c} &= \frac{b}{4\pi(1-\nu)}\frac{r_1(r_1^2-r_2^2)}{(r_1^2+r_2^2)^2} \\
e_{13}^{c} &= e_{23}^{c} = e_{31}^{c} = e_{32}^{c} = e_{33}^{c} = 0 \\
e_{11}^{c}+e_{22}^{c} &= \frac{b}{2\pi}\frac{2\nu-1}{1-\nu}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2} = -\frac{b}{\pi}\frac{\mu}{\lambda+2\mu}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2}
\end{aligned}
$$

と表現される。なおここで、

$$
\frac{1}{1-\nu} = \frac{1}{1-\dfrac{\lambda}{2(\lambda+\mu)}} = \frac{1}{1-\dfrac{\lambda}{2\lambda+2\mu}} = \frac{1}{\dfrac{\lambda+2\mu}{2\lambda+2\mu}} = \frac{2(\lambda+\mu)}{\lambda+2\mu}
$$

$$
\frac{2\nu-1}{1-\nu} = \frac{2\dfrac{\lambda}{2(\lambda+\mu)}-1}{1-\dfrac{\lambda}{2(\lambda+\mu)}} = \frac{2\lambda-2(\lambda+\mu)}{2(\lambda+\mu)-\lambda} = \frac{-2\mu}{\lambda+2\mu}
$$

$$
\frac{\nu}{1-\nu} = \frac{\dfrac{\lambda}{2(\lambda+\mu)}}{1-\dfrac{\lambda}{2(\lambda+\mu)}} = \frac{\lambda}{2(\lambda+\mu)-\lambda} = \frac{\lambda}{\lambda+2\mu}
$$

である。これより応力場は、

$$
\begin{aligned}
\sigma_{11} &= C_{11kl}(e_{kl}^c - e_{kl}^T) = C_{1111}(e_{11}^c - e_{11}^T) + C_{1122}(e_{22}^c - e_{22}^T) + C_{1133}(e_{33}^c - e_{33}^T) \\
&= (\lambda + 2\mu)e_{11}^c + \lambda e_{22}^c = \lambda(e_{11}^c + e_{22}^c) + 2\mu e_{11}^c \\
\sigma_{22} &= C_{22kl}(e_{kl}^c - e_{kl}^T) = C_{2211}(e_{11}^c - e_{11}^T) + C_{2222}(e_{22}^c - e_{22}^T) + C_{2233}(e_{33}^c - e_{33}^T) \\
&= (\lambda + 2\mu)e_{22}^c + \lambda e_{11}^c = \lambda(e_{11}^c + e_{22}^c) + 2\mu e_{22}^c \\
\sigma_{33} &= C_{33kl}(e_{kl}^c - e_{kl}^T) = C_{3311}(e_{11}^c - e_{11}^T) + C_{3322}(e_{22}^c - e_{22}^T) + C_{3333}(e_{33}^c - e_{33}^T) = \lambda(e_{11}^c + e_{22}^c) \\
\sigma_{12} &= C_{12kl}(e_{kl}^c - e_{kl}^T) = C_{1212}(e_{12}^c - e_{12}^T) + C_{1221}(e_{21}^c - e_{21}^T) = 2\mu(e_{12}^c - e_{12}^T) \\
\sigma_{13} &= \sigma_{23} = 0
\end{aligned}
$$

にて与えられるので、先の拘束歪式を代入して、刃状転位の応力場は、

$$
\begin{aligned}
\sigma_{33} &= \lambda(e_{11}^c + e_{22}^c) = -\frac{b}{\pi}\frac{\lambda\mu}{\lambda+2\mu}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2} = -\frac{b}{\pi}\frac{\mu\nu}{1-\nu}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2} \\
\sigma_{11} &= \lambda(e_{11}^c + e_{22}^c) + 2\mu e_{11}^c \\
&= -\frac{b}{\pi}\frac{\mu\nu}{1-\nu}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2} + 2\mu\left\{-\frac{b}{2\pi}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2} + \frac{b}{4\pi(1-\nu)}\frac{r_2(r_2^2-r_1^2)}{(r_1^2+r_2^2)^2}\right\} \\
&= -\frac{b}{\pi}\frac{\mu\nu}{1-\nu}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2} - \frac{b}{\pi}\frac{\mu(1-\nu)}{1-\nu}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2} + \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{r_2(r_2^2-r_1^2)}{(r_1^2+r_2^2)^2} \\
&= -\frac{b}{\pi}\frac{\mu}{1-\nu}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2} + \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{r_2(r_2^2-r_1^2)}{(r_1^2+r_2^2)^2} \\
&= -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\left\{\frac{2r_2(r_1^2+r_2^2) - r_2(r_2^2-r_1^2)}{(r_1^2+r_2^2)^2}\right\} = -\frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{r_2(3r_1^2+r_2^2)}{(r_1^2+r_2^2)^2} \\
\sigma_{22} &= \lambda(e_{11}^c + e_{22}^c) + 2\mu e_{22}^c \\
&= -\frac{b}{\pi}\frac{\mu\nu}{1-\nu}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2} + 2\mu\left\{\frac{b}{4\pi}\frac{(2\nu-1)}{1-\nu}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2} + \frac{b}{2\pi(1-\nu)}\frac{r_1^2 r_2}{(r_1^2+r_2^2)^2}\right\} \\
&= -\frac{\mu b}{2\pi}\frac{2\nu}{1-\nu}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2} + \frac{\mu b}{2\pi}\frac{(2\nu-1)}{1-\nu}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2} + \frac{\mu b}{\pi(1-\nu)}\frac{r_1^2 r_2}{(r_1^2+r_2^2)^2} \\
&= -\frac{\mu b}{2\pi}\frac{1}{1-\nu}\frac{r_2}{r_1^2+r_2^2} + \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{2r_1^2 r_2}{(r_1^2+r_2^2)^2} \\
&= \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\left\{\frac{-r_2(r_1^2+r_2^2) + 2r_1^2 r_2}{(r_1^2+r_2^2)^2}\right\} = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{r_2(r_1^2-r_2^2)}{(r_1^2+r_2^2)^2} \\
\sigma_{12} &= 2\mu(e_{12}^c - e_{12}^T) = 2\mu e_{12}^c - 2\mu e_{12}^T = \frac{\mu b}{2\pi(1-\nu)}\frac{r_1(r_1^2-r_2^2)}{(r_1^2+r_2^2)^2} - 2\mu e_{12}^T
\end{aligned}
$$

と計算される。

「付録：転位における **eigen** 歪の一般的表記」

転位が走った２次元領域をSとしよう。Sは曲がっていても良い。この曲面Sのエッジに転位が存在し、このエッジが転位線Lである。転位線Lに沿う単位ベクトルをνとし（方向はどちらでも良い)、バーガース回路を、右ネジが進む方向がν方向に一致するように取る。バーガース回路の起点と終点はS面に取るが、この起点と終点は転位が存在するので一致し

ない。起点側の面をS_-とし、終点側の面をS_+とする（なお便宜的にS_-およびS_+と記しているだけでいずれも座標的にはS面である）。S_+面上の終点をS_-面上の起点に対して相対的にずらしたベクトルをバーガースベクトル**b**と定義する。つまり、**b**=(S_+面上の終点)－(S_-面上の起点)である。またS_+面からS_-面に向けて垂直に立てたベクトルを**n**とする（したがって**n**はバーガース回路に沿ってS面を垂直に貫く単位ベクトルとなる）。ν と**b**が直交する場合が刃状転位で、平行な場合がらせん転位である。この転位のeigen変形勾配 β^*_{ji} は、

$$\beta^*_{ji}(\mathbf{x}) = -b_i n_j \delta(\mathbf{S}-\mathbf{r})$$

にて与えられる。$\delta(\mathbf{S}-\mathbf{r})$ は１次元デルタ関数で、$\mathbf{S}-\mathbf{r}$ は任意の点 $\mathbf{r}$ の S 面からの距離である。つまり、β^*_{ji} は点 $\mathbf{r}$ が S 面上に存在する場合にのみ値を持つ。これより転位による eigen 歪は、

$$e^T_{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2}(\beta^*_{ij} + \beta^*_{ji}) = -\frac{1}{2}(b_j n_i + b_i n_j)\delta(\mathbf{S}-\mathbf{r})$$

にて定義される。

具体的にすべり面が平面である１本の転位について考えて見よう。まず、x 軸を書く。次に x 軸の負の数直線部分を全て含むように平面 S 面を置く。この面がすべり面である。続いて x 軸の原点からこの S 面に垂直に y 軸を置く。座標は右手系を用いるので、x 軸を y 軸側に回転させたときに右ネジの進む方向に z 軸を取る。これより S 面は x-z 平面(x<0)となり、転位線は z 軸になるので ν を z 軸の正の方向にしよう。したがって、先の定義から $\mathbf{n} = (0,-1,0)$ となり、また $\delta(\mathbf{S}-\mathbf{r}) = \delta(y)H(-x)$ と置くことが出来る。以上で転位の空間的配置は全て決定されたが、まだ刃状転位からせん転位かは設定していない。この転位が刃状転位であるならば、$\mathbf{b} = (\pm b, 0, 0)$ のいずれかであり、らせん転位ならば $\mathbf{b} = (0,0,\pm b)$ のいずれかである。成分内の ± は転位がすべる方向に対応している。例として、$\mathbf{b} = (b,0,0)$ および $\mathbf{b} = (0,0,b)$ の場合について eigen 歪を書き下して見よう。

$\mathbf{b} = (b,0,0)$ の刃状転位では、

$$e^T_{ij}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2}(b_j n_i + b_i n_j)\delta(\mathbf{S}-\mathbf{r}) = -\frac{1}{2}(b_j n_i + b_i n_j)\delta(y)H(-x)$$
$$e^T_{12}(\mathbf{r}) = e^T_{21}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2}(b_2 n_1 + b_1 n_2)\delta(y)H(-x) = \frac{1}{2}b\delta(y)H(-x)$$

と表される。他の $e^T_{ij}(\mathbf{r})$ は０である。同様に、$\mathbf{b} = (0,0,b)$ のらせん転位では、

$$e^T_{ij}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2}(b_j n_i + b_i n_j)\delta(\mathbf{S}-\mathbf{r}) = -\frac{1}{2}(b_j n_i + b_i n_j)\delta(y)H(-x)$$
$$e^T_{23}(\mathbf{r}) = e^T_{32}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2}(b_3 n_2 + b_2 n_3)\delta(y)H(-r_1) = \frac{1}{2}b\delta(y)H(-x)$$

と表される。この場合も他の $e^T_{ij}(\mathbf{x})$ は０である。