界面方程式の導出

by *T. Koyama*

１．非保存系の界面方程式の導出

非保存系の速度方程式を次のように定義する。

$$\frac{\partial s(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -L\left(\frac{\delta F}{\delta \mathbf{r}}\right) \tag{1}$$

$$F = \int_{\mathbf{r}} \left[f\{s(\mathbf{r},t)\} + \frac{1}{2}\kappa \left| \frac{\partial s}{\partial \mathbf{r}} \right|^2 \right] d\mathbf{r} \tag{2}$$

$$\left(\frac{\delta F}{\delta \mathbf{r}}\right) = \left(\frac{\partial f}{\partial s}\right) - \kappa \left(\frac{\partial^2 s}{\partial \mathbf{r}^2}\right) \tag{3}$$

$$\frac{\partial s(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -L\left(\frac{\delta F}{\delta \mathbf{r}}\right) = -L\left(\frac{\partial f}{\partial s}\right) + L\kappa\left(\frac{\partial^2 s}{\partial \mathbf{r}^2}\right) = -L\ f_{,s}\{s(\mathbf{r},t)\} + L\kappa\left(\frac{\partial^2 s}{\partial \mathbf{r}^2}\right) \tag{4}$$

ここで、勾配エネルギー係数$\kappa = W\varepsilon^2$は、その定義から、(W:エネルギー)×(ε:長さ)^{2}の次元を有する。式(4)全体をWで規格化し、さらに移動係数Lも$L=1$と規格化する。これより、式(4)は、

$$\frac{\partial s(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -f_{,s}\{s(\mathbf{r},t)\} + \varepsilon^2\left(\frac{\partial^2 s}{\partial \mathbf{r}^2}\right) \tag{5}$$

と表記することができる。

さて今、εが小さいとして界面方程式を導出する。無限に広がっている系を考え、その原点に半径Rの球が存在すると仮定する。球内のsの値は$s=-1$、球外の値を$s=1$とする。界面の厚さεはRに比較して十分に小さいとする。球の動径方向をrとすると、

$$s(\mathbf{r},t) = s_0(r - R(t)) \tag{6}$$

にて表すことができる。s_0は１変数関数である。式(6)を、式(5)に代入する。

$$\frac{\partial s_0(r-R(t))}{\partial t} = \frac{\partial s_0}{\partial \mathbf{r}}\left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t}\right) = s_0'\left(\frac{\partial\{r-R(t)\}}{\partial t}\right) = -s_0'\left(\frac{\partial R(t)}{\partial t}\right)$$

また、

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 s_0(r-R(t))}{\partial x^2} &= \frac{\partial}{\partial x}\left(s_0'\frac{\partial(x^2+y^2+z^2)^{1/2}}{\partial x}\right) \\
&= \frac{\partial}{\partial x}\left(s_0'\frac{x}{(x^2+y^2+z^2)^{1/2}}\right) \\
&= s_0''\frac{x^2}{(x^2+y^2+z^2)} + s_0'\frac{(x^2+y^2+z^2)^{1/2} - x(x^2+y^2+z^2)^{-1/2}x}{(x^2+y^2+z^2)} \\
&= s_0''\frac{x^2}{r^2} + s_0'\frac{(x^2+y^2+z^2)-x^2}{(x^2+y^2+z^2)^{3/2}}
\end{aligned}$$

より、

$$\frac{\partial^2 s(\mathbf{r},t)}{\partial \mathbf{r}^2}=\frac{\partial^2 s_0(r-R(t))}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 s_0(r-R(t))}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 s_0(r-R(t))}{\partial z^2}$$

$$=s_0''\frac{x^2}{r^2}+s_0'\frac{(x^2+y^2+z^2)-x^2}{(x^2+y^2+z^2)^{3/2}}+s_0''\frac{y^2}{r^2}+s_0'\frac{(x^2+y^2+z^2)-y^2}{(x^2+y^2+z^2)^{3/2}}$$

$$+s_0''\frac{z^2}{r^2}+s_0'\frac{(x^2+y^2+z^2)-z^2}{(x^2+y^2+z^2)^{3/2}}$$

$$=s_0''\frac{x^2+y^2+z^2}{r^2}+s_0'\frac{3(x^2+y^2+z^2)-(x^2+y^2+z^2)}{(x^2+y^2+z^2)^{3/2}}$$

$$=s_0''+s_0'\frac{2}{r}$$

である。したがって、

$$-s_0'\left(\frac{\partial R(t)}{\partial t}\right)=-f_{,s}\{s_0(r-R(t))\}+\varepsilon^2\left(s_0''+s_0'\frac{2}{r}\right)$$
$$=-f_{,s}\{s_0(r-R(t))\}+\varepsilon^2 s_0''+\varepsilon^2 s_0'\frac{2}{r} \tag{7}$$

となる。さて、ここで、$\varepsilon/R<<1$のとき、界面近傍では、界面における曲率を無視して、sの空間変化は１次元の平衡解で近似できる。例えばx方向を選べば、式(3)の平衡解は、

$$\left(\frac{\delta F}{\delta x}\right)=\left(\frac{\partial f}{\partial s}\right)-\kappa\left(\frac{\partial^2 s}{\partial x^2}\right)=0$$

にて与えられるので、結局、

$$f_{,s}\{s_0(r-R(t))\}-\varepsilon^2 s_0''=0 \tag{8}$$

が得られる。さらに、s_0'は、$r=R$においてのみ大きな値を有し、他では０である。したがって、s_0'/rはs_0'/Rで置き換えることが出来る。以上より、式(7)は式(9)にて与えられる。

$$-s_0'\left(\frac{\partial R(t)}{\partial t}\right)=\varepsilon^2 s_0'\frac{2}{R}$$
$$\frac{\partial R(t)}{\partial t}=-\varepsilon^2\frac{2}{R} \tag{9}$$

興味深い点は、s_0'が消えてしまうところである。これより、初期に有限の大きさを持つ球は、時間の進行にともない消滅していくことがわかる。

　さて、以上は球状ドメインに対して導出したが、次に、一般の界面形状に対して界面方程式の導出を試みる。今、任意界面に接する球を考える。球の動径方向の発展速度は式(9)にて与えられるので、この方向はそのまま、界面の移動速度の法線成分Vとなる。また式(9)より、その右辺は界面の曲率Hであるので、結局、界面方程式は、

$$V = \varepsilon^2 H \tag{10}$$

$$V = \frac{\partial R(t)}{\partial t} \tag{11}$$

$$H = -\frac{2}{R} \tag{12}$$

なる。ところで、接する球の方向、すなわち曲率の符号を定義しなくてはならない。そのために、ここで、$s=1$の領域で正、$s=-1$の領域で負となる関数$u(\mathbf{r},t)$を定義する。界面位置は$u(\mathbf{r},t)=0$にて定義される。なお、この関数$u(\mathbf{r},t)$を通常の場の物理量とすれば、$u(\mathbf{r},t)$は phase field となる。$u(\mathbf{r},t)$を用いることによって、界面における法線ベクトル$\mathbf{n}$は、式(13)にて与えられる。

$$\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3) = \frac{\mathrm{grad}(u)}{|\mathrm{grad}(u)|} = \frac{1}{\sqrt{u_x^2 + u_y^2 + u_z^2}} \left(u_x, u_y, u_z \right) \tag{13}$$

次に、界面の曲率を計算しよう。実は、平均曲率は、

$$H = -\mathrm{div}(\mathbf{n}) \tag{14}$$

にて与えられる。式(14)を証明しよう。平均値は座標系には無関係であるので、今、曲率を導出しようとしている界面位置に座標の原点を移動させ、$\mathbf{n}$方向が z 軸方向となるように座標系を回転させる。この操作により、

$$\mathbf{n} = (n_1, n_2, n_3) = \frac{1}{\sqrt{u_x^2 + u_y^2 + u_z^2}} \left(u_x, u_y, u_z \right) = (0, 0, 1) \tag{15}$$

となる。さらに$u(\mathbf{r},t)$の定義から$u_z > 0$であるので、上記の操作によって、$u(\mathbf{r},t)$は、z の上方で 1、下方で-1 の値を取ることになる。したがって、この原点では、当然ながら、

$$u(x, y, z) = 0 \tag{16}$$

である。これより、原点付近で、この式を z に対して解くことができ、

$$z = w(x, y) \tag{17}$$

と界面を表現することができる。式(17)を式(16)に代入することによって次式を得る。

$$u\{x, y, w(x, y)\} = 0 \tag{18}$$

式(18)の両辺を x, y にてそれぞれ微分する。

$$\begin{aligned} & u_x\{x, y, w(x, y)\} + u_w\{x, y, w(x, y)\} w_x(x, y) \\ &= u_x\{x, y, w(x, y)\} + u_z\{x, y, w(x, y)\} w_x(x, y) = 0 \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&u_y\{x,y,w(x,y)\}+u_w\{x,y,w(x,y)\}w_y(x,y)\\
&=u_y\{x,y,w(x,y)\}+u_z\{x,y,w(x,y)\}w_y(x,y)=0
\end{aligned}
$$

式(15)より、$\left(u_x, u_y, u_z\right)=\left(\sqrt{u_x^2+u_y^2+u_z^2}\right)(0,0,1)$であるので、

$$
\begin{aligned}
&u_x\{0,0,w(0,0)\}+u_z\{0,0,w(0,0)\}w_x(0,0)=0\\
&u_y\{0,0,w(0,0)\}+u_z\{0,0,w(0,0)\}w_y(0,0)=0\\
&\therefore\ \ w_x(0,0)=0 \quad , \quad w_y(0,0)=0
\end{aligned}
\tag{19}
$$

となる。次に、式(18)の両辺を x, y にてそれぞれ２階微分する。

$$
\begin{aligned}
&u_{xx}+u_{wx}w_x+(u_{xw}+u_{ww}w_x)w_x+u_w w_{xx}\\
&=u_{xx}+2u_{wx}w_x+u_{ww}(w_x)^2+u_w w_{xx}\\
&=u_{xx}+2u_{zx}w_x+u_{zz}(w_x)^2+u_z w_{xx}=0
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
&u_{yy}+u_{wy}w_y+(u_{yw}+u_{ww}w_y)w_y+u_w w_{yy}\\
&=u_{yy}+2u_{wy}w_y+u_{ww}(w_y)^2+u_w w_{yy}\\
&=u_{yy}+2u_{zy}w_y+u_{zz}(w_y)^2+u_z w_{yy}=0
\end{aligned}
$$

同様に、式(15)および式(19)より、

$$
\begin{aligned}
&u_{xx}+u_z w_{xx}=0\\
&u_{yy}+u_z w_{yy}=0
\end{aligned}
\tag{20}
$$

である。準備が整ったので、式(14)を計算しよう。

$$
\begin{aligned}
H&=-\mathrm{div}(\mathbf{n})\\
&=-\mathrm{div}\left(\frac{u_x}{\sqrt{u_x^2+u_y^2+u_z^2}},\frac{u_y}{\sqrt{u_x^2+u_y^2+u_z^2}},\frac{u_z}{\sqrt{u_x^2+u_y^2+u_z^2}}\right)\\
&=-\frac{1}{(u_x^2+u_y^2+u_z^2)}\left\{\begin{array}{l}
u_{xx}\sqrt{u_x^2+u_y^2+u_z^2}-u_x\dfrac{1}{2}(u_x^2+u_y^2+u_z^2)^{-1/2}\{(2u_x)u_{xx}+(2u_y)u_{xy}+(2u_z)u_{xz}\}\\
+u_{yy}\sqrt{u_x^2+u_y^2+u_z^2}-u_y\dfrac{1}{2}(u_x^2+u_y^2+u_z^2)^{-1/2}\{(2u_x)u_{yx}+(2u_y)u_{yy}+(2u_z)u_{yz}\}\\
+u_{zz}\sqrt{u_x^2+u_y^2+u_z^2}-u_z\dfrac{1}{2}(u_x^2+u_y^2+u_z^2)^{-1/2}\{(2u_x)u_{zx}+(2u_y)u_{zy}+(2u_z)u_{zz}\}
\end{array}\right\}\\
&=-\frac{1}{(u_x^2+u_y^2+u_z^2)}\left\{\begin{array}{l}
u_{xx}\sqrt{u_x^2+u_y^2+u_z^2}-(u_x^2+u_y^2+u_z^2)^{-1/2}(u_xu_xu_{xx}+u_xu_yu_{xy}+u_xu_zu_{xz})\\
+u_{yy}\sqrt{u_x^2+u_y^2+u_z^2}-(u_x^2+u_y^2+u_z^2)^{-1/2}(u_xu_yu_{yx}+u_yu_yu_{yy}+u_yu_zu_{yz})\\
+u_{zz}\sqrt{u_x^2+u_y^2+u_z^2}-(u_x^2+u_y^2+u_z^2)^{-1/2}(u_xu_zu_{zx}+u_yu_zu_{zy}+u_zu_zu_{zz})
\end{array}\right\}
\end{aligned}
$$

$$= -\frac{1}{\sqrt{u_x^2 + u_y^2 + u_z^2}} \left\{ u_{xx} + u_{yy} + u_{zz} - \frac{1}{(u_x^2 + u_y^2 + u_z^2)} \sum_{i=x,y,z} \sum_{j=x,y,z} u_i u_j u_{ij} \right\} \tag{21}$$

式(15)(20)より、

$$\left(u_x, u_y, u_z\right) = \left(\sqrt{u_x^2 + u_y^2 + u_z^2}\right)(0, 0, 1) = \left(0, 0, \sqrt{u_x^2 + u_y^2 + u_z^2}\right) = \left(0, 0, u_z\right), \quad u_z > 0$$

および

$$u_{xx} = -u_z w_{xx}$$
$$u_{yy} = -u_z w_{yy}$$

であるから、式(21)に代入することにより、

$$\begin{aligned} H &= -\mathrm{div}(\mathbf{n}) \\ &= -\frac{1}{\sqrt{u_x^2 + u_y^2 + u_z^2}} \left\{ u_{xx} + u_{yy} + u_{zz} - \frac{1}{(u_x^2 + u_y^2 + u_z^2)} \sum_{i=x,y,z} \sum_{j=x,y,z} u_i u_j u_{ij} \right\} \\ &= -\frac{1}{u_z} \left\{ -u_z w_{xx} - u_z w_{yy} + u_{zz} - \frac{1}{(u_x^2 + u_y^2 + u_z^2)} u_z u_z u_{zz} \right\} \\ &= -\frac{1}{u_z} \left\{ -u_z w_{xx} - u_z w_{yy} + u_{zz} - \frac{1}{u_z^2} u_z^2 u_{zz} \right\} \\ &= w_{xx} + w_{yy} \end{aligned} \tag{22}$$

となり、界面における平均曲率が $H = -\mathrm{div}(\mathbf{n})$ にて与えられることがわかる。

２．保存系の界面方程式の導出

非保存系の速度方程式の場合と同様に、保存系の界面方程式を導く。まず、保存系の速度方程式（通常の拡散方程式に等しい）を次のように定義する。

$$\frac{\partial c(\mathbf{r},t)}{\partial t}=M\nabla^2\left(\frac{\delta F}{\delta \mathbf{r}}\right) \tag{23}$$

$$F=\int_{\mathbf{r}}\left[f\{c(\mathbf{r},t)\}+\frac{1}{2}\kappa\left(\frac{\partial c}{\partial \mathbf{r}}\right)^2\right]d\mathbf{r} \tag{24}$$

$$\left(\frac{\delta F}{\delta \mathbf{r}}\right)=\left(\frac{\partial f}{\partial c}\right)-\kappa\left(\frac{\partial^2 c}{\partial \mathbf{r}^2}\right) \tag{25}$$

$$\frac{\partial c(\mathbf{r},t)}{\partial t}=M\nabla^2\left(\frac{\delta F}{\delta \mathbf{r}}\right)=M\nabla^2\left(\frac{\partial f}{\partial c}\right)-M\kappa\nabla^2\left(\frac{\partial^2 c}{\partial \mathbf{r}^2}\right)=M\nabla^2 f_{,c}\{c(\mathbf{r},t)\}-M\kappa\nabla^2\left(\frac{\partial^2 c}{\partial \mathbf{r}^2}\right) \tag{26}$$

ここで、勾配エネルギー係数$\kappa=W\varepsilon^2$は、その定義から、(W:エネルギー)×(ε:長さ)^{2}の次元を有する。式(26)全体をWで規格化し、さらに移動(拡散)係数Mも$M=1$と規格化する。これより、式(26)は、

$$\frac{\partial c(\mathbf{r},t)}{\partial t}=\nabla^2 f_{,c}\{c(\mathbf{r},t)\}-\varepsilon^2\nabla^2\left(\frac{\partial^2 c}{\partial \mathbf{r}^2}\right) \tag{27}$$

と表記することができる。

さて今、εが小さいとして界面方程式を導出する。いま任意形状のドメインが存在すると仮定し、ドメイン内のcの値は$c=0$、外の値を$c=1$とする。次に界面の状況に応じて座標変換を行う。すなわち、界面に垂直な外向き法線方向の単位ベクトルを$\mathbf{n}$とし、この方向が常にz軸と一致するように座標系を回転させる。したがって、界面における接平面がxy平面となる。これより、

$$\nabla c(\mathbf{r})=\mathbf{n}\left(\frac{\partial c}{\partial z}\right) \tag{28}$$

と表される。なぜなら、任意の座標系において、法線ベクトルは、

$$\mathbf{n}=\frac{1}{|\mathrm{grad}\{c(\mathbf{r})\}|}\mathrm{grad}\{c(\mathbf{r})\}=\frac{1}{|\nabla c(\mathbf{r})|}\nabla c(\mathbf{r}) \tag{29}$$

にて与えられるが、式(28)より、

$$|\nabla c(\mathbf{r})|=\left|\mathbf{n}\left(\frac{\partial c}{\partial z}\right)\right|=\left|\left(\frac{\partial c}{\partial z}\right)\right|=\left(\frac{\partial c}{\partial z}\right) \tag{30}$$

である(界面の外向きに濃度勾配は正と仮定してある)ので、式(30)を式(29)に代入すること

によって、式(28)が成立することがわかる。さらに式(28)より、

$$
\begin{aligned}
\mathrm{div}\{\nabla c(\mathbf{r})\} &= \nabla\cdot\nabla c(\mathbf{r}) = \nabla\cdot\left\{\mathbf{n}\left(\frac{\partial c}{\partial z}\right)\right\} \\
&= \left(\frac{\partial c}{\partial z}\right)\nabla\cdot\mathbf{n} + \mathbf{n}\cdot\mathrm{gard}\left(\frac{\partial c}{\partial z}\right) \\
&= \left(\frac{\partial c}{\partial z}\right)\nabla\cdot\mathbf{n} + \mathbf{n}\cdot\nabla\left(\frac{\partial c}{\partial z}\right) \\
&= \left(\frac{\partial c}{\partial z}\right)\nabla\cdot\mathbf{n} + \mathbf{n}\cdot\left(\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}\right)\mathbf{n} \\
&= \left(\frac{\partial c}{\partial z}\right)\nabla\cdot\mathbf{n} + \left(\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}\right)
\end{aligned}
\tag{31}
$$

である。ここで、界面における平均曲率 H は、$H = -\mathrm{div}(\mathbf{n}) = -\nabla\cdot\mathbf{n}$ にて与えられるので、式(31)は、

$$
\mathrm{div}\{\nabla c(\mathbf{r})\} = \left(\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}\right) + \left(\frac{\partial c}{\partial z}\right)\nabla\cdot\mathbf{n} = \left(\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}\right) - \left(\frac{\partial c}{\partial z}\right)H \tag{32}
$$

と書き換えることが出来る。通常、濃度勾配エネルギーに起因するポテンシャルは、濃度場の２階微分にて表現されるが、式(32)はこのポテンシャルの別表現である。式(32)は、このポテンシャルを界面に垂直な成分(第１項)と界面内成分(第２項)に分けたもので、特に界面が急峻な場合には、第１項はほとんど一定値を取ると考えて良い。物理的なイメージとしては、界面に垂直な濃度プロファイル形状は、常に平衡濃度プロファイル形状をなっていると考えても良いということである。

さて、式(27)の変形に戻ろう。まず以上の界面における座標変換から、式(27)の左辺は、

$$
\frac{\partial c(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \left\{\frac{\partial c(\mathbf{r},t)}{\partial z}\right\}\left(\frac{\partial z}{\partial t}\right) \tag{33}
$$

と書くことが出来る。また右辺は、式(32)より、

$$
\nabla^2 f_{,c}\{c(\mathbf{r},t)\} - \varepsilon^2\nabla^2\left(\frac{\partial^2 c}{\partial \mathbf{r}^2}\right) = \nabla^2 f_{,c}\{c(\mathbf{r},t)\} - \varepsilon^2\nabla^2\left(\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}\right) + \varepsilon^2\nabla^2\left\{\left(\frac{\partial c}{\partial z}\right)H\right\} \tag{34}
$$

となる。ここで、非常に濃度勾配が急峻な界面を仮定し、さらに界面の微小部分に着目すると、その部分はほとんど平面を近似できる。平面界面における平衡濃度プロファイル形状(その部分の曲率は 0 と置ける)は、式(25)より、

$$
f_{,c}\{c(\mathbf{r},t)\} - \varepsilon^2\left(\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}\right) = 0 \tag{35}
$$

を満たす。したがって、この場合、式(34)右辺の第１および２項が消え、結局、式(33)(34)(35)

より、式(27)は次のように書くことが出来る。

$$\left(\frac{\partial c}{\partial z}\right)\left(\frac{\partial z}{\partial t}\right)=\varepsilon^2\nabla^2\left\{\left(\frac{\partial c}{\partial z}\right)H\right\} \tag{36}$$

今、界面の運動のみを考慮したいので、界面に垂直方向の濃度勾配は、急峻かつ、ほとんど変化しないと仮定する。また、$-\partial z/\partial t$ を界面の垂直方向への移動速度 V とする。ここでマイナスの記号をつけたのは、通常、濃度勾配が減少する方向へ界面は移動することを考慮したものである。すなわち、

$$\begin{aligned}&-V=\left(\frac{\partial z}{\partial t}\right)=\varepsilon^2\nabla^2 H\\&\nabla^2 H=-\frac{1}{\varepsilon^2}V\end{aligned} \tag{37}$$

と書くことが出来る。これはポアッソン方程式である。ポアッソン方程式はグリーン関数法によって解くことが出来る。少し、グリーン関数法についてまとめておこう。

「グリーン関数法のまとめ」
　まず一般的に、ポアッソン方程式を

$$\nabla^2 f(\mathbf{r})=g(\mathbf{r})$$

のように置く。ここで、次式を満たす関数 $G(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ がグリーン関数である。

$$\nabla^2 G(\mathbf{r},\mathbf{r}')=\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')=\delta(x-x')\delta(y-y')\delta(z-z')$$

この両辺に $g(\mathbf{r})$ をかけて、$\mathbf{r}$ について積分してみよう。

$$\begin{aligned}&\nabla^2 G(\mathbf{r},\mathbf{r}')=\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\\&g(\mathbf{r})\nabla^2 G(\mathbf{r},\mathbf{r}')=g(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\\&\int g(\mathbf{r})\nabla^2 G(\mathbf{r},\mathbf{r}')d\mathbf{r}=\int g(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')d\mathbf{r}=\int g(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r}'-\mathbf{r})d\mathbf{r}=g(\mathbf{r}')\\&\nabla^2\left[\int G(\mathbf{r},\mathbf{r}')g(\mathbf{r})d\mathbf{r}\right]=g(\mathbf{r}')\end{aligned}$$

もとのポアッソン方程式との比較から、

$$\begin{aligned}&f(\mathbf{r}')=\int G(\mathbf{r},\mathbf{r}')g(\mathbf{r})d\mathbf{r}\\&f(\mathbf{r})=\int G(\mathbf{r}',\mathbf{r})g(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'\end{aligned}$$

である。またポアッソン方程式におけるグリーン関数は、

$$G(\mathbf{r},\mathbf{r}')=-\frac{1}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}+C=-\frac{1}{4\pi\sqrt{(x-x')^2+(y-y')^2+(z-z')^2}}+C=G(\mathbf{r}',\mathbf{r})$$

にて与えられているので、

$$f(\mathbf{r}) = \int G(\mathbf{r}',\mathbf{r})g(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' = \int G(\mathbf{r},\mathbf{r}')g(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' = -\frac{1}{4\pi}\int \frac{g(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d\mathbf{r}' + C\int g(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'$$

のように、解が得られる。

　さて、界面方程式の導出に戻ろう。グリーン関数法を用いることによって、式(37)は次のように解くことが出来る。

$$\begin{aligned} H(\mathbf{r},t) &= \int G(\mathbf{r},\mathbf{r}')\left\{-\frac{1}{\varepsilon^2}V(\mathbf{r}',t)\right\}d\mathbf{r}' \\ &= -\frac{1}{4\pi}\int \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\left\{-\frac{1}{\varepsilon^2}V(\mathbf{r}',t)\right\}d\mathbf{r}' + \int\left\{-\frac{C}{\varepsilon^2}V(\mathbf{r}',t)\right\}d\mathbf{r}' \\ &= \frac{1}{\varepsilon^2}\int \frac{1}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}V(\mathbf{r}',t)d\mathbf{r}' - \int \frac{C}{\varepsilon^2}V(\mathbf{r}',t)d\mathbf{r}' \end{aligned} \tag{38}$$

ここで、改めて、

$$G(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{1}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \tag{37}$$

$$\lambda = \frac{1}{\varepsilon^2}C \tag{38}$$

と置くと、

$$\begin{aligned} H(\mathbf{r},t) &= \frac{1}{\varepsilon^2}\int G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')V(\mathbf{r}',t)d\mathbf{r}' - \int \lambda V(\mathbf{r}',t)d\mathbf{r}' \\ \int G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')V(\mathbf{r}',t)d\mathbf{r}' &= \varepsilon^2 H(\mathbf{r},t) + \varepsilon^2\int \lambda V(\mathbf{r}',t)d\mathbf{r}' \end{aligned} \tag{39}$$

となり、保存場における界面方程式が得られる。ここで、定数λは溶質の保存則より、

$$\int V(\mathbf{r}',t)d\mathbf{r}' = 0 \tag{40}$$

の条件式から決定される。