異方性弾性体中の転位ループに対応する応力関数

大澤, 一人
九州大学応用力学研究所

矢木, 雅敏
九州大学応用力学研究所

小泉, 大一
明治大学理工学部

蔵元, 英一
九州大学応用力学研究所

https://doi.org/10.15017/27069

出版情報：九州大学応用力学研究所所報. 137, pp.183-188, 2009-09. Research Institute for Applied Mechanics, Kyushu University
バージョン：
権利関係：

異方性弾性体中の転位ループに対応する応力関数

大澤　一人*1　矢木　雅敏*1　小泉 大一*2　蔵元　英一*1
（2009年7月30日受理）

Stress Function for Dislocation Loops in Anisotropic Crystals

Kazuhito OHSAWA, Masatoshi YAGI, Hirokazu KOIZUMI and Eiichi KURAMOTO
E-mail of corresponding author: *ohsawa@riam.kyushu-u.ac.jp*

Abstract

Most of actual crystals are anisotropic elastic bodies in the continuum elastic limit. Therefore, analyses in terms of the anisotropic elasticity theory are necessary and effective for investigations of crystalline properties. Stress function is useful for solving the problems associated with the elasticity theory. We derive a convergent integral representation of the stress function for stress field produced by dislocation loops in anisotropic crystals. The convergent form of the stress function is convenient for numerical calculations and the derivation is supposed to be easily comprehensible. As an application, we derive energy of interaction between dislocation loops.

Key words : *dislocation loop, anisotropic elasticity, stress function, interaction energy, irradiation, Green's function*

1. はじめに

現実に存在するほとんどの結晶は連続体極限では異方性弾性体になる。従って、異方性弾性論による結晶の研究は必要であり有益でもある。応力関数はこのような連続弾性論に関係する問題を解くのに便利な概念である。本研究では異方性弾性体中の任意の形状をした転位ループが作る応力場に対応した応力関数を導出する。しかも、その応力関数は収束する積分形式で書かれているために数値計算に便利であり、またその導出過程は非常に理解しやすいと考えている。応力関数の応用として転位線に沿った線積分の形式で書かれた転位ループ間の相互作用エネルギーの計算式を示す。

応力関数は弾性論の問題を解くのに便利である。たとえば、Airy の応力関数 [1] では平面歪の問題が解ける。また、Westergaard の応力関数 [2] は応力拡大係数と関連していて破壊力学によく見られる。三次元の応力関数は Beltrami の応力関数 [3, 4] と呼ばれており、三次元の連続弾性論に関する問題を解くのに便利である。本論文では転位ループが作る応力場に対応する Beltrami の応力関数を導出することになる。

固体中の転位は物質の様々な機械的、光学的、電磁的な特徴を決定している [5]。特に、塑性変形は転位の非可逆的運動に起因していると言われており転位論の重要な研究課題である [6, 7]。さらに、照射組織の形成の研究から、高エネルギー粒子の照射によって材料中に生成された数十ナノメートルの転位ループに関心が集まっている [8]。これらの転位ループは自己格子間原子集合体が1つの結晶面に集積したものであり [9]、透過型電子顕微鏡の観察から特徴的な一次元運動をしていることが知られている [10, 11]。さらに、本来は部分転位になってしまうはずの FCC 金属でも同じような一次元運動が観察されている [12]。このような転位ループの一次元運動は照射組織の形成に重要な役割を果たしていると生成バイアスモデル [13, 14] では考えられている。

転位の理論的研究は最近でこそ強力な計算機の出現で数値計算に頼るところが多くなってきた。分子動力学的計算 [8, 15, 16] や第一原理計算 [17] などである。それに対して転位を連続弾性論の立場から張力を持った紐のように扱う [18] 弦モデルの手法も以前から行われてきた。この方法ではマイクロメートル程度の広い領域で起こる現象を研究するのに適した方法である。また、このモデルによって転位の移動に対する活性化エネルギーも計算されてきた [19, 20, 21]。さらに、転位の集団運動を弦モデルでシュミレーションする計算コードも開発されている [22]。本研究はこの転位の弦モデルの立場から線型弾性論を使って転位を研究するものである。

*1 九州大学応用力学研究所
*2 明治大学理工学部

Table 1 Anisotropy ratio $A = 2C_{44}/(C_{11} - C_{12})$ and structure of cubic metals at room temperature [23]. $A = 1$ means an isotropic crystal.

structure	BCC					FCC		
metal	α-Fe	W	V	Ta	Li	Cu	Au	Al
A	2.52	1.00	0.79	1.56	9.14	3.20	2.92	1.23

その時に問題になるのはどのような弾性論を使うかである。Table 1 からも分かるように、タングステンを除くほとんど全ての金属は実際は相当に大きな弾性的異方性を持っている。従って、その異方性を考慮することは現実の結晶中の転位の性質や固体の物性を研究する時に必要である。等方性弾性論と異方性弾性論から導かれる結果の違いを示す興味ある例を示すことにする。等方性弾性論の計算では真っ直ぐな螺旋転位の周りの歪場には圧縮（膨張）はない [24]。しかしながら、異方性弾性論によると螺旋転位の周りでもちゃんと圧縮（膨張）する歪場が存在することが導出できる [25]。この事実より、たとえ螺旋転位であっても Cottrell[26] の理論によると点欠陥と転位は相互作用をすることになる。実際に、アトムプローブ法でそのような Cottrell 雰囲気を観察しようとした実験がある [27]。

Green 関数法は線型弾性論に基づいた定量的な計算をする場合に有効な方法である。等方性と六方晶に対する Green 関数には解析解が存在する [28] ことが知られている。以前は異方性弾性体に対しても解析解をみつけようと努力されたようである [29] が成功しなかった。一般の異方性弾性体に対しては Green 関数の積分形しか存在しないが、それは簡単な周回積分の形式で書かれており [30, 31] かえって便利であるとも言われている。さらに高速で精度が高い Green 関数の数値計算についての研究も行われている [32]。

2. 三次元応力関数

最初に本論文で三次元応力関数を導出するために必要な表記をまとめておく。置換演算子 ϵ_{ijk} を次のように定義する。

$$\begin{aligned} \epsilon_{123} &= \epsilon_{231} = \epsilon_{312} = 1 \\ \epsilon_{132} &= \epsilon_{321} = \epsilon_{213} = -1 \end{aligned}$$

他の成分は 0 である。ここで Beltrami の応力関数 [3, 4] を定義する。

$$\sigma_{ij} = -\epsilon_{ikl}\epsilon_{jmn}\psi_{ln,km}. \tag{1}$$

論文を通して、繰り返した添え字は和をとるものとする。また、連続で微分可能な関数 f に対する x_i による空間微分は $f_{,i}$ のように表す。Beltrami の応力関数によって応力 σ_{ij} は自動的に力の釣り合い条件 $\sigma_{ij,j} = 0$ が満足される。

今後の計算のために新しい別の応力関数 χ_{ij} を定義する。

$$\psi_{ij} = \chi_{ij} + \alpha\delta_{ij}\chi_{kk} \quad \alpha \neq -1/3 \tag{2}$$

ここで $\chi_{kk} = \chi_{11} + \chi_{22} + \chi_{33}$ である。もし、$\alpha = -1/3$ ならば式 (2) は特異変換になるので除く。式 (2) を式 (1) に代入すると

$$\begin{aligned} \sigma_{ij} &= \delta_{ij}\{\chi_{kl,kl} - (1+\alpha)\chi_{ll,kk}\} + (1+\alpha)\chi_{kk,ij} \\ &\quad + \chi_{ij,kk} - \chi_{jk,ki} - \chi_{ki,jk} \end{aligned} \tag{3}$$

となる。ここで

$$\begin{aligned} \epsilon_{ikl}\epsilon_{jmn} &= \delta_{ij}\delta_{km}\delta_{ln} + \delta_{im}\delta_{kn}\delta_{lj} + \delta_{in}\delta_{kj}\delta_{lm} \\ &\quad - \delta_{im}\delta_{kj}\delta_{ln} - \delta_{ij}\delta_{kn}\delta_{lm} - \delta_{in}\delta_{km}\delta_{lj} \end{aligned} \tag{4}$$

を使った。さらに付録で証明するようにゲージ条件

$$\chi_{ij,j} = 0 \tag{5}$$

を課すことができる。$\alpha = -1$ とこのゲージ条件より、式 (3) は簡単になる。

$$\sigma_{ij} = \chi_{ij,kk} \tag{6}$$

この式は応力関数の導出に重要な役割をする。式 (6) はちょうど左辺 σ_{ij} が電荷分布、右辺 χ_{ij} がポテンシャルになるような Poisson 方程式になっている。Poisson 方程式の性質はよく知られているので、式 (6) を解くことは比較的容易である。まとめると、本論文で扱う Beltrami の応力関数 ψ_{ij} と χ_{ij} の関係は

$$\psi_{ij} = \chi_{ij} - \delta_{ij}\chi_{kk} \quad \chi_{ik,k} = 0 \tag{7}$$

となる。

3. 異方性弾性体中の転位ループの応力場に対応する応力関数

まず始めに、応力関数の導出に必要な異方性弾性論と Green 関数について簡単にまとめて述べることにする [30, 31]。異方性弾性体中の転位ループ C' が作る応力場の成分は転位線に沿った線積分の形式で書くことができる [33]。

$$\sigma_{ij}(\mathbf{x}) = C_{ijkl}\oint_{C'} \epsilon_{lnh}C_{pqmn}G_{kp,q}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')b'_m dx'_h \tag{8}$$

ここで、積分は転位線 x'_h に沿って行うものとし、G_{kp} は異方性弾性体に対する Green 関数、C_{ijkl} は弾性定数、b'_m は転位ループ C' の Burgers ベクトルである。式 (8) の Green

関数の 1 回微分 $G_{kp,q}$ の具体的な形式 [30)] は大変に複雑であることが知られている。

異方性弾性体に対する Green 関数は次の式を満たす。

$$C_{ijkl}G_{km,lj}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')+\delta_{im}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')=0 \qquad (9)$$

ここで $\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')$ は Dirac のデルタ関数である。次のような三次元行列を定義する。

$$\mathbf{K}(\boldsymbol{\xi})=\begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} & K_{13} \\ K_{21} & K_{22} & K_{23} \\ K_{31} & K_{32} & K_{33} \end{pmatrix} \qquad (10)$$

ここで

$$K_{ik}=C_{ijkl}\xi_j\xi_l, \qquad (11)$$

である。行列 (10) は対称行列である。ここで $N_{ij}(\boldsymbol{\xi})$ をその余因子、$D(\boldsymbol{\xi})$ を行列式とする。行列 (10) は正定値行列、すなわち任意の $\boldsymbol{\xi}$ に対して常に $D(\boldsymbol{\xi})>0$ である [34)]。この条件は変形のない弾性体は任意の変形に対して弾性エネルギーが必ず上昇することを保障している。弾性体の Green 関数は次のような三次元フーリエ積分で表現される。

$$G_{ij}(\mathbf{x})=\frac{1}{(2\pi)^3}\int_{\Omega}N_{ij}(\boldsymbol{\xi})D^{-1}(\boldsymbol{\xi})e^{i\boldsymbol{\xi}\cdot\mathbf{x}}d\boldsymbol{\xi}. \qquad (12)$$

さらに、この三次元積分は二次元または一次元の積分に書き直すことができ、実際の計算はこちらでする。

$$\begin{aligned} G_{ij}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{8\pi^2}\int_{S^2}\delta(\mathbf{x}\cdot\bar{\boldsymbol{\xi}})N_{ij}(\bar{\boldsymbol{\xi}})D^{-1}(\bar{\boldsymbol{\xi}})dS(\bar{\boldsymbol{\xi}}) \\ &= \frac{1}{8\pi^2|\mathbf{x}|}\oint_{S^1}N_{ij}(\bar{\boldsymbol{\xi}})D^{-1}(\bar{\boldsymbol{\xi}})d\phi \end{aligned} \qquad (13)$$

ここで、$|\bar{\boldsymbol{\xi}}|=1$ でありフーリエ空間での長さ 1 のベクトル、S^2 はフーリエ空間の単位球表面、S^1 は Fig. 1 のように $\mathbf{x}$ に垂直な平面上にある単位円である。

本論文で重要な関数 H_{ij} を S^2 上の積分形で定義する。

$$H_{ij}(\mathbf{x})=\frac{1}{16\pi^2}\int_{S^2}|\mathbf{x}\cdot\bar{\boldsymbol{\xi}}|N_{ij}(\bar{\boldsymbol{\xi}})D^{-1}(\bar{\boldsymbol{\xi}})dS(\bar{\boldsymbol{\xi}}). \qquad (14)$$

この関数は次の関係を満たすことが証明できる。

$$G_{ij}=H_{ij,kk}. \qquad (15)$$

式 (15) の関係は式 (14) を 2 回微分することで簡易に証明できる。つまり、$\nabla^2|\mathbf{x}\cdot\bar{\boldsymbol{\xi}}|=2\delta(\mathbf{x}\cdot\bar{\boldsymbol{\xi}})$ である。ここで $\bar{\xi}_1^2+\bar{\xi}_2^2+\bar{\xi}_3^2=1$ であることを使った。ただ、この問題に対しては厳密な証明 [35)] もなされている。

式 (6)、(8)、(15)、より応力関数 χ_{ij} が計算できる。

$$\chi_{ij}(\mathbf{x})=C_{ijkl}\oint_{C'}\epsilon_{lnh}C_{pqmn}H_{kp,q}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')b'_m dx'_h \qquad (16)$$

ここで式 (16) は単に式 (8) の G_{kp} を H_{kp} に置き換えただけであることに気がつくだろう。さらに、χ_{ij} は式 (7) で仮定したゲージ関係 $\chi_{ik,k}=0$ も満足することは付録で証明する。

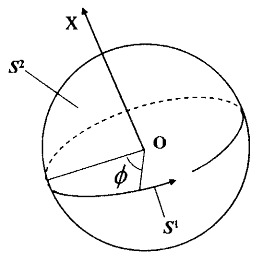

Fig. 1 The unit sphere S^2 in the ξ-space. The circular path of line integral S^1 lies on the plane perpendicular to $\mathbf{x}$.

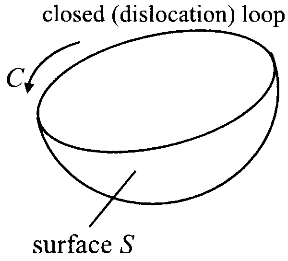

Fig. 2 Closed (dislocation) loop C bounding a surface S.

4. 転位ループ間の相互作用エネルギー

Beltrami の応力関数の応用として 2 つの転位ループ間の相互作用エネルギー計算がある。線型弾性論によると転位ループと外場 σ_{ij} との相互作用エネルギーは、その転位ループが外場の中で生成されるまでに必要な仕事に等しい。従って、相互作用エネルギーは [4)]

$$E_I=b_i\int_S\sigma_{ij}dS_j \qquad (17)$$

である。ここで、b_i は転位ループ C の Burgers ベクトル。面積分は Fig. 2 で示すように転位ループ C が縁になるような任意の曲面 S の上で行う。もしも σ_{ij} が他の転位ループによって作られた応力場ならば式 (17) は 2 本の転位ループ間の相互作用エネルギーになる。

式 (1) を式 (17) に代入して Stokes の定理を使うと相互

作用エネルギーは

$$E_I = -b_i \oint_C \epsilon_{ikl}\psi_{ln,k} dx_n \tag{18}$$

となる。すなわち、S 上の面積分が C に沿った線積分に変換される。次に、式 (7) を式 (18) に代入する。

$$E_I = -b_i \oint_C \epsilon_{ikl}(\chi_{ln,k} - \delta_{ln}\chi_{uu,k}) dx_n \tag{19}$$

さらに、この式 (19) はもっと簡単な形式に書き換えることができる。

$$\begin{aligned} E_I &= -b_i \oint_C \epsilon_{ikl}\epsilon_{lvt}\epsilon_{unt}\chi_{uv,k} dx_n \\ &= -b_i \oint_C (\delta_{iv}\delta_{kt} - \delta_{it}\delta_{kv})\epsilon_{unt}\chi_{uv,k} dx_n \\ &= -b_i \oint (\epsilon_{unk}\chi_{ui,k} - \epsilon_{uni}\chi_{uk,k}) dx_n \end{aligned} \tag{20}$$

ここで $\epsilon_{lvt}\epsilon_{unt} = \delta_{lu}\delta_{vn} - \delta_{ln}\delta_{vu}$ の関係を使った。式 (7) のゲージ関係より式 (20) の第 2 項は消える。要するに、転位ループ間の相互作用エネルギーは応力関数 χ_{ij} によって次のように書くことができる。

$$E_I = -b_i \oint_C \epsilon_{jts}\chi_{ij,s} dx_t \tag{21}$$

式 (16) を式 (21) に代入すると

$$E_I = -b_i b'_m \oint_C \oint_{C'} \epsilon_{jts}\epsilon_{lnh} C_{ijkl} C_{pqmn} H_{kp,qs}(\mathbf{x}-\mathbf{x}') dx_t dx'_h \tag{22}$$

式 (4) より、

$$\begin{aligned} E_I = b_i b'_m \Bigg\{ & C_{ihks}C_{pqmt} \oint_C \oint_{C'} H_{kp,qs}(\mathbf{x}-\mathbf{x}') dx_t dx'_h \\ & - C_{ijks}C_{pqmj} \oint_C \oint_{C'} H_{kp,qs}(\mathbf{x}-\mathbf{x}') dx_h dx'_h \\ & + C_{ijmj} \oint_C \oint_{C'} \frac{1}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} dx_h dx'_h \\ & - C_{ihmt} \oint_C \oint_{C'} \frac{1}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|} dx_t dx'_h \Bigg\} \end{aligned} \tag{23}$$

ここで

$$C_{ijkl} H_{km,lj}(\mathbf{x}-\mathbf{x}') = \frac{\mathbf{1}}{\mathbf{4}\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}\delta_{im} \tag{24}$$

と

$$H_{kp,qs}(\mathbf{x}) = \frac{1}{8\pi^2|\mathbf{x}|} \oint_{S^1} \bar{\xi}_q \bar{\xi}_s N_{kp}(\bar{\boldsymbol{\xi}}) D^{-1}(\bar{\boldsymbol{\xi}}) d\phi \tag{25}$$

を使う。結局、式 (23) のように転位ループ間の相互作用エネルギーの計算は転位線 C と C' に沿った線積分と式 (25) で見られる S^1 上の周回積分で構成される。

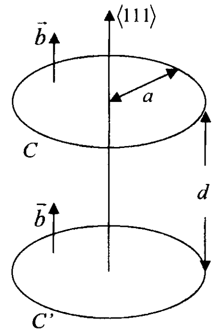

Fig. 3 Two coaxial circular dislocation loops, C and C', located on $\{111\}$ plane. Burgers vectors of the two dislocation loops $\vec{b}$ are assumed to be parallel to the $\langle 111 \rangle$ direction.

5. 相互作用エネルギーの数値計算

最後に、転位ループ間の相互作用エネルギーを式 (23) に基づいて数値計算してみる。例として、Fig. 3 のような同軸状の 2 つの円形転位ループを考えてみよう。2 つのループの半径は同じ a で、$\{111\}$ 面に乗っているものとする。転位ループ間の距離は d、同じ大きさの $< 111 >$ 軸に平行な Burgers ベクトルを持つものとする。このような配置の場合、等方性弾性体中の転位であれば相互作用エネルギーは解析的に書くことができる [36)]。

$$E_I = \frac{\mu b^2 ak}{1-\nu}\{K(k) - E(k)\} \tag{26}$$

ここで $k^2 = 4a^2/(d^2+4a^2)$、また K と E はそれぞれ第 1 種と第 2 種の完全楕円積分である。定数 μ と ν はそれぞれ剪断弾性率と Poisson 比である。Table 2 には相互作用エネルギーの距離 d への依存性を書いた。そして、式 (23) による数値計算と式 (26) の解析解を比較した。ここで $a = 1.0b$、$\nu = 0.25$ とした。その結果両者はほぼ一致し、少しの違いは数値誤差の範囲であることがわかった。

さらに、異方性弾性体中の転位ループの相互作用エネルギーを計算した。ここでは $a = 1.0b$、$d = 4.0b$、$C_{12}/C_{11} = 0.6$ とし、Table 3 のように異方性因子 A を 1.0 から 5.0 まで変化させた。

6. 議論

応力関数の応用として、2 つの転位ループ間の相互作用エネルギーを式 (23) のように導出した。式 (14) の $H_{ij}(\mathbf{x})$ の 2 回微分は式 (25) で示すように S^1 に沿った周回積分になる。結局、転位ループ間の相互作用エネルギー計算では転位ループ C と C' に沿った線積分と S^1 上の周回積分

Table 2　Interaction energy (μb^2) between two circular dislocation loops in isotropic media with changing d, where $a = 1.0b$ and $\nu = 0.25$.

d	Equation (23)	Equation (26)
$1.0b$	1.28642	1.28644
$2.0b$	0.47462	0.47463
$3.0b$	0.20449	0.20450
$4.0b$	0.10171	0.10171

Table 3　Interaction energy ($C_{44}b^2$) between two circular dislocation loops in anisotropic media, with changing the anisotropic ratio A for the case of $a = 1.0b$, $d = 4.0b$, and $C_{12}/C_{11} = 0.6$.

A	Equation (23)	Equation (26)
1.0	0.12206	0.12206
2.0	0.14688	—
3.0	0.15113	—
4.0	0.14967	—
5.0	0.14626	—

で、合計三次元の線積分を実行することになる。Fig. 3 で示すように、同軸状の円形転位ループを例に相互作用エネルギーを計算した。等方性弾性論に対する解析解 (26) と比較することで式 (23) による数値計算の精度を検証した。数値計算では単に台形公式を使っているだけであるが、Table 2 で示すように数値誤差程度の違いがあるだけで両者はよく一致した。

本論文で紹介した応力関数の特徴はその積分形が収束するように書かれていることである。つまり行列 (10) が正定値であるために、式 (14) の $H_{ij}(\mathbf{x})$ の計算など、数値計算の途中でゼロで割ることによる発散は起こらない。このことは数値計算にとっては大変に有利である。

本論文で紹介した計算式は閉じた転位ループに対して正しいのであって、開いた転位、真っ直ぐな転位線などに応用してはならないことがわかった。いわゆる転位の終端効果については慎重に考慮すべきである。

さて、最後になったが定量的な転位の研究には弾性的異方性の影響は必ず考慮されなければならないと思う。今までは等方性弾性論の範囲内で済ませていた議論が随分多くあったように思う。異方性弾性論が敬遠されがちなのは、その形式が複雑そうに見えるからだと思う。しかしながら、計算機が進歩したことなどの理由で異方性弾性体に対する Green 関数も短時間で計算できるようになってきている。このような状況から今後は著者は弾性的異方性を考慮した転位論を展開してゆきたいと考えている。本論文でも紹介したが、任意の形状の転位ループに関連した様々な計算コードは作成されつつある。

謝辞

この研究は日本学術振興会の科学研究補助金 (No. 20560616) の援助を受けている。

参考文献

1) L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Theory of Elasticity*, Pergamon Press, London, (1959) p. 53.

2) G. A. Papadopoulos, *Fracure Mechanics*, Springer-Verlag, London (1993) p.15.

3) C. Teodosiu, *Elastic Models of Crystal Defects*, Springer-Verlag, Berlin (1982) p. 82.

4) R. deWit, *Solid State Physics* 10, Academic Press, New York (1960) p.249.

5) F. R. N. Nabarro, *Theory of Crystal Dislocations*, Clarendon Press, Oxford (1967).

6) T. Suzuki, Y. Kamimura and H. O. K. Kirchner, Phil. Mag. A **79** (1999) p. 1629.

7) K. Ohsawa, H. Koizumi, H. O. K. Kirchner and T. Suzuki, Phil. Mag. A **69** (1994) p. 171.

8) T. Diaz de la Rubia and M. W. Guinan, Phys. Rev. Lett. **66** (1991) p.2766.

9) M. Kiritani, J. Nucl. Mater. **251** (1997) p.237.

10) K. Arakawa, M. Hatanaka, H. Mori and K. Ono, J. Nucl. Mater. **329-333** (2004) p.1194.

11) K. Arakawa, K. Ono, M. Isshiki, K. Mimura, M. Uchikoshi and H. Mori, Science **318** (2007) p.956.

12) Y. Matsukawa and S. J. Zinkle, Science **318** (2007) p.959.

13) S. I. Golubov, B. N. Singh and H. Trinkaus, J. Nucl. Mater. **276** (2000) p.78.

14) H. Trinkaus, B. N. Singh and S. I. Golubov, J. Nucl. Mater. **283-287** (2000) p.89.

15) Y. N. Osetsky, D. J. Bacon, A Serra, B. N. Singh and S. I. Golubov, Plil. Mag. **83** (2003) p.61.

16) V. Bulatov, F. F. Abraham, L. Kubin, B. Devincre and S. Yip, Nature **391** (1998) p.669.

17) C. Woodward and S. I. Rao, Phys. Rev. Lett. **88** (2002) p.216402.

18) J. Lothe, Phil. Mag. **15** (1967) p.353.

19) A. Seeger, Phil. Mag. **1** (1956) p.651.

20) V. Celli, M. Kabler, T. Ninomiya and R. Thomson, Phys. Rev. **131** (1963) p.58.

21) K. Ohsawa and E. Kuramoto, Phys. Rev. B **72** (2005) p.054105.
22) N. M. Ghoniem and L. Z. Sun, Phys. Rev. B **60** (1999) p. 128.
23) *Smithells Metals Reference Books* 7th edition, edited by E. A. Brandes and G. B. Brook, Butterworth-Heinemann Ltd., Oxford (1992) 15-5.
24) J. P. Hirth and J. Lothe, *Theory of Dislocations*, McGraw-Hill, New York (1968) p. 59.
25) Y. T. Chou, Acta Metal. **13** (1965) p.251.
26) A. H. Cottrell and B. A. Bilby, Proc. Phys. Soc. **A62** (1949) p.49.
27) J. Wilde, A. Cerezo and G. D. W. Smith, Scripta Mater. **43** (2000) p.39.
28) E. Kröner, Z. Phys. **136** (1953) p.402.
29) P. H. Dederichs and G. Leibfride, Phys. Rev. **188** (1969) p.1175.
30) D. M. Barnett, phys. stat. sol. (b) **49** (1972) p.741.
31) T. Mura, *Micromechanics of defects in solids*, Martinus Nijhoff Publishers, Hague (1982) p. 18.
32) S. I. Golubov, X. Liu, H. Huang and C. H. Woo, Comp. Phys. Comm. **137** (2001) p.312.
33) [31] p. 40.
34) J. W. Steeds, *Introduction to Anisotropic Elasticity Theory of Dislocations*, Clarendon, Oxford (1973) p. 10.
35) T. Mura and N. Kinoshita, phys. stat. sol. (b) **47** (1971) p.607.
36) [24] p. 113.

付 録

式 (16) で表される応力関数 χ_{ij} がゲージ関係を満足していることを証明する。Stokes の定理より式 (16) は S' 上の面積分に変換される。

$$\begin{aligned}
&\chi_{ij}(\mathbf{x}) \\
=\ & C_{ijkl}\int\int_{S'}\epsilon_{tuh}\epsilon_{lnh}C_{pqmn}H_{kp,qu}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')b'_m dS'_t \\
=\ & C_{ijkl}\int\int_{S'}(\delta_{tl}\delta_{un}-\delta_{tn}\delta_{ul})C_{pqmn}H_{kp,qu}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')b'_m dS'_t \\
=\ & C_{ijkl}C_{pqmn}\int\int_{S'}\left\{H_{kp,qn}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')b'_m dS'_l\right. \\
& \left.-H_{kp,ql}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')b'_m dS'_n\right\}
\end{aligned} \tag{A1}$$

だから、

$$\begin{aligned}
&\chi_{ij,j}(\mathbf{x}) \\
=\ & C_{ijkl}C_{pqmn}\int\int_{S'}\left\{H_{kp,qnj}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')b'_m dS'_l\right. \\
& \left.-H_{kp,qlj}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')b'_m dS'_n\right\} \\
=\ & \frac{C_{ijkl}}{4\pi}\int\int_{S'}\delta_{mk}\frac{\partial}{\partial x_j}\frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}b'_m dS'_l \\
& -\frac{C_{pqmn}}{4\pi}\int\int_{S'}\delta_{ip}\frac{\partial}{\partial x_q}\frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}b'_m dS'_n \\
=\ & 0
\end{aligned} \tag{A2}$$

ここで次の関係を使った。

$$C_{ijkl}H_{km,lj}(\mathbf{x}-\mathbf{x}') = \frac{1}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}\delta_{im} \tag{A3}$$