

線状欠陥と微分幾何

東京工業大学 北原和夫 (Kazuo Kitahara)

内部に欠陥があったり、外部から応力がかかると、弾性媒質は変形する。弾性体論では、変形前における点 $\mathbf{r}$ が変形によって $\mathbf{r} + \mathbf{u}(\mathbf{r})$ に移動すると考える。もし、 $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ が一定ならば、単に全体が平行移動したに過ぎない。しかし、 $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ が変化すると、変形したことになる。変形が弾性変形である限り、理想媒質と変形媒質の間には一対一対応がある。塑性変形を伴う場合はそれが破れる。

弾性塑性変形を含む一般の変形を記述する連続体の動的理論は完成していないが、変形の構造については微分幾何で表現できる。¹しかし、運動を記述する理論は完成していない。

塑性変形を含む場合、初めに、理想的な媒質を考えてその中の点を変位させて変形を記述するということができなくなる。

よって「初めに変形体ありき」とする。変形しているからそこでの結晶軸は歪んでいる。この歪んだ軸を $\mathbf{e}_\alpha(\mathbf{r})$ ($\alpha = 1, 2, 3$) とする。この軸は場所の関数である。一方、実験室に固定されている直交座標軸 $\mathbf{u}_i$ ($i = x, y, z$) との間の変換を

$$\mathbf{u}_i = \sum_{\alpha=1}^3 W_{i\alpha}(\mathbf{r}) \mathbf{e}_\alpha(\mathbf{r})$$

で表す。 W は正則であるので、

$$W_{i\alpha}(\mathbf{r}) = \sum_k S_{ik} R_{k\alpha}$$

と表す。 S_{ik} は対称行列で、 $R_{i\alpha}$ は直交行列である。

$$S_{ik} = S_{ki}, \quad \sum_\alpha R_{i\alpha} R_{k\alpha} = \delta_{ik}, \quad \sum_k R_{k\alpha} R_{k\beta} = \delta_{\alpha\beta}$$

対称行列 S_{ik} は局所座標軸の歪を表し、直交行列 $R_{i\alpha}$ は局所座標軸の回転を表す。直交行列の微小変化は

$$dR_{i\alpha} = \sum_j \sum_k dx_j K_{jik}(\mathbf{r}) R_{k\alpha}$$

に従うものとする。これより、「接続」が定義される。

$$\Gamma_{jk}^i \equiv \sum_m \left[\frac{\partial S_{km}}{\partial x_j} (S^{-1})_{mi} + \sum_l S_{kl} K_{jlm} (S^{-1})_{mi} \right]$$

¹以下の文献を参照、E. Kröner, *Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen* (Springer, Berlin, 1958); S. Amari, *RAAG Memoirs* **3** (1962) 163; K. Kondo, *RAAG Memoirs* **3** (1962) 173; R. W. Lardner, *Mathematical Theory of Dislocations and Fracture* (University of Toronto Press, Toronto, 1970); R. Balian, M. Kléman and J.-P. Poirier (Eds.), *Les Houches Session XXXV Physique des Défauts* (North Holland, Amsterdam, 1981); B. A. Bilby, *Progress in Solid Mechanics*, vol. 1 (Eds. I. N. Sneddon and R. Hill, North Holland, Amsterdam, 1960), p.329; I. E. Dzyaloshinskii and G. E. Volovick, *Ann. Phys.* **125** (1980) 67.

いま、変形媒質中での変位を dr とすると、実験室系と局所座標軸とで表すことができる。

$$dr = \sum_i dx_i u_i = \sum_\alpha d\xi_\alpha e_\alpha$$

これより

$$d\xi_\alpha = \sum_i dx_i W_{i\alpha}$$

いま、局所座標軸に沿って観測者が動くとき、観測者は直線上を動いたと認識するものとしよう。つまり、歪んだ結晶軸に沿っての線を直線とみなすのである。これは、局所座標軸で見ると

$$d^2 \xi_\alpha = 0 \quad [\text{測地線}]$$

と表せる。これを、実験室系で表すと、

$$d^2 x_i + \sum_j \sum_k \Gamma_{jk}^i dx_j dx_k = 0$$

となる。

あるベクトルを位置 $\mathbf{r}$ から近接する位置 $\mathbf{r}$ に移したときの変化を考える。 $\mathbf{r}$ において、それぞれの座標系で表すと、

$$\mathbf{A} = \sum_i A_i u_i = \sum_\alpha a_\alpha e_\alpha$$

$\mathbf{r} + d\mathbf{r}$ においては、

$$\mathbf{A} + d\mathbf{A} = \sum_i (A_i + dA_i) u_i = \sum_\alpha (a_\alpha + \delta a_\alpha) (e_\alpha + de_\alpha)$$

よって

$$d\mathbf{A} = \sum_i dA_i u_i = \sum_\alpha (a_\alpha de_\alpha + \delta a_\alpha e_\alpha)$$

これより、

$$\delta a_\alpha = \sum_i dA_i W_{i\alpha} + \sum_k \sum_i \sum_m A_k dx_m \Gamma_{mk}^i W_{i\alpha}$$

となる。

$$\delta A_i \equiv \sum_\alpha \delta a_\alpha (W^{-1})_{\alpha i} = dA_i + \sum_k \sum_j A_k dx_j \Gamma_{jk}^i$$

をベクトル $\mathbf{A}$ の共変微分と呼ぶ。局所座標軸から見て変化しないベクトル ($\delta a_\alpha = 0$) は $\delta A_i = 0$ というベクトルである。だから、測地線というのは、 $\delta(dx_i) = 0$ ということである。

媒質内の観測者は、歪んだ軸で距離を認識するから、変位 $d\mathbf{r}$ に対して

$$(ds)^2 = \sum_\alpha (d\xi_\alpha)^2$$

が距離となる。よって

$$(ds)^2 = \sum_\alpha \sum_i \sum_j W_{i\alpha} W_{j\alpha} dx_i dx_j = \sum_i \sum_j g_{ij} dx_i dx_j$$

ここで

$$g_{ij} = \sum_{\alpha} \sum_k \sum_l S_{ik} S_{jl} R_{k\alpha} R_{l\alpha} = \sum_k \sum_l S_{ik} S_{jl} \delta_{kl} = \sum_k S_{ik} S_{jk}$$

である。 g_{ij} は距離を定義するテンソルである。「計量テンソル」と呼ばれる。

[例] らせん転位

z 軸方向の直線状のらせん転位の場合、

$$\begin{cases} W_{x1} = W_{y2} = W_{z3} = 1 \\ W_{x3} = \frac{b}{2\pi} \frac{-y}{x^2 + y^2}, & W_{y3} = \frac{b}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2} \\ W_{i\alpha} = 0 & (\text{他の成分}) \end{cases}$$

このときは、

$$\Gamma_{jk}^i = \sum_{\alpha} \left(\frac{\partial W_{k\alpha}}{\partial x_j} \right) (W^{-1})_{\alpha i}$$

となり、 $\Gamma_{xx}^z, \Gamma_{xy}^z, \Gamma_{yx}^z, \Gamma_{yy}^z$ 以外は0となる。

$$\oint d\xi_{\alpha} = \oint dx_j W_{j\alpha} = b_{\alpha}$$

を Burgers ベクトルと呼ぶ。上のらせん転位の場合、

$$\oint d\xi_3 = \frac{b}{2\pi} \oint \left(\frac{-y}{x^2 + y^2} dx + \frac{x}{x^2 + y^2} dy \right) = b$$

となる。

[例] 回位

z 軸に沿って回位があるとき、

$$S_{ij} = \delta_{ij}$$

を仮定する。つまり、局所的には直交軸になっているとする。このとき、

$$\begin{cases} K_{xxy} = -K_{xyx} = \left(\frac{\phi}{2\pi} \right) \frac{-y}{x^2 + y^2} \\ K_{yyx} = -K_{xyy} = \left(\frac{\phi}{2\pi} \right) \frac{x}{x^2 + y^2} \\ K_{ijk} = 0 \quad (\text{他の成分}) \end{cases}$$

これより、直交行列 R_{ij} が得られる。極座標 ($x = r \cos \theta$ 、 $y = r \sin \theta$) で表すと、

$$R_{i\alpha}(r, \theta) = \begin{bmatrix} \cos(\phi\theta/2\pi) & \sin(\phi\theta/2\pi) \\ -\sin(\phi\theta/2\pi) & \cos(\phi\theta/2\pi) \end{bmatrix}$$

ϕ は、局所軸の方向が、回位を一周したときにどれだけ向きを変えるかを表す。

■ 歪んだ結晶中の拡散²

粒子が歪んだ結晶中を拡散するものとする。ただし、ある格子点から隣の格子点に行くのに、格子が歪んでいても、歪んだ格子上で等方的にジャンプするものとしよう。粒子の変位を

$$d\mathbf{x} = dx_i \mathbf{u}_i = d\xi_\alpha \mathbf{e}_\alpha$$

と表すと、局所結晶軸に関して等方的であるということは、

$$\frac{d\xi_\alpha}{dt} = R_\alpha(t)$$

が等方的ブラウン運動である、ということである。つまり、

$$\begin{cases} \langle R_\alpha(t) \rangle = 0 \\ \langle R_\alpha(t) R_\beta(t') \rangle = 2D\delta_{\alpha\beta}\delta(t-t') \end{cases}$$

これを実験室系の座標で表すと、

$$\frac{dx_j}{dt} W_{j\alpha} = R_\alpha(t)$$

すなわち、

$$\frac{dx_j}{dt} = R_\alpha(t) (W^{-1})_{\alpha j}$$

一方、

$$d(W^{-1})_{\alpha j} = -(W^{-1})_{\alpha k} dx_m \Gamma_{mk}^j(\mathbf{r})$$

よって

$$\begin{cases} \dot{x}_j(t) = R_\alpha(t) (W^{-1}(t))_{\alpha j} \\ \frac{d}{dt} (W^{-1}(t))_{\alpha j} = -(W^{-1}(t))_{\alpha k} \dot{x}_m(t) \Gamma_{mk}^j(\mathbf{r}(t)) \end{cases}$$

Fokker-Planck 方程式を導くために、

$$x_j(t + \Delta t) = x_j(t) + \int_t^{t+\Delta t} dt_1 R_\alpha(t_1) (W^{-1}(t_1))_{\alpha j}$$

²N. Ikeda and S. Watanabe, *Stochastic Differential Equations and Diffusion Processes* (North Holland, Kodansha, 1981).

および、

$$\begin{aligned} (W^{-1}(t_1))_{\alpha j} &= (W^{-1}(t))_{\alpha j} - \int_t^{t_1} dt_2 (W^{-1}(t_2))_{\alpha k} \dot{x}_m(t_2) \Gamma_{mk}^j(\mathbf{r}(t_2)) \\ &\simeq (W^{-1}(t))_{\alpha j} - (W^{-1}(t))_{\alpha k} \int_t^{t_1} dt_2 R_\beta(t_2) (W^{-1}(t))_{\beta m} \Gamma_{mk}^j(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

を用いると、

$$\begin{aligned} x_j(t + \Delta t) - x_j &\simeq \int_t^{t+\Delta t} dt_1 R_\alpha(t_1) (W^{-1}(t))_{\alpha j} \\ &\quad - \int_t^{t+\Delta t} dt_1 \int_t^{t_1} dt_2 R_\alpha(t_1) R_\beta(t_2) (W^{-1}(t))_{\alpha k} (W^{-1}(t))_{\beta m} \\ &\quad \times \Gamma_{mk}^j(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

よってマルコフ過程の一般論から、確率分布関数 $P(\mathbf{r}, t)$ の従うべき方程式を

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\partial}{\partial x_j} C_j(\mathbf{r}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} D_{ij}(\mathbf{r}) + \cdots \right] P(\mathbf{r}, t)$$

と表すと、

$$\begin{aligned} C_j(\mathbf{r}) &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle x_j(t + \Delta t) - x_j \rangle_{\mathbf{r}(t)=\mathbf{r}} \\ &= -\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt_1 \int_t^{t_1} dt_2 \langle R_\alpha(t_1) R_\beta(t_2) \rangle (W^{-1}(t))_{\alpha k} (W^{-1}(t))_{\beta m} \\ &\quad \times \Gamma_{mk}^j(\mathbf{r}) \\ &= -D (W^{-1}(t))_{\alpha k} (W^{-1}(t))_{\beta m} \Gamma_{mk}^j(\mathbf{r}) \\ &= -D S_{ik}^{-1}(\mathbf{r}) S_{im}^{-1}(\mathbf{r}) \Gamma_{mk}^j(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

となる。さらに、

$$g^{km}(\mathbf{r}) \equiv S_{ik}^{-1}(\mathbf{r}) S_{im}^{-1}(\mathbf{r})$$

とおくと、

$$C_j(\mathbf{r}) = -D g^{km}(\mathbf{r}) \Gamma_{mk}^j(\mathbf{r})$$

となる。同様にして

$$\begin{aligned} D_{ij}(\mathbf{r}) &\equiv \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \langle (x_i(t + \Delta t) - x_i) (x_j(t + \Delta t) - x_j) \rangle_{\mathbf{r}(t)=\mathbf{r}} \\ &= \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} dt_1 \int_t^{t+\Delta t} dt_2 \langle R_\alpha(t_1) R_\beta(t_2) \rangle (W^{-1}(t))_{\alpha i} (W^{-1}(t))_{\beta j} \\ &= 2D g^{ij}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

よって

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{r}, t) = D \left[\frac{\partial}{\partial x_j} g^{km}(\mathbf{r}) \Gamma_{mk}^j(\mathbf{r}) + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} g^{ij}(\mathbf{r}) \right] P(\mathbf{r}, t)$$

となる。

[例] 回位のある格子上の拡散

$$\left\{ \begin{array}{l} S_{ij} = \delta_{ij} \\ K_{xxy} = -K_{xyx} = \left(\frac{\phi}{2\pi} \right) \frac{-y}{x^2 + y^2} \\ K_{yyx} = -K_{xyx} = \left(\frac{\phi}{2\pi} \right) \frac{x}{x^2 + y^2} \\ K_{ijk} = 0 \quad (\text{他の成分}) \end{array} \right.$$

これより、

$$\left\{ \begin{array}{l} g^{ij} = \delta_{ij} \\ \Gamma_{jk}^n = K_{jkn} \end{array} \right.$$

従って Fokker-Planck 方程式は

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{r}, t) = D \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\phi}{2\pi} \right) \frac{-x}{x^2 + y^2} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\phi}{2\pi} \right) \frac{-y}{x^2 + y^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] P(\mathbf{r}, t)$$

ポテンシャル

$$U(\mathbf{r}) = - \left(\frac{\phi}{2\pi} \right) \log \sqrt{x^2 + y^2}$$

を導入すると、

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\mathbf{r}, t) = D \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \cdot \left(\frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \right) P(\mathbf{r}, t)$$

となる。回位空間での拡散はあたかもポテンシャル場の中の拡散のようになる。 $\phi > 0$ が負曲率に対応するが、このとき、 U は反発型のポテンシャルとなる。変位の自乗平均は

$$\frac{d}{dt} \langle x^2 + y^2 \rangle = 4D \left(1 + \frac{\phi}{4\pi} \right)$$

$\phi = -2\pi$ のとき、一次元的拡散となる。

■ 量子波動³

³K. Kawamura, *Z. Physik* **B29** (1978) 101; K. Kawamura, *Topological Disorder in Condensed Matter* (Eds. F. Yonezawa and T. Ninomiya, Springer, 1983), p. 142; R. Brown, *Aust. J. Phys.* **36** (1983) 321.

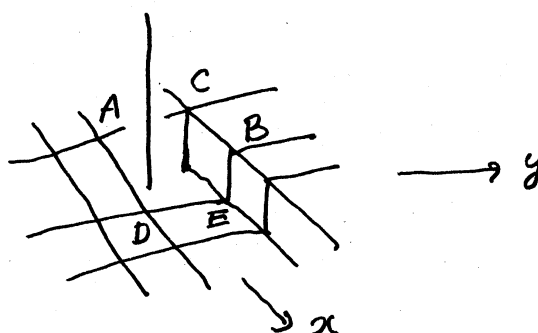
幾何学的欠陥を含む媒質中を伝播する素励起を考える。運動を記述するハミルトニアンが

$$H = \sum_{\langle n, m \rangle} T_{nm} a_n^\dagger a_m$$

で与えられている。和は最近接格子点対に関してとる。格子が完全に規則的ならば、 T_{nm} も定数と見ることができ、定常状態はブロッホ状態となる。

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}} |\mathbf{n}\rangle$$

不規則格子の場合、 T_{nm} は一定でなく、結合の長さ、角度などによって変化する。いま、幾何学的欠陥の効果を見るために、近接格子点間の転送行列要素が一定であるとしよう。



らせん転位を考える。素源波が $A \rightarrow D \rightarrow E \rightarrow B$ と伝わる時、 A に対する B の相対位置は $(+1, +1, +1)$ と表される。 $A \rightarrow C \rightarrow B$ という経路を辿ると、 $(+1, +1, 0)$ となる。よって前者の素源波は後者に対して $e^{ik_z b}$ という位相を余計にもつ。これは、Aharonov-Bohm 効果⁴と類似性があり、実際

$$\frac{e\Phi}{c} = k_z b$$

という対応がある。

一般に z 軸を向いた螺旋転位が分布している場合を考察する。局所結晶軸では

$$\begin{cases} d\xi_1 = dx \\ d\xi_2 = dy \\ d\xi_3 = dxW_{x3}(x, y) + dyW_{y3}(x, y) + dz \end{cases}$$

媒質中に経路 $\mathbf{r}(\tau)$ $[0 \leq \tau \leq t]$ を考え、その端点を $\mathbf{r}(0) = \mathbf{r}_0$, $\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}$ とする。これに

⁴Y. Aharonov and D. Bohm, *Phys. Rev.* **115** (1959) 513.

対応して粒子が見る原子配列はベクトル ξ である。

$$\left\{ \begin{array}{l} \xi_1(t) - \xi_1(0) = x - x_0 \\ \xi_2(t) - \xi_2(0) = y - y_0 \\ \xi_3(t) - \xi_3(0) = z - z_0 \\ \quad + \int_0^t d\tau [\dot{x}(\tau)W_{x3}(x(\tau), y(\tau)) + \dot{y}(\tau)W_{y3}(x(\tau), y(\tau))] \end{array} \right.$$

ξ の空間で粒子は自由粒子のように振る舞うとする。基本解は

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}t|\mathbf{r}_0t_0) &= \int_{x(0)=x_0}^{x(t)=x} D(x) \int_{y(0)=y_0}^{y(t)=y} D(y) \\ &\quad \times \int_{z(0)=z_0}^{z(t)=z+\int_0^t d\tau [\dot{x}(\tau)W_{x3}(x(\tau), y(\tau)) + \dot{y}(\tau)W_{y3}(x(\tau), y(\tau))]} D(z) \\ &\quad \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \frac{m}{2} |\dot{\mathbf{r}}(\tau)|^2 \right] \end{aligned}$$

これは、 x, y 方向については歪がない場合と同じであるが、 z 方向については xy 平面を掃引するに依じて事実上 z 方向にずれてくることを表す。一本の螺旋転位の場合でいえば、螺旋転位の回りを回ればそれだけ、上下した結晶構造を見ていることになる。

ここで

$$Q = \int_0^t d\tau [\dot{x}(\tau)W_{x3}(x(\tau), y(\tau)) + \dot{y}(\tau)W_{y3}(x(\tau), y(\tau))]$$

とおくと、 z についての経路積分は、 z_0 から $z+Q$ にいたる自由粒子の経路について積分をする。よって

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}t|\mathbf{r}_0t_0) &= \int_{-\infty}^{\infty} dQ \int_{\mathbf{r}(0)=\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}(t)=\mathbf{r}+Q\mathbf{u}_z} D(\mathbf{r}) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \frac{m}{2} |\dot{\mathbf{r}}(\tau)|^2 \right] \\ &\quad \times \delta \left[Q - \int_0^t d\tau [\dot{x}(\tau)W_{x3}(x(\tau), y(\tau)) + \dot{y}(\tau)W_{y3}(x(\tau), y(\tau))] \right] \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \int_{-\infty}^{\infty} dQ \int_{\mathbf{r}(0)=\mathbf{r}_0}^{\mathbf{r}(t)=\mathbf{r}+Q\mathbf{u}_z} D(\mathbf{r}) \\ &\quad \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau L_\lambda(\dot{\mathbf{r}}(\tau), \mathbf{r}(\tau)) \right] \end{aligned}$$

ここで、

$$L_\lambda = \frac{m}{2} |\dot{\mathbf{r}}|^2 + \hbar\lambda(\dot{x}W_{x3} + \dot{y}W_{y3})$$

[例] 一本の螺旋転位の場合

この場合の経路積分の計算は Edwards⁵ によって与えられている。螺旋転位の回りを何回まわって最終点に到達するかを表す回転数 (Winding Number) で経路を分類した形になる⁶。

極座標を導入して

$$\begin{pmatrix} x = r \cos \theta \\ y = r \sin \theta, \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 = r_0 \cos \theta_0 \\ y_0 = r_0 \sin \theta_0, \end{pmatrix} \quad \phi = \theta - \theta_0$$

とおくと、

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}t|\mathbf{r}_0t_0) &= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\lambda(\phi+2n\pi)} \\ &\times \exp \left[\left(\frac{im}{2\hbar t}\right) \left\{ z - z_0 + \left(\frac{b}{2\pi}\right) (\phi + 2n\pi) \right\}^2 \right] \\ &\times I_{|\lambda|} \left(\frac{rr_0m}{i\hbar t} \right) \exp \left[\left(\frac{im}{2\hbar t}\right) (r^2 + r_0^2) \right] \end{aligned}$$

あるいは、 z 方向の運動について波数 k で表すと、

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}t|\mathbf{r}_00) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ik(z-z_0)} G_k(r\phi t|r_0) \\ G_k(r\phi t|r_0) &= \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right) \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{i\lambda(\phi+2n\pi) + ikb(\phi+2n\pi)/2\pi - \hbar k^2 t/2im} \\ &\times I_{|\lambda|} \left(\frac{rr_0m}{i\hbar t} \right) \exp \left[\left(\frac{im}{2\hbar t}\right) (r^2 + r_0^2) \right] \end{aligned}$$

[例] 転位が連続分布しているとき⁷

Q は経路に沿ってどれだけ z 方向にずれるかを表すものである。いま、同じところに戻ってくる経路を考えることにする。これは、エネルギー状態密度を計算するとき重要な量である。一般に、状態密度は

$$N(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G(E + i\delta)$$

⁵S. F. Edwards, *Proc. Roy. Soc.* **91** (1967) 513.

⁶L. S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integrals* (Wiley, New York, 1981).

⁷K. Kitahara, K. Nakazato and H. Araki, *Topological Disorder in Condensed Matter* (Springer Series in Solid State Sciences 46, Eds. F. Yonezawa and T. Ninomiya, Springer, Berlin, 1983) p. 153; 北原和夫, 数理科学 No. 231 (1982年9月号), p.22; K. Kitahara, K. Nakazato and H. Araki, *Proc. Int. Symp. Foundations of Quantum Mechanics* (Eds. S. Kamefuchi et al, Phys. Soc. Japan, 1984), p. 59; K. Kitahara, *Path Integrals from meV to MeV* (Eds. V. Sa-yakanit et al, World Scientific, 1989), p. 97.

ここで

$$G(E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt \int d^3\mathbf{r} G(\mathbf{r}t|\mathbf{r}) e^{iEt/\hbar}$$

であるから, $\mathbf{r}$ から出て $\mathbf{r}$ に到る経路を考えればよい。経路が囲む面の面積は

$$\begin{aligned} S &= \frac{1}{2} \int (x dy - y dx) \\ &= \frac{1}{2} \int_0^t d\tau [x(\tau) \dot{y}(\tau) - y(\tau) \dot{x}(\tau)] \end{aligned}$$

よって

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}t|\mathbf{r}) &= \int_{\mathbf{r}(0)=\mathbf{r}}^{\mathbf{r}(t)=\mathbf{r}+Q(S)\mathbf{u}_z} D(\mathbf{r}) \\ &\times \delta \left[S - \frac{1}{2} \int_0^t d\tau [x(\tau) \dot{y}(\tau) - y(\tau) \dot{x}(\tau)] \right] \\ &\times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \frac{m}{2} |\dot{\mathbf{r}}(\tau)|^2 \right] \end{aligned}$$

デルタ関数の積分表示を使うと、

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}t|\mathbf{r}) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty d\lambda \int_{-\infty}^\infty dS e^{i\lambda S} \\ &\times \int_{\mathbf{r}(0)=\mathbf{r}}^{\mathbf{r}(t)=\mathbf{r}+Q(S)\mathbf{u}_z} D(\mathbf{r}) \\ &\times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau L_\lambda(\dot{\mathbf{r}}(\tau), \mathbf{r}(\tau)) \right] \end{aligned}$$

ここで、

$$L_\lambda(\dot{\mathbf{r}}(\tau), \mathbf{r}(\tau)) = \frac{m}{2} |\dot{\mathbf{r}}|^2 - \frac{\lambda\hbar}{2} (x\dot{y} - y\dot{x})$$

は、大きさ $\lambda\hbar c/e$ の一様磁場中の荷電粒子の運動を記述する Lagrangian である。経路積分

$$\int_{\mathbf{r}(0)=\mathbf{r}}^{\mathbf{r}(t)=\mathbf{r}+Q(S)\mathbf{u}_z} D(\mathbf{r}) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau L_\lambda(\dot{\mathbf{r}}(\tau), \mathbf{r}(\tau)) \right]$$

は Hamiltonian

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_x - \frac{\lambda\hbar y}{2} \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(p_y + \frac{\lambda\hbar x}{2} \right)^2 + \frac{1}{2m} p_z^2$$

で表され、

$$\int_{\mathbf{r}(0)=\mathbf{r}}^{\mathbf{r}(t)=\mathbf{r}+Q(S)\mathbf{u}_z} D(\mathbf{r}) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau L_\lambda(\dot{\mathbf{r}}(\tau), \mathbf{r}(\tau)) \right]$$

$$= \left\langle \mathbf{r} + Q(S)\mathbf{u}_z \left| \exp \left(-\frac{iHt}{\hbar} \right) \right| \mathbf{r} \right\rangle$$

となる。変換

$$\bar{H} = e^{i\lambda xy/2} H e^{-i\lambda xy/2}$$

を行うと,

$$\bar{H} = \frac{1}{2m} [(p_x - \hbar\lambda y)^2 + p_y^2 + p_z^2]$$

というよく知られた Hamiltonian になり⁸, その固有値, 固有関数は知られている。

$$\bar{H}\Psi = E\Psi$$

に対して

$$\begin{cases} E = \frac{\hbar^2\lambda}{m} \left(n + \frac{1}{2}\right) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, & [n = 0, 1, \dots] \\ \Psi = e^{i(Kx + kz)} \chi_n(y) \end{cases}$$

ここで,

$$\chi_n(y) = \frac{1}{\pi^{1/4} a^{1/2} \sqrt{2^n n!}} \exp\left[-\frac{(y - y_0)^2}{2a^2}\right] H_n\left(\frac{y - y_0}{a}\right)$$

$$a^2 = \frac{1}{\lambda}, \quad y_0 = -\frac{K}{\lambda}$$

よって

$$\begin{aligned} & \left\langle \mathbf{r} + Q(S)\mathbf{u}_z \left| \exp\left(-\frac{iHt}{\hbar}\right) \right| \mathbf{r} \right\rangle \\ &= \left\langle \mathbf{r} + Q(S)\mathbf{u}_z \left| \exp\left(-\frac{i\bar{H}t}{\hbar}\right) \right| \mathbf{r} \right\rangle \\ &= \int dk \sum_{n=0}^{\infty} e^{-iQ(S)k} \\ &\quad \times \exp\left[-iQ(S)k - \frac{it}{\hbar} \left\{ \left(n + \frac{1}{2}\right) \frac{\hbar^2|\lambda|}{m} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right\}\right] \end{aligned}$$

ところが, 「磁場」の存在で K, k, n で指定される状態は縮退しており, その縮退度は $V|\lambda|dk/(2\pi)^2$ である。従って状態密度は

$$\begin{aligned} N(E) &= \frac{V}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \int_{-\infty}^{\infty} dS e^{i\lambda S - ikQ(S)} \\ &\quad \times \frac{|\lambda|}{(2\pi)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \delta\left[E - \frac{\hbar^2|\lambda|}{m} \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right] \end{aligned}$$

⁸L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics - Non-Relativistic Theory* - (Pergamon Press, New York, 1976), Sec. 112.

となるのである。

[一様分布のとき]

$Q(S) = \alpha S$ のとき、 $\alpha = 0$ の完全結晶ならば、 $N(E) \propto \sqrt{E}$ であるが、 α が有限のときは、 E の小さいところで、 $N(E) \propto E/\alpha$ となる。後者を示すには、 $Q(S) = \alpha S$ のとき、

$$N(E) \propto |\alpha| \int_0^\infty dk \, k \sum_{n=0}^\infty \delta \left[E - \frac{|\alpha| \hbar^2 k}{m} \left(n + \frac{1}{2} \right) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right]$$

となることに注意する。さらに k 積分をすると、

$$N(E) \propto |\alpha| \sum_{n=0}^\infty \frac{-(n + \frac{1}{2}) + \sqrt{(n + \frac{1}{2})^2 + g^2}}{\sqrt{(n + \frac{1}{2})^2 + g^2}}$$

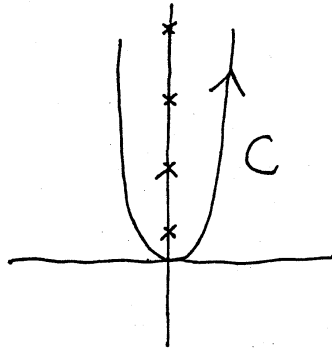
ここで

$$g^2 = \frac{2mE}{(\alpha \hbar)^2}$$

とおいた。この n の和は積分で置き換えられる。

$$\sum_n \rightarrow I = \frac{1}{2i} \int_C dz \tanh(\pi z) \frac{-(z/i) + \sqrt{(z/i)^2 + g^2}}{\sqrt{(z/i)^2 + g^2}}$$

ただし積分路 C は図のようになる。



最終的には、 I は以下のように評価される。

$$\begin{aligned} I &= g \tanh(\pi g) - \frac{\pi}{2} \int_1^\infty d\xi \left(\frac{g}{\cosh(\pi \xi g)} \right)^2 (\sqrt{\xi^2 - 1} - \xi) \\ &\quad - \frac{\pi}{2} \int_{-\infty}^{-1} d\xi \left(\frac{g}{\cosh(\pi \xi g)} \right)^2 (\sqrt{\xi^2 - 1} + \xi) \\ &\quad + \frac{\pi}{2} \int_{-1}^1 d\xi \left(\frac{g}{\cosh(\pi \xi g)} \right)^2 \sqrt{1 - \xi^2} \end{aligned}$$

よって $E \rightarrow 0$ で

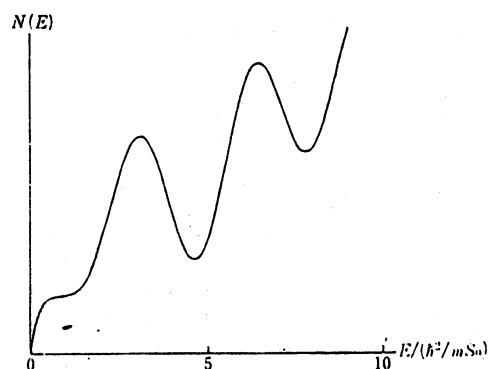
$$N(E) \propto |\alpha| g^2 \propto \frac{E}{|\alpha|}$$

となる。

[ランダム分布の模型]

$$Q(S) = \begin{cases} \alpha S & |S| \leq S_0 \\ 0 & |S| > S_0 \end{cases}$$

これは、 S_0 までは揃っているが、それより大きな面積をとると、反対向きの転位が入ってきて打ち消し合うということを表す。このとき、振動的振る舞いをする。振動の幅は、ほぼ $\Delta \sim \hbar^2/mS_0$ であり、転位が揃っている領域程度の波長のエネルギーに対応する。



$\alpha\sqrt{2S_0}=3.0$ の場合の状態密度

■ 転位の運動⁹

原子のポテンシャルエネルギーを $U(\{u\})$ と表す。転位の位置を X とするとき、ポテンシャルエネルギーの最低値を与える変位を $w_n(X)$ と表す。

$$\frac{\partial U}{\partial u_n}(\{w(X)\}) = 0$$

一般の変位 u_n を、転位の運動に追従する部分と独立に運動する部分とに分ける。

$$u_n = w_n(X) + q_n$$

束縛条件は

$$\Theta_1 \equiv \sum_{n=1}^N w'_n(X) q_n = 0$$

運動エネルギーは

$$T = \frac{m}{2} \sum_{n=1}^N \dot{u}_n^2 = \frac{m}{2} \sum_{n=1}^N \left(w'_n(X) \dot{X} + \dot{q}_n \right)^2$$

⁹T. Ninomiya, *Treatise on Materials Science and Technology*, vol. 8 (Academic Press, New York, 1975) p.1.

Lagrangian は

$$L = \frac{m}{2} \sum_{n=1}^N \left(w'_n(X) \dot{X} + \dot{q}_n \right)^2 - U(\{w(X) + q\})$$

運動量は次のように定義される。

$$\begin{cases} P = \frac{\partial L}{\partial \dot{X}} = m \sum_n \left(w'_n(X) \dot{X} + \dot{q}_n \right) w'_n(X) \\ p_n = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_n} = m \left(w'_n(X) \dot{X} + \dot{q}_n \right) \end{cases}$$

この運動量の定義から

$$\Theta_2 \equiv \sum_n w'_n(X) p_n - P = 0$$

そしてハミルトニアンは

$$H = \sum_n \dot{q}_n p_n + P \dot{X} - L = \sum_n \frac{p_n^2}{2m} + U(\{w(X) + q\})$$

となる。

■ Dirac 括弧¹⁰

一般に、自由度 f の系があり、ハミルトニアン $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ が与えられているものとする。ここで

$$\begin{cases} \mathbf{p} = (p_1, \dots, p_f) \\ \mathbf{q} = (q_1, \dots, q_f) \end{cases}$$

束縛条件を

$$\Theta_i(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = 0, \quad i = 1, \dots, k$$

と表す。最小作用の原理によれば、

$$\delta \int dt \left(\sum_n p_n \dot{q}_n - H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) - \sum_i u_i \Theta_i(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \right) = 0$$

具体的に計算すると、

$$\begin{aligned} & \int dt \sum_n \left[\dot{q}_n \delta p_n + \delta \dot{q}_n p_n - \frac{\partial H}{\partial p_n} \delta p_n - \frac{\partial H}{\partial q_n} \delta q_n - \sum_i \left(\frac{\partial \Theta_i}{\partial p_n} \delta p_n + \frac{\partial \Theta_i}{\partial q_n} \delta q_n \right) \right] \\ &= \int dt \sum_n \left[\delta p_n \left(\dot{q}_n - \frac{\partial H}{\partial p_n} - \sum_i u_i \frac{\partial \Theta_i}{\partial p_n} \right) + \delta q_n \left(-\dot{p}_n - \frac{\partial H}{\partial q_n} - \sum_i u_i \frac{\partial \Theta_i}{\partial q_n} \right) \right] \\ &= 0 \end{aligned}$$

¹⁰P. A. M. Dirac, *Can. J. Math.* **2** (1950) 129; P. A. M. Dirac, *Lectures on Quantum Mechanics* (Yeshiva Univ. Press, 1964); 並木美喜雄「解析力学」(丸善, 1991)

よって

$$\begin{cases} \dot{q}_n = \frac{\partial H}{\partial p_n} + \sum_i u_i \frac{\partial \Theta_i}{\partial p_n} \\ \dot{p}_n = -\frac{\partial H}{\partial q_n} - \sum_i u_i \frac{\partial \Theta_i}{\partial q_n} \end{cases}$$

Poisson 括弧を用いると、

$$\begin{cases} \dot{q}_n = [q_n, H] + \sum_i u_i [q_n, \Theta_i] \\ \dot{p}_n = [p_n, H] + \sum_i u_i [p_n, \Theta_i] \end{cases}$$

ここで

$$[A, B] = \sum_n \left(\frac{\partial A}{\partial q_n} \frac{\partial B}{\partial p_n} - \frac{\partial B}{\partial q_n} \frac{\partial A}{\partial p_n} \right)$$

である。 $\Theta_i = 0$ が常に満たされているためには、

$$\dot{\Theta}_i = 0$$

つまり、

$$[\Theta_i, H] + \sum_j u_j [\Theta_i, \Theta_j] = 0$$

これを u_i について解くと、

$$u_i = - \sum_j (M^{-1})_{ij} [\Theta_j, H]$$

ここで M^{-1} は

$$M_{ij} \equiv [\Theta_i, \Theta_j]$$

の逆行列である。ディラック括弧は

$$[A, B]^* = [A, B] - \sum_{ij} [A, \Theta_i] (M^{-1})_{ij} [\Theta_j, B]$$

で定義される。運動方程式は

$$\begin{cases} \dot{q}_n = [q_n, H]^* \\ \dot{p}_n = [p_n, H]^* \end{cases}$$

となる。ディラック括弧は次のような性質をもつ。

$$\begin{cases} 1. [A, B]^* = -[B, A]^* \\ 2. [f(A), B]^* = f'(A)[A, B]^* \\ 3. [A, [B, C]^*]^* + [B, [C, A]^*]^* + [C, [A, B]^*]^* = 0 \\ 4. \text{ 任意の } A \text{ に対して、} [A, \Theta_i] = 0 \end{cases}$$

Frenkel-Kontrova 模型の場合、

$$\begin{cases} H = \sum_n \frac{p_n^2}{2m} + U(\{w(X) + q\}) \\ \Theta_1 = \sum_n w'(X) q_n = 0 \\ \Theta_2 = \sum_n w'(X) p_n - P = 0 \end{cases}$$

よって

$$[A, B]^* = [A, B] + \frac{1}{\Gamma} ([A, \Theta_1][\Theta_2, B] - [A, \Theta_2][\Theta_1, B])$$

ただし、

$$\Gamma = \sum_n [w'_n(X)]^2 - \sum_n w''(X) q_n$$

であるが、さらに具体的に書くと、

$$\begin{cases} [q_n, p_m]^* = \delta_{nm} - \frac{1}{\Gamma} w'_n(X) w'_m(X) \\ [X, P]^* = 1 + \frac{1}{\Gamma} \sum_n w''_n(X) q_n \\ [q_n, X]^* = 0 \\ [q_n, P]^* = -\frac{1}{\Gamma} w'_n(X) \sum_l w''_l(X) q_l \\ [p_n, X]^* = -\frac{1}{\Gamma} w'_n(X) \\ [p_n, P]^* = \frac{1}{\Gamma} w'_n(X) \sum_l w''_l(X) p_l \end{cases}$$

これらを用いると、

$$\begin{cases} \dot{X} = \frac{1}{m\Gamma} P \\ \dot{P} = -\sum_n \frac{\partial U}{\partial u_n}(\{w(X) + q\}) w'_n(X) + \frac{1}{2m\Gamma} \frac{\partial}{\partial X} \left(\sum_n p_n w'_n(X) \right)^2 \\ \dot{q}_n = \frac{p_n}{m} - \frac{1}{m\Gamma} \sum_l p_l w'_l(X) w'_n(X) \\ \dot{p}_n = -\frac{\partial U}{\partial u_n}(\{w(X) + q\}) \end{cases}$$

近似として q_n 、 p_n が小さいとすると、

$$\Gamma \simeq \Gamma_0(X) \equiv \sum_n [w'_n(X)]^2$$

このとき、

$$\dot{X} \simeq \frac{1}{m\Gamma_0(X)} P$$

となる。 $m\Gamma_0(X)$ は転位の質量である。転位の芯の広がりをも l とすると、

$$w'_n(X) \simeq \frac{a}{l}$$

ここで a は格子定数。よって

$$\sum_n [w'_n(X)]^2 \simeq \sum_n \left(\frac{a}{l}\right)^2 \simeq \left(\frac{l}{a}\right) \left(\frac{a}{l}\right)^2 = \frac{a}{l}$$

よって

$$m_{\text{dislocation}} = \frac{ma}{l}$$

となる。つまり、芯が広がっていると軽くなる。

転位の運動に対する力を q_n について展開すると、

$$\begin{aligned} & \sum_n \frac{\partial U}{\partial u_n} (\{w(X) + q\}) w'_n(X) \\ &= \sum_n \frac{\partial U}{\partial u_n} w'_n(X) + \sum_{n,l} \frac{\partial^2 U}{\partial u_n \partial u_l} (\{w(X)\}) q_l w'_n(X) \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{n,l,k} \frac{\partial^3 U}{\partial u_n \partial u_l \partial u_k} (\{w(X)\}) q_l q_k w'_n(X) + \dots \end{aligned}$$

右辺の第一項は 0 となる。なぜなら、 $w_n(X)$ はポテンシャルエネルギー U の極小値に対応するからである。

$$\frac{\partial U}{\partial u_n} (\{w(X)\}) = 0$$

これを X について微分すると、

$$0 = \frac{d}{dX} \frac{\partial U}{\partial u_l} (\{w(X)\}) = \sum_n \frac{\partial^2 U}{\partial u_n \partial u_l} (\{w(X)\}) w'_n(X)$$

よって第二項も消える。第三項は、

$$\frac{1}{2} \sum_{n,l,k} \frac{\partial^3 U}{\partial u_n \partial u_l \partial u_k} (\{w(X)\}) q_l q_k w'_n(X) = \frac{1}{2} \sum_{l,k} q_l q_k \frac{d}{dX} \left(\frac{\partial^2 U}{\partial u_l \partial u_k} (\{w(X)\}) \right)$$

と表される。よって q_n, p_n の二次まででは、

$$\dot{P} \simeq -\frac{1}{2} \sum_{l,k} q_l q_k \frac{d}{dX} U_{lk}(X) + \frac{1}{2m\Gamma_0(X)} \frac{\partial}{\partial X} \left(\sum_n p_n w'_n(X) \right)^2$$

となる。ここで

$$U_{lk}(X) \equiv \frac{\partial^2 U}{\partial u_l \partial u_k}(\{w(X)\})$$

とおいた。さらに、 $\Gamma_0(X)$ は X に依存しないものと仮定しよう。そして、

$$\begin{cases} \Omega_{lk}(X) \equiv \delta_{lk} - \frac{w'_l(X)w'_k(X)}{\Gamma_0} \\ \Gamma_0 = \sum_n [w'_n(X)]^2 \end{cases}$$

を定義する。すると、

$$\dot{P} \simeq -\frac{\partial}{\partial X} H_{ph}(\mathbf{q}, \mathbf{p}; X)$$

と表せる。ここで、

$$H_{ph}(\mathbf{q}, \mathbf{p}; X) = \frac{1}{2} \sum_{l,k} \left[U_{lk}(X) q_l q_k + \frac{1}{m} \Omega_{lk}(X) p_l p_k \right]$$

は転位のあるところでの格子振動のエネルギーである。同様の近似で、以下の運動方程式が得られる。

$$\begin{cases} \dot{X} = \frac{1}{m\Gamma_0} P \\ \dot{P} = -\frac{\partial}{\partial X} H_{ph}(\mathbf{q}, \mathbf{p}; X) \\ \dot{q}_n = \frac{\partial}{\partial p_n} H_{ph}(\mathbf{q}, \mathbf{p}; X) \\ \dot{p}_n = -\frac{\partial}{\partial q_n} H_{ph}(\mathbf{q}, \mathbf{p}; X) \end{cases}$$

また、行列 $\Omega_{lk}(X)$, $U_{lk}(X)$ はゼロ固有値をもつ。なぜなら、定義より、

$$\begin{cases} \sum_k \Omega_{lk}(X) w'_k(X) = 0 \\ \sum_k U_{lk}(X) w'_k(X) = 0 \end{cases}$$

[具体的な例] ¹¹

¹¹F. C. Frank and J. H. van der Merwe, "One-dimensional Dislocations. I. Static theory", *Proc. Roy. Soc. A* 198205(1949)

ポテンシャルとして

$$U = \frac{\mu}{2} \sum_n (u_{n+1} - u_n + a - b)^2 + \frac{W}{2} \sum_n \left[1 - \cos \left(\frac{2\pi u_n}{a} \right) \right]$$

a は基板のポテンシャルの周期である。平衡条件は

$$\frac{\partial U}{\partial u_n} = 0$$

であり、これより、

$$\mu(2u_n - u_{n-1} - u_{n+1}) + \frac{W}{2} \left(\frac{2\pi}{a} \right) \sin \left(\frac{2\pi u_n}{a} \right) = 0$$

変数変換を行う。

$$\zeta_n = \frac{u_n}{a}, \quad l_0^2 = \left(\frac{\mu a^2}{2W} \right)^{1/2}$$

すると、

$$(\Delta \zeta)_n = \frac{\pi}{2l_0^2} \sin(2\pi \zeta_n)$$

ここで、

$$(\Delta f)_n \equiv f_{n-1} + f_{n+1} - 2f_n$$

とおいた。

連続近似をすると、

$$\frac{d^2 \zeta}{dn^2} = \frac{\pi}{2l_0^2} \sin(2\pi \zeta)$$

だから、古典力学との類推で

$$\frac{1}{2} \left(\frac{d\zeta}{dn} \right)^2 + \frac{1}{4l_0^2} \cos(2\pi \zeta) = \text{const.}$$

これを、

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\zeta}{dn} \right)^2 &= \varepsilon^2 + \frac{1}{2l_0^2} [1 - \cos(2\pi \zeta)] \\ &= \varepsilon^2 + \frac{1}{l_0^2} [1 - \cos^2(\pi \zeta)] \end{aligned}$$

さらに、

$$k^2 = \frac{1}{1 + \varepsilon^2 l_0^2}, \quad \phi = \pi \left(\zeta - \frac{1}{2} \right)$$

とおくと、

$$\left(\frac{d\phi}{dn} \right)^2 = \left(\frac{\pi}{kl_0} \right)^2 (1 - k^2 \sin^2 \phi)$$

となる。

もっとも簡単な場合, $k = 1$ のとき,

$$\frac{d\phi}{dn} = \pm \frac{\pi}{l_0} \cos \phi$$

よって

$$\zeta = \frac{2}{\pi} \arctan(e^{-n\pi/l_0})$$

とおける。確かに,

$$\begin{cases} n \rightarrow \infty & \zeta = \frac{2}{\pi} \arctan(0) = 0 \\ n \rightarrow -\infty & \zeta = \frac{2}{\pi} \arctan(+\infty) = 1 \end{cases}$$

よって

$$w_n(X) \simeq a\zeta = \frac{2a}{\pi} \arctan(e^{-\pi(n-X/a)/l_0})$$

よって

$$\begin{aligned} \Gamma_0 &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} [w'_n(X)]^2 \\ &= \frac{1}{l_0^2} \operatorname{sech}^2 \left[\frac{\pi}{l_0} \left(n - \frac{X}{a} \right) \right] \\ &= \frac{1}{l_0^2} \left[\frac{2l_0}{\pi} + (2l_0)^2 \sum_{n=1}^{\infty} n \operatorname{cosech}(n\pi l_0) \cos \left(\frac{2n\pi X}{a} \right) \right] \\ &= \frac{2}{\pi l_0} + 4 \sum_{n=1}^{\infty} n \operatorname{cosech}(n\pi l_0) \cos \left(\frac{2n\pi X}{a} \right) \end{aligned}$$

l_0 は転位の芯の広がりを表す。第一項は定数部分でこれは, l_0 が大きくなるとともに, 減少する。第二項は転位の位置に依存する部分であるが, $l_0 \rightarrow \infty$ で指数関数的に 0 になる。