

転位のある空間上経路積分

静岡大 教養 北原 和夫
中里 和郎

§1 序論

規則的な結晶では，原子の位置（格子点と呼ぼう）は，3つの整数を指定すると決まる。即ち，ある格子点の位置ベクトルを \underline{n} とすると，

$$\underline{n} = n_1 \underline{a}_1 + n_2 \underline{a}_2 + n_3 \underline{a}_3 \quad (1)$$

と書くことができる。ここで， n_1, n_2, n_3 は整数である。 n_1, n_2, n_3 のうちの1つが ± 1 だけ変化すれば，隣りの格子点を表わすことになる。このような格子点を一個の粒子が運動することを記述するハミルトニアンとして

$$H = T \sum_{(\underline{n}, \underline{m})} |\underline{n}\rangle \langle \underline{m}| \quad (2)$$

が考えられる。 $|\underline{n}\rangle$ は格子点 \underline{n} に粒子が存在する状態である。和は隣接する格子点の対についてとる。格子が単純立方格子である とすれば，上のハミルトニアンの固有関数

$$|E\rangle = \sum_{\underline{n}} C(\underline{n}) |\underline{n}\rangle \quad (3)$$

は、

$$E C(\underline{n}) = T \sum_{i=1}^6 C(\underline{n} + \underline{b}_i) \quad (4)$$

と解くことによつて得られる。ここで、 $\underline{b}_1 = a\hat{e}_1$, $\underline{b}_2 = -a\hat{e}_1$, $\underline{b}_3 = a\hat{e}_2$, $\underline{b}_4 = -a\hat{e}_2$, $\underline{b}_5 = a\hat{e}_3$, $\underline{b}_6 = -a\hat{e}_3$ である。 \hat{e}_1 , \hat{e}_2 , \hat{e}_3 はそれぞれ、 x 軸, y 軸, z 軸の方向の単位ベクトルである。 $C(\underline{n})$ は平面波である。

$$C(\underline{n}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\underline{n}} \quad (5)$$

従つて

$$E = 2T \sum_{i=1}^3 \cos(k_i a), \quad (6)$$

さて、格子に転位が存在して、格子の結合の組違えがあったら、上の事情はどのようになるであろうか。たとえば、う

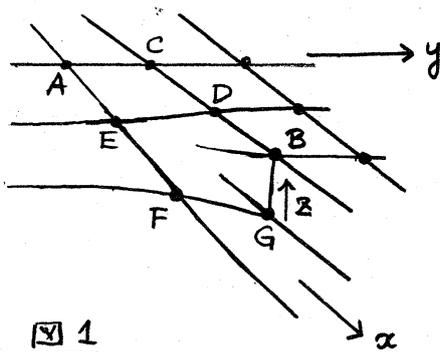


図 1

せん転位があると、格子は左図のようになる。この時、格子点の位置を(1)のように3つの整数で一意的に指定することができない。なぜなら、

格子点Aに対して格子点Bの相対的位置を指定するとき、 $A \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow B$ と数えるならば、 y 方向に+1, x 方向に+2 と

いうことになるが、 $A \rightarrow E \rightarrow F \rightarrow G \rightarrow B$ と数えると、格子点Bは、 x 方向に+2, y 方向に+1, z 方向に+1だけ進んだところにある、ということになる。即ち、相対位置の指定の仕方が格子点を数えてゆく径路に依存することになる。勿論、このようなことは規則格子では起こらない。らせん転位のある格子は、局所的には規則格子の構造をしているにもかかわらず、大域的には規則性が破れているので、(5)のような平面波は固有状態とならず、平面波は散乱を受けるのである。¹⁾

格子の間隔を小さくして格子を連続体とみなす極限を考慮してみよう。 \mathcal{R} を連続変数 x で置きかえると、方程式(4)は、Schrödinger 方程式

$$\varepsilon C(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 C(x) \quad (7)$$

となる。ここで $\varepsilon \equiv E - 6T$, $T \equiv \frac{\hbar^2}{2ma^2}$ とおいた。即ち、規則格子上的粒子の運動は、連続体の極限で自由粒子の運動方程式(7)に従うことになる。また、初期条件として $x(0) = x'$ に居た粒子が時刻 t に $x(t) = x$ に到達する、という量子力学的伝播は、経路積分

$$G(x, x', t) = \int_{\substack{x(0)=x' \\ x(t)=x}} \mathcal{D}(x) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt \frac{m}{2} [\dot{x}]^2 \right\} \quad (8)$$

によって表現される。

結合の組違えがあるような格子を連続体とみなす場合に、上記のような波の伝播はどのように記述されるであろうか。結合の組違えがあると連続体はひずむ。ひずみをとってやれば、元の規則格子にもどる。従って、粒子の運動をひずみをとって連続体に写して見れば、ユークリッド空間における自由粒子として記述されることになる。しかしながら、ひずみのある連続体とそのまま大域的にひずみをとって連続体に対応させることは一般的にできない。局所的にはこの対応が可能であるので、これを粒子の径路に沿ってつなげてゆくことにすればよい。²⁾ §2にこの方法を具体的に述べる。

§2 ひずみのある連続体の記述

一般的に、ひずんだ連続体はひずみテンソル $\beta_{ji}(\underline{x})$ によって記述される。連続体の中の一点 \underline{x} のずれを $u(\underline{x})$ 、その近傍の点 $\underline{x} + d\underline{x}$ のずれを $u(\underline{x}) + du$ とすると、

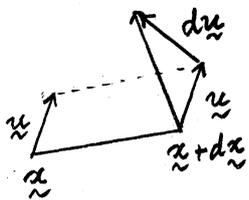
$$du^i = dx^j \beta_{ji}(\underline{x}) \quad (9)$$

とあらわされる。³⁾ 従って、ひずむ前に $d\underline{x}$

であったベクトルは、ひずみによって

$d\underline{x} + du$ になる。逆に、ひずんでい

る連続体の中で $d\underline{x}$ としてあらわされるベクトルは、ひずみ



をとり去ると, $dx^i \rightarrow dx^i - dx^j \beta_{ji}(x - dx)$ となる。
 微分の高次を無視すると, ひずんでいる連続体で dx^i 進む
 ということは, ひずみを取り去った連続体 (即ち規則格子)
 において

$$dy^i = dx^i - dx^j \beta_{ji}(x) \quad (10)$$

だけ進んだことになる。ひずみを取り去った連続体に写した
 座標 y では自由粒子の如くに振舞っているのであるから, 1
 つの径路に沿っての量子力学的伝播は

$$\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt \frac{m}{2} [\dot{y}]^2 \right\}$$

で与えられることになる。ただし, 注意しなければならない
 ことは, 微分で表わされた変換式 (10) は一般に積分可能
 でないので, y を x の関数として一意的に表現することがで
 きない, ということである。

$x(0) = x'$ から $x(t) = x$
 に到る径路が異なると, $y(t)$ も異なってくる。実際,
 式 (10) を積分すると,

$$y^i(\tau) = y^i(0) + x^i(0) - \int_0^\tau dt' x^j(t') \beta_{ji}[x(t')] \quad (11)$$

となる。これを, $x(\tau')$ [$0 \leq \tau' \leq \tau$] によって新しい変
 数 $y^i(\tau)$ を定義する変換式とみなそう。時間を離散化して
 $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_N = t$ として, $x^i(t_\alpha) = x(i\alpha)$

$y^i(t_\alpha) = y(i\alpha)$ と書くことにする。 $\alpha = 0, 1, \dots, N$ 。
式 (11) は、

$$y(i\alpha) = y_i(0) + x(i\alpha) - x(i0) - \sum_{\gamma=0}^{\alpha-1} \{x(j\gamma+1) - x(j\gamma)\} \beta_{ji} \left[\frac{\tilde{x}(t_{\gamma+1}) + \tilde{x}(t_\gamma)}{2} \right] \quad (12)$$

と表わされる。 $\{x(i\alpha)\}$ と $\{y(i\alpha)\}$ の間の変換のヤコビアンを計算するために、 $\partial y(i\alpha) / \partial x(j\gamma)$ を求めると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial y(i\alpha)}{\partial x(j\gamma)} &= \delta_{ij} \delta_{\alpha\gamma} \\ &+ \left[\frac{\partial \beta_{ji}}{\partial x^l} (\tilde{x}(t_{\gamma+1})) - \frac{\partial \beta_{li}}{\partial x^j} (\tilde{x}(t_\gamma)) \right] \\ &\times \{x(l\gamma+1) - x(l\gamma)\} \\ &+ \mathcal{O}(\Delta t)^2 \end{aligned} \quad (13)$$

となる。ここで $t_{\gamma+1} - t_\gamma = \Delta t$, $x(l\gamma+1) - x(l\gamma) \approx \dot{x}_l \Delta t$ とおいた。 $\partial y(i\alpha) / \partial x(j\gamma)$ を $(i\alpha)$ 行 $(j\gamma)$ 列の要素とする行列の行列式がヤコビアンである。公式

$$\begin{aligned} \det(1+A) &= \exp\{\text{Tr} \ln(1+A)\} \\ &= \exp\left\{\text{Tr} A - \frac{1}{2} \text{Tr} A^2 + \dots\right\} \end{aligned} \quad (14)$$

を用いる。(13) に即してみれば、

$$A_{(i\alpha), (j\beta)} = \left[\frac{\partial \beta_{ji}}{\partial x^i} (\underline{x}(t_j)) - \frac{\partial \beta_{ei}}{\partial x^j} (\underline{x}(t_j)) \right] \dot{x}_e(t_j) \Delta t + \dots \quad (15)$$

である。これより、ヤコビアンは $\Delta t \rightarrow 0$ の極限で

$$J = \exp \left\{ \int_0^t d\tau \epsilon_{lmn} \alpha_{lm}(\underline{x}(\tau)) \dot{x}_n(\tau) \right\} \quad (16)$$

となる。ここで $\alpha_{lm}(\underline{x}) = -\epsilon_{lpq} \frac{\partial}{\partial x^p} \beta_{qm}(\underline{x})$ ³⁾, ϵ_{lmn} は l, m, n の置換について反対称で $\epsilon_{xyz} = 1$ 。従って

$$\left\{ \prod_{j=x,y,z} \prod_{\alpha=1}^{N-1} \int dx(j\alpha) \right\} J = \prod_{j=x,y,z} \prod_{\alpha=1}^{N-1} \int dy(j\alpha) \quad (17)$$

であることにより、 $G(\underline{x}, \underline{x}', t)$ を \underline{x} 座標に関する経路積分の形

$$G(\underline{x}, \underline{x}', t) = \int_{\substack{\underline{x}(0) = \underline{x}' \\ \underline{x}(t) = \underline{x}}} \mathcal{D}(\underline{x}) J \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \mathcal{L}(\underline{x}(\tau), \dot{\underline{x}}(\tau)) \right] \quad (18)$$

に表わすことができる。ここで

$$\mathcal{L}(\underline{x}, \dot{\underline{x}}) = \frac{m}{2} \left[\dot{x}_i - \dot{x}_j \beta_{ji}(\underline{x}) \right] \left[\dot{x}_i - \dot{x}_l \beta_{li}(\underline{x}) \right] \quad (19)$$

である。

§3 z軸方向に揃ったらせん転位の場合

最も取扱い易いのは、らせん転位の転位線がz軸と平行な場合である。この場合、ひずみテンソル $\beta_{ji}(z)$ は、 $\beta_{xz}(z)$ 、 $\beta_{yz}(z)$ 以外はゼロであり、zに依存しない。また、転位密度テンソル $\alpha_{lm}(z)$ も $\alpha_{zz}(z)$ 以外はゼロである。従って

$$L(z, \dot{z}) = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) + \frac{m}{2} \left\{ \dot{z} - \dot{x} \beta_{xz}(x, y) - \dot{y} \beta_{yz}(x, y) \right\}^2 \quad (20)$$

となる。これを用いた量子力学的伝播は

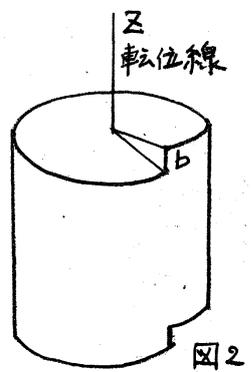
$$G(z, z', t) = \int_{x(0)=x'}^{\mathcal{D}(x)} \int_{y(0)=y'}^{\mathcal{D}(y)} \int_{z(0)=z'}^{\mathcal{D}(z)} \times \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \frac{m}{2} (\dot{z})^2 \right\} \quad (21)$$

$$x(t)=x \quad y(t)=y \quad z(t)=z - \int_0^t d\tau (\dot{x} \beta_{xz} + \dot{y} \beta_{yz})$$

とも書きあらわせる。

らせん転位が1本だけz軸上に存在する場合、

$$\beta_{xz} = \frac{b}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2}, \quad \beta_{yz} = -\frac{b}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2} \quad (22)$$



である。 $\int_0^t d\tau \frac{x\dot{y} - y\dot{x}}{x^2 + y^2}$ は、径路 $z(\tau)$ [$0 \leq \tau \leq t$] が z 軸のまわりを巡る角度であることに注目すると、

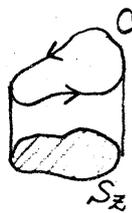
$$G(z, z', t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} G_n(z, z', t) \quad (23)$$

と書くことができる。 n は、径路が z 軸のまわりを何回巡るかを示す。 実際、始点 z' と z 軸を含む面が、終点 z と z 軸を含む面となす角を Θ とすると、

$$G_n(z, z', t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\lambda e^{i\lambda(n + \frac{\Theta}{2\pi})} \int_{z(0)=z'}^{z(t)=z + b(n + \frac{\Theta}{2\pi})\hat{z}} \mathcal{D}(z) \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \left\{ \frac{m}{2} (\dot{z})^2 - \frac{\lambda \hbar}{2\pi} \frac{x\dot{y} - y\dot{x}}{x^2 + y^2} \right\} \right] \quad (24)$$

となる。 \hat{z} は z 軸方向の単位ベクトル。

次に、同じ所に戻ってくる伝播 $G(z, z, t)$ について考える。 閉曲線について、ストークスの定理により



$$\oint_C \{ dx \beta_{xz} + dy \beta_{yz} \} = \int_{S_z} dS_z \left(\frac{\partial}{\partial x} \beta_{yz} - \frac{\partial}{\partial y} \beta_{xz} \right) = - \int_{S_z} dS_z \alpha_{zz} \quad (25)$$

であるから、

$-\int_0^t d\tau (\dot{x}\beta_{xz} + \dot{y}\beta_{yz})$ は、閉じた径路が囲む転位線の Burgers ベクトルの和4)になっている。(2回囲むと2倍になることに注意) この Burgers ベクトルの和が、径路の囲む面積 (xy 面上) の関数であるとする。即ち

$$-\int_0^t d\tau (\dot{x}\beta_{xz} + \dot{y}\beta_{yz}) = a(s) \quad (26)$$

すると、

$$G(x, x, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dS \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda e^{i\lambda S} \int_{\substack{x(0)=x \\ x(t)=x+a(s)\hat{z}}} \mathcal{D}(x)$$

$$\times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \left\{ \frac{m}{2} (\dot{x})^2 - \frac{\lambda \hbar}{2} (x\dot{y} - y\dot{x}) \right\} \right] \quad (27)$$

となる。

上記の2つの径路積分にあらわれるラグランジアンは、それぞれ、一本の線に集中した磁束5)、及び、一様な磁場の作用を受けている粒子の運動6)をあらわすものと等価である。具体的な計算の結果は別の機会にまとめる。

§4 リーマン幾何学的解釈

ひずんでいる連続体をリーマン多様体と考え、 x^i を多様体

の点をあらゆる座標と考える。§2でみたように、近接する2点 x^i , $x^i + dx^i$ の間の距離は、

$$(ds)^2 = dy^i dy^i = (dx^i - dx^j \beta_{ji})(dx^i - dx^l \beta_{li}) \quad (28)$$

であるから、計量テンソルは

$$g_{ij} = \delta_{ij} - \beta_{ji} - \beta_{ij} + \beta_{ie} \beta_{je} \quad (29)$$

で与えられることになる。この計量テンソルより、曲率テンソルなどを求めることができる。一般的に求めるのは複雑であるので、§3のように、ひずみテンソルが β_{xz} , β_{yz} 以外はゼロで、 β_{xz} , β_{yz} 共に z に依らないという場合に限ってみると、曲率スカラー R は、

$$R = -\frac{1}{2} (\alpha_{zz})^2 \quad (30)$$

となる。即ち、転位によって空間の曲率が生じる。この場合、勿論、換率はゼロである。

しかしながら、我々のひずんだ連続体を擬似接続空間とみなして、接続の係数を

$$\Gamma_{jk}^i = -\frac{\partial \beta_{je}}{\partial x^k} \Delta_{ei} \quad (31)$$

但し

$$(\delta_{mn} - \beta_{mn}) \Delta_{nl} = \Delta_{mn} (\delta_{nl} - \beta_{nl}) = \delta_{ml} \quad (32)$$

として定義すると、§3の場合、換率は

$$S_{xy}^z \equiv \Gamma_{xy}^z - \Gamma_{yx}^z = \alpha_{zz} \quad (33)$$

で丁度転位密度テンソルに一致し、 Γ_{jk}^i より得られる曲率

テンソル R_{jkl}^i はすべてゼロになる。このような幾何学的解釈が、径路積分の実行等の為にどれだけ有用かはまだはっきりしない。

Γ_{jk}^i を用いると、測地線方程式は

$$\ddot{x}^i - \frac{\partial \beta_{je}}{\partial x^k} \Delta_{ei} \dot{x}^k \dot{x}^j = 0 \quad (34)$$

であるが、これは、

$$\dot{x}^i - \dot{x}^j \beta_{ji} = \text{const.} \quad (35)$$

を意味し、式 (10) から明らかのように、ひずみをとりに去った連続体において $\dot{y}^i = \text{const.}$ 、即ち、等速度運動をあらわしている。

- 1) K. Kawamura; Z. Physik B29 101 (1978),
 ibid. B30 1 (1978).
- 2) 近藤一夫; 変形の幾何学 (岩波講座 現代応用数学
 B. 7-b. II, 1957).
- 3) 例えば, E. Kröner; Kontinuumstheorie der
 Versetzung und Eigenspannungen (Springer,
 1957).
- 4) α_{zz} は転位密度テンソルと呼ばれるもので、 z 軸に垂直な単位面積を通る転位線の Burgers ベクトルの z 成分の和をあらわす。Burgers ベクトルというのは、転位

線のまわりを一周した時に格子がどれだけずれているかをあらわすベクトルである。図2の場合で言うと、 z 軸の向きに大きさ b のベクトルである。

- 5) Y. Aharonov and D. Bohm; *Phys. Rev.* 115
485 (1959).
- 6) L. D. Landau and E. M. Lifshitz; Quantum
Mechanics (Pergamon, 1977) P. 456.
- 7) 矢野健太郎; 接続の幾何学 (森北出版, 1968)
第4章.