

# 転位空間における波動の散乱とフラストレーション

広島大理 川村 清

## §1 phase mismatching 散乱

次のような問題を考えよう。図1のように、エッジ型転位を含む格子があり、電子がtight-binding近似で表わされるとする。電子のtransfer matrix は隣り合う格子点の間では一定の大きさ  $T (< 0)$  をもち、それより遠い格子点の間では  $0$  とする。そこで、図1に示したように、左の方から電子波が近づいてきたとする。格子点  $A$  では、下と上へのボンドが欠けているから反射がおこるはずだが、これがおきないとすると、電子波は何ら乱されることなく、この転位空間を右方へ通り過ぎることが出来るだろうか？

答は  $No$  である。なぜなら、直線より上側の電子波と下側の電子波がそれぞれ乱されることなく通過したとすると、それから  $15$  格子間隔進んだ後に、それぞれの電子波は、図1に点線で示したような波形になる。注意したいのは、直線より上側の波と下側の波は、転位より右側の  $L$  の両側に位相が  $\pi$ 、その大きさは  $p$  を波動ベクトルとして、 $p_x$  になるということだ。

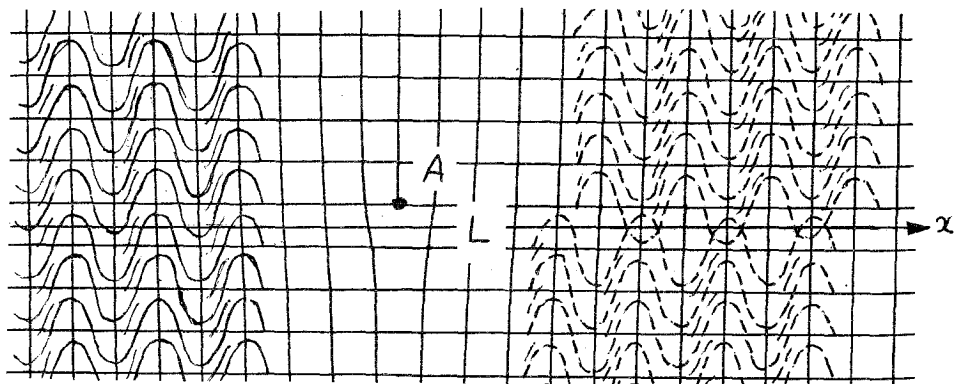


図 1

ある。しかし、波動関数は連続でなくてはならないから、 $\mathcal{L}$  をはさんでの不連続性を埋めるような波が発生し、それが周囲へ二次波としてひろがっていくであろう。

このような、転位空間のトポロジカルな特異性によっておこる散乱は、tight-binding 近似を採用する限り、転位空間で一般的におこる。実際、われわれが最初に考察したのは、スクリュウ型転位の場合であり<sup>1)~4)</sup>、われわれは、このような散乱を 'phase mismatching 散乱' と名づけた。スクリュウ型転位の軸が各方向に走っているとき、転位芯を左側から迂回する部分波と右側から迂回する部分波の位相の差は  $\varphi_0$  になる。

## § 2. シュレディンガー方程式とその解

われわれは、次のような tight-binding 近似での Schrödinger 方程式を数値的に解いた。

$$E C(n) = T \sum_{n'} C(n') \quad (1)$$

ここに  $C(n)$  は、 $n$ -site における原子波動関数の振幅であり、 $n'$  は  $n$  の最近接格子点を表わす。 $n$  は、整数を要素とする二次元ベクトルで、transfer matrix がすべてのボンドにわたって一定であるとしていることに注意しよう。

方程式を数値的に解くときの必要上、われわれは、Burgers vector が反対向き的一对の転位をもつ格子系を考察することにして、図 2 の三つのトポロジーについて、(1) を解いた。この図で、他の二倍の長さのボンドや、斜めに走るボンドがあるが、それは、 $n$  の要素を整数としたために出来たものであり、それに関わる transfer matrix も  $T$  字のものであるから、これらのボンドは、物理的には、他のボンドと差異はない。入射粒子としては、それぞれトポロジー

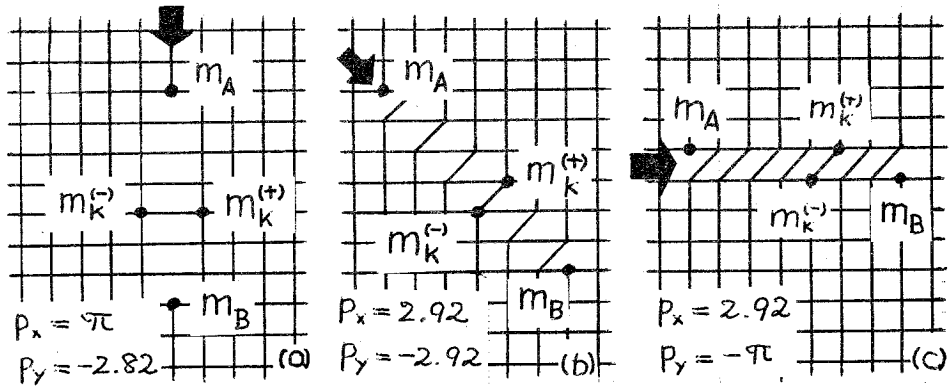


図 2

に対応して、波動ベクトル  $p$  の値を違えている。これらの波動ベクトルは、いずれも正方格子のオーブリアン域の角に近い状態で、その群速度と  $p$  とは平行ではない。(入射波の) 群速度の向きと  $p$  の値を、各図に書きこんである。

この二次元平面上での波動関数を求めるには、まず、 $m_A, m_B, m_k^{(\pm)}$  ( $k=1, 2, \dots, N$ ) の格子点における  $C(n)$  に関する連立方程式を解き、それと完全結晶での格子グリーン関数を使って、任意の点での  $C(n)$  が求まる (Kirchhoff-Heugens の定理)。  $N=\infty$  とすると、上述の連立方程式を解くことが出来ないで、二番目の転位を入れて、方程式の大きさを有限にしたのである。

図 3 a~c は、 $|C_{\pm}(k)| = |C(m_k^{(\pm)})|$  と、

$$C(n) = \exp(ik \cdot n) + C_1(n) \quad (2)$$

で定義した  $C_1$  について、 $|C_{1\pm}(k)| = |C_1(m_k^{(\pm)})|$  を白丸と黒丸で示している。 $|C_{\pm}(k)|$  は左側の目盛を、 $|C_{1\pm}(k)|$  は右側の目盛を使う点に御注意いただきたい。

まず 図 3 a は、図 2 a の場合の数値解をプロットしてある。 $|C_{\pm}(k)|$  は、 $k$  が大きく増えるにしたがって、0 に近づいていくように見える。実際、この場合、

$$C_{\pm}(k) = e^{\pi i/4} e^{iPk} \sqrt{(\pi-p)/2\pi Pk}$$

であることが数値的にわかっている。

このように、転位の下流側で波動関数の

値が小さくなっていくということは、ここに

転位軸の「影」が出来ていることを意味

している。転位の代わりに通常の散乱

体がある場合にも影は出来るが、その

場合の影は、そこに回折によるまわ

りにむ入射粒子によるうすまり、散乱

体から十分はなれたところでは波動

関数の絶対値は 1 に近づく。<sup>5)</sup> それ

に対し、転位による影は、転位から

十分下流でも消えることがないばかりか、

むしろ、「暗く」なるばかりである。それとほうらばらに、3図aでは、 $|C_{\pm}(k)|$

は下流へいくほど大きくなり 1 に漸近しているように見える。 $C_{\pm}(k)$  は、その定義

式(2)からわかるように、通常の散乱問題では散乱波とよばれるもので、散

乱体から遠ざかるにつれ 0 に収斂すべき量である。

3図 b および c においても  $k$  が大きくなるにつれ、 $|C_{\pm}(k)|$  は 0 では

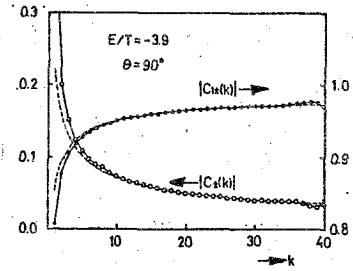
ないが 1 よりかなり小さい値に近づいていく。また  $|C_{\pm}(k)|$  は、1 にかた

り近い値に近づいていく。すなわち、転位による影は、「真黒」ではないが、

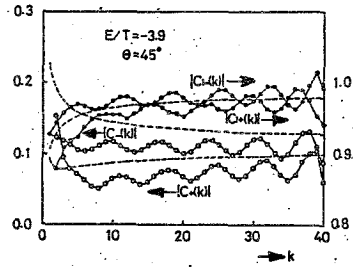
下流側無限遠にまで現われるのである。

実は、 $|C_{\pm}(k)|$  や  $|C_{\pm}(k)|$  について、現象論的公式を簡単な考察で導

(a)



(b)



(c)

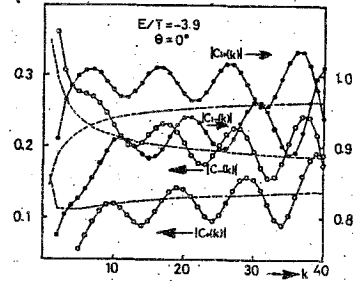


図 3

くことができ、それを図3a,cでは、点線で示してある。その詳しいことは省略するが、 $\theta \rightarrow 0$  近似の議論をしよう。第1図でLより上側の入射波と下側の入射波は、転位より下流で位相差  $p_x$  をもつことから、 $\exp(ip_x x \pm ip_x/2)$  と書ける。それがLで出合うのだから、Lでの波動関数の主要な項は、これらを重ね合わせて、 $\cos(p_x/2) \exp(ip_x x)$  となるであろう。現象論的な式は、 $|C_{\pm}(k)|$  が  $k \rightarrow \infty$  でこの値に近づき、有限な  $k$  に対しては、さらに  $\sin(p_x/2) \exp(ip_x x) / \sqrt{x}$  に比例する項がつけ加わるべきことを示している。特に、図2aの場合、 $p_x = \pi$  であるから、 $k \rightarrow \infty$  で  $|C_{\pm}(k)|$  は、0に近づくのである。この場合、二つの入射波はL上で完全に out of phase で出合うので、'out-of-phase limit' と呼ぶことにしよう。図2bとcの場合  $\cos(p_x/2)$  は完全に0ではないが、やはり小さな値をとる。

### §3 議論の拡張

ここで述べたエッチ型転位による波動の散乱についての奇妙な振舞と同じことは、すでに筆者と吉田により、スクリュ-型転位の場合について見出た<sup>3),4)</sup> いた。<sup>3),4)</sup> スクリュ-型転位の場合、上述の  $p_x$  の代わりに  $p_z$  が影の暗さを与えることが現象論的にも<sup>3)</sup>、理論的にも<sup>4)</sup> 示されている。

スクリュ-型転位の場合、格子定数が小さいとして、差分方程式(1)を微分方程式の形に書くと

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{ip_z}{2\pi} \right)^2 + p^2 \right) C(r, \theta) = 0 \quad (3)$$

となる。ここに  $p$  は、転位軸に垂直な面内での波動ベクトルの大きさ、 $C(r, \theta)$  は、この面内での波動関数を二次元極座標を使って表わしている。

この式は vector potential を

$$A_{\text{dis}} = \frac{c}{e} \frac{P_z}{2\pi r} e_0 \quad (4)$$

としたときの Aharonov-Bohm 方程式 (AB 方程式) である。<sup>6)</sup> AB 方程式は、AB によって  $pr(1 - \cos \theta) \gg 1$  の領域においてのみ、漸近解が求められている。他方、影のような奇妙な解の振舞は、 $\theta \cong 0$  および  $2\pi$  においてみられるものであるから、AB 理論の範囲外である。それに対し、最近筆者らは、AB 方程式を  $\theta \cong 0$  および  $2\pi$  の領域も含めて解き、影の性質をみきわめることに成功した。<sup>7)</sup>

ところで、エッチ型転位およびスクリュ-型転位の考察を合わせると、一般の転位の場合には、 $\mathbf{b}$  を Burgers vector として、影の暗さは  $p \cdot \mathbf{b}$  で決まることか予想される。実際、一般の転位に対して、(3) に相当する式を求め、それを解くことにより、このことは確かめられた。<sup>8)</sup>

これまでの議論は、tight-binding 近似を用いた結果であるが、それが実際に観測できるかどうかを考えるためには、さらに二つの問題を解いておかななくてはならない。オ-の問題は、上に述べたような、転位空間における波動の特異な振舞か、どのような現象に現れるかということであり、オ二の問題は、nearly-free-electron のような格子の並びに鈍感な電子系でも、phase-mismatching はおこるかということである。

われわれは、単純立方格子系の nearly-free-electron に対するスクリュ-転位の影響を調べた。<sup>9)</sup> この系の電子は、よく知られているように、オ-ブリュアン域の大部分でイオンの影響を殆ど受けず、境界付近ではイオンの影響を強く受け、等エネルギー面も球形からはずはたしくずれる。したがって、ブリュアン域境界付近状態にある入射電子は、転位の影響を強く受けるであろうと

が予想される。実際、この場合  $A_{dis}$  は (4) のかわりに

$$A_{dis} = \frac{c}{e} \frac{G'(p_z)}{2\pi r} e_0 \quad (5)$$

と書ける。  $G'(p_z)$  は、  $p_z$  が  $\pi$  で  $-\pi$  になり、 また  $p_z$  が  $\pi$  からはずれると、  $G'(p_z)$  は急激に 0 または  $2\pi$  に近づく。都合がよいことに、最も転位の影響を受けやすい、ブリュアン域境界上の電子の phase-dismatching は、 out-of-phase limit の値  $\pi$  とする。

電子に磁場をかけたとき、それは、

$$n + \frac{1}{2} = 2 \frac{e}{c} \Phi - \frac{e}{c} \oint A \cdot dr \quad (6)$$

という Onsager の条件を満足する軌道を回わり出す。  $A = \frac{1}{2} (Hy, -Hx, 0)$  であれば、この軌道は、通常のランタウ準位に対応するが、  $A$  に (5) が入っていると、量子化条件が変わってきて、スクリュ-転位を一周する軌道をまわる電子のエネルギーは、  $n\omega_c$  に整数をかけたものになり、丁度、通常のランタウ準位の中間にくる。したがって、実験条件をうまく選べば、 de Haas-van Alphen 効果によって、  $A_{dis}$  の存在を観測する可能性がある。<sup>9)</sup>

fcc 結晶では、  $\langle 110 \rangle$ -スクリュ-転位が出来る。他方、フェルミ面のネックは、ブリュアン域の  $\langle 111 \rangle$  方向に垂直な六角形の境界面に出来る。それぞれの解析によると、この面上の電子が入射した場合、やはり phase-dismatching は  $\pi$  になることが分かった。<sup>10)</sup>

static な波も転位の影響を受ける。その例として、図4の格子点に、反強磁性的に結合するスピンがある場合を考ぼう。  $A$  から出発して、転位軸のまわりを一周する軌道に沿って

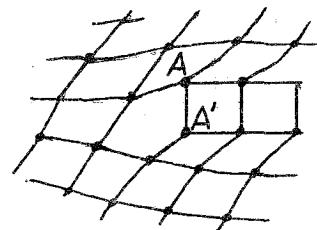


図 4

隣り合うスピンの反平行になるように並べていくと、 $A'$ のスピンのスピンと $A$ のスピンの平行になり、ここに交換相互作用のフラストレーションが生じる。実際には、このフラストレーションは、軸位軸を囲む線上のボンドが平等に負担しあうことになる。この問題は、図5のような二次元強磁性体があり、点線のボンドだけが反強磁性という場合と同等であることが示される。 $S \rightarrow \infty$ でこの基底状態を求めるとは簡単であるが、軸位の相転移に与える影響を現在考察中であり、それらは、まとめて、近い将来に公表できるとおもう。

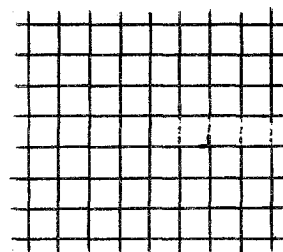


図 5

#### § 4 あとがき

以上、われわれのグループがこれまでに行ってきた研究の概要を述べた。最後に述べたフラストレーションの話を除き、「固体の中の相転移」とはかけ離れた話をしてきたが、計算機には、すいぶんお世話になった。

また、研究をすすめるにあたって、われわれのグループの以下の協力者に助けていただいている。ここに謝意を表したい。

黄亨吉 (延慶大(中国))、吉田裕午 (広島市立慶中予)、入江洋一、善南康則、大平亮治、中村龍哉 (以上広島大)。

#### 文 献

- 1 K. Kawamura, Z. Phys. B29 (1978) 101
- 2 K. Kawamura, Z. Phys. B30 (1978) 1
- 3 Y. Yoshida and K. Kawamura, Z. Phys. B32 (1979) 355



- 4 K. Kawamura and Y. Yoshida, *Z. Phys.* B34 (1979) 369
- 5 シッフ著 井上健訳 量子力学 (百閑書店) p131
- 6 Y. Afaronev and D. Bohm, *Phys. Rev.* 115 (1959) 485
- 7 K. Kawamura, Y. Zempo and Y. Irie, *Prog. Theor. Phys.* (投稿中)
- 8 Y. Irie, K. Kawamura and Y. Zempo unpublished
- 9 K. Kawamura, *Prog. Theor. Phys. Supplement* No. 69 (1980) 258
- 10 H. D. Huang and K. Kawamura, *Solid State Communications*  
(to be published)