

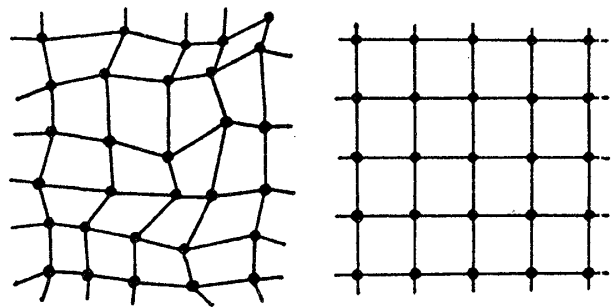
転位空間の問題に現われる Aharonov - Bohm 問題と その拡張

広島大学理学部 川村 清

§1 Tight-Binding Electron と結晶のトポロジー

図1の二つの結晶はユークリッド幾何の意味では同等ではないがトポロジカルには同等である。この同等性を反映する方程式がどのようなものかを考える。そのために、各格子点に、整数を要素とする二次元ベクトル $n = (n_x, n_y)$ を使って番号づけをし、(a)の格子中の電子状態を tight-binding 近似で取り扱ってみよう。tight-binding 方程式は

$$(E - E(n))C(n) = \sum_{n'} T(n, n')C(n') \quad (1.1)$$



(a) 図 1 (b)

となる。ここで $C(n)$ は、原子波動関数の格子点 n における振幅、 $E(n)$ はそこにおける原子内電子の準位であり、歪による結晶場の変動が原子準位をシフトさせることをこの準位の n -依存性で表わしている。また、 $T(n, n')$ は、ボンドの長さが変化することにより、hopping matrix が変化することを表す。

ここで、原子準位や hopping matrix が結晶の歪に対して鈍感で、 $E(n)$ と $T(n, n')$ は一定であるとする、(1.1)は

$$(E - E_0)C(n) = T \sum_{n'} C(n') \quad (1.2)$$

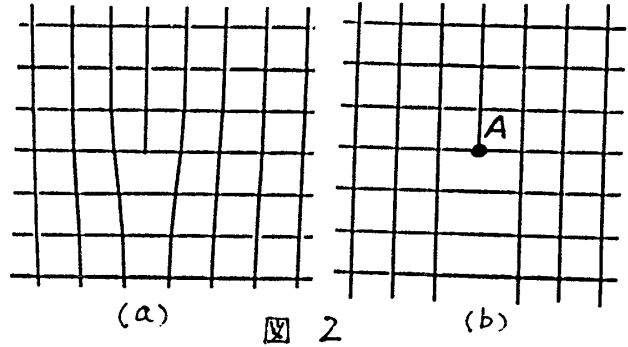
となり、(b)の中の電子の tight-binding 方程式に帰着する。もし、 C を格子点の番号 n ではなく、格子点の位置 R_n の関数として書くと、(1.2)は、

$$(E - E_0)C(R_n) = T \sum_{n'} C(R_{n'}) \quad (1.3)$$

となるが、 R_n は、二つの格子で異なる値をとるから、この方程式は(1.2)とは異なり、格子のユークリッド幾何学的構造を反映している。すなわち、tight-binding 方程式を格子点の番号を使って書き下ろすとき、格子のユークリッド幾何学的特徴は $E(n)$ や $T(n, n')$ に現われるが、これらの変動を無視すると、トポロジカルに同等な二つの格子の区別は現われなくなる。特に(1.2)は、 $C(n) = \exp(ip \cdot n)$ という解をもつことに注意し

よう。

以上のことから、結晶転位のトポロジカルな特徴のみを調べようと思えば、(1.2)の型のtight-binding方程式の解を調べればよいことがわかる。図2(a)はエッジ型転位付近のかなりrealな格子構造であり、(b)は、トポロジカルに同等な格子である。そこで(b)にみられる



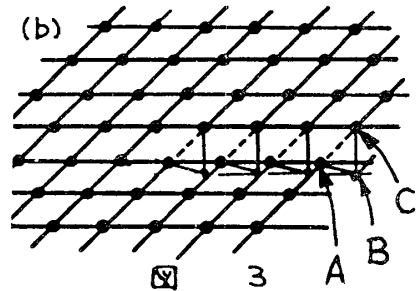
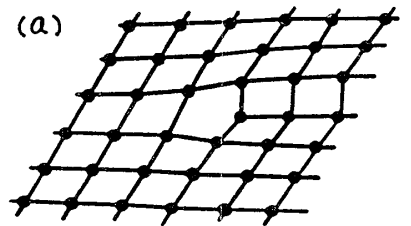
長いボンドも短いボンドも同じtransfer-matrixの値をもつとすれば、(1.2)を満足するC(r)は転位構造のトポロジカルな異常性の影響のみを受けるようになるであろう。図3(a)には、実際のスクリュエー転位の格子構造を示しており、図3(b)には、それとトポロジカルに同等な格子を描いてある。

§2 Normal site と Anomalous site

転位を含む格子中の各格子点の位置をRと書くことにする。別に、各格子点に番号をつけることにしよう。この番号のつけ方は、一通りではない¹⁾。しかし、図2(b)や図3(b)のように、完全格子の格子点に原子を並べてトポロジカルに同等になるように原子をつなぐ方法を一つだけみつけ、その格子点の位置rを使って番号づけを行うようにすればよい。rと§1のrとは、格子定数の因子だけちがうにすぎない。R空間でのtight-binding方程式とr空間での方程式を、それぞれ

$$E \tilde{C}(R) = T \sum_{R'} \tilde{C}(R') \quad (2.1a)$$

$$E C(r) = T \sum_{r'} C(r') \quad (2.1b)$$



と書くことにする。ここに、R空間の点Rがr空間の点rに対応するとして、 $\tilde{C}(R) = C(r(R))$ である。この二つの式の間関係は、(1.3)と(1.2)の間関係と同等でR \leftrightarrow rの変数変換によって互いに換わり合うものである。rが図2(b)のA点の位置を表わす場合を除き、(2.1b)は、完全格子中の方程式と同形である。また、この式は、スクリュエー転位の場合には、すべての点で完全格子中の方程式と同形である。ただし、エッジ型の転位の場合、図2(b)の長いボンドをはさんで隣り合う格子点に対し、r-r'が完全格子の2倍になっており、また、図3(b)の斜のボンドでは、r-r'が各成分をもつところが完全格子とはちがう。これらの'長いボンド'や'斜のボンド'をanomalous bond, anomalous bondの端点となる格子点をanomalous siteと呼ぶことにする²⁾。残りのボンドや格子点をnormal bond, normal siteと呼

ぶ。すると、 r -空間では、各原子は完全格子の格子点に位置するが、特に normal site では、その周囲の格子点とのつながり方も完全格子と同じである。したがって、(2.1b) は normal site については完全格子中の方程式と完全に同等である。anomalous bond の存在を定式化するには、少し工夫が必要である。

スクリュ-転位の場合を考えよう。 r が図3(b)のA点の位置 r_A になるとき、(2.1b)の右辺に $C(r_0)$ という項が現われる。ところで転位軸に沿っては並進対称性が残っているから、 $C(r_0) = \exp(-ik_z b) C(r_c)$ と書ける。ここに k_z は z 方向の波動ベクトル、 b はBurgers vectorで z 方向の一格子間隔に等しい。このことから、anomalous siteに達した電子は、anomalous bondではなく点線で示したボンドを通過し、ただしこのボンドを越すとき、波動関数には $\exp(\pm ik_z b)$ という因子がかかるものと考えればよいことになる。(2.1b)の差分方程式は、完全格子中での分散式を $E = e(k)$ として、

$$E C(r) = e(-i\nabla_r) C(r) \quad (2.2)$$

と書ける。そこで、スクリュ-型転位空間中の電子の波動関数は

$$C(x>0, y=0+) = \exp(ik_z b) C(x>0, y=0-) \quad (2.3)$$

という付帯条件のもとで(2.2)を解いて求まる。³⁾

§3 半導体電子に対するスクリュ-型転位の影響

これまでの議論では、原子中の電子状態が一個であるとみなしてきたが、ここでは、ずっと複雑に、例えばダイヤモンド構造をとるSiやGeのような物質中の電子のバンドをtight-binding近似で計算することを想像してみる。こうするのは、好んで問題を複雑に設定しようという意図からではなく、このような一般の場合でも、実は(2.2)および(2.3)のような簡単な問題に帰着するということを示すためである。

これらの物質は、空間格子としてはfcc格子で、その一つの基底に2個の原子がある。各基底のオ-の原子の位置を R とし、このベクトルを基底を区別する番号としても使うことにする。また、この基底のオニの原子の位置を $R+d_0$ と書く。転位があるとき、 d_0 は R の関数であるが、しばらくは、完全格子中の電子の議論をすることにして、これを定数ベクトルとする。各原子には、 s, p_x, p_y, p_z の四つの電子状態があるとして、それらに対するtight-binding係数を $C_\mu^{(1)}(R), C_\mu^{(2)}(R)$ とする。下ツキの μ は、 s, p_x, p_y, p_z を表し、上ツキの(1)と(2)は、基底 R のオ-およびオニの原子に関するものである。また、 $C^{(l)}(R) (l=1, 2)$ は $C_\mu^{(l)}(R)$ を μ 番目の要素とするような四元ベクトルであるとする。

すると、tight-binding方程式は次のようになる。

$$E C^{(1)}(R) = \sum_j H^{(1,1)}(d_j^{(1)}) C^{(1)}(R+d_j^{(1)}-d_0) + \sum_j H^{(1,2)}(e_j) C^{(1)}(R+e_j) \quad (3.1a)$$

$$E C^{(2)}(R) = \sum_j H^{(2,1)}(d_j^{(2)}) C^{(2)}(R+d_j^{(2)}+d_0) + \sum_j H^{(2,2)}(e_j) C^{(2)}(R+e_j) \quad (3.1b)$$

ここで、 $d_j^{(i)}$ ($j=1,2,3,4$) は基底に属する i 番目の原子から、その j 番目の最隣接格子点の位置まで引いたベクトル、 e_j ($j=1\sim 12$) は、ある原子から j 番目の次隣接格子点まで引いたベクトルである。 $H^{(i,j)}$ は、4行4列の行列である。右辺の量を R のまわりで Taylor 展開して、これを

$$E C(R) = H(\{-i d_j^{(i)} \cdot \nabla_R\}, \{-i e_j \cdot \nabla_R\}) C(R) \quad (3.2)$$

と書くことにしよう。ここで $C(R) = \begin{pmatrix} C^{(1)}(R) \\ C^{(2)}(R) \end{pmatrix}$ は、8個の要素をもつベクトルで、 H は、8行8列の行列である。

完全格子中のエネルギーバンドは、この式に $C(R) = \exp(i p \cdot R)$ を代入し、 $U(p)$ を $H(\{p \cdot d_j\}, \{p \cdot e_j\})$ を対角化するユニタリ行列として、

$$E = U^{-1}(p) H(\{p \cdot d_j\}, \{p \cdot e_j\}) U(p) = e_d(p) \quad (3.3)$$

によって求められる。ここに e_d は対角行列である。

転位が入って結晶が歪むと、上に出てきた $d_j^{(i)}$ や e_j は場所の関数となる。歪んだ格子中でのこれらの量に $\hat{}$ をつけることにすると、転位を含む結晶中の Schrödinger 方程式は、(3.2)の代わりに

$$E \tilde{C}(R) = H(\{-i \hat{d}_j^{(i)}(R) \cdot \nabla_R\}, \{-i \hat{e}_j(R) \cdot \nabla_R\}) \tilde{C}(R) \quad (3.4)$$

となる。ここで、 H の関数形は、格子が歪みを受けても不変であるとしている。これは、§2のスクリュウ転位のように、ダングリンクボンドのない転位なら許される。

ここで、次のような変数変換を行う。⁴⁾

$$r = R - u(R) \quad (3.5)$$

ここに $u(R)$ は、転位による原子の変位を表す。通常は⁵⁾、完全結晶中で r にあった原子が歪みによって $u(r)$ だけ変位して新しい位置 R に来るとみなして、 $R = r + u(r)$ と書くが、(3.5)はこの逆変換である。すなわち、 R -空間で転位を含む格子点上に分布している原子が r -空間では、完全格子の格子点上に分布することになり、(3.5)は、前節の $R \rightarrow r$ の変換と全く同じものである。

したがって、変換後 normal site に来る原子に対して (3.4) は

$$E C(r) = H(\{-i d_j^{(i)} \cdot \nabla_r\}, \{-i e_j \cdot \nabla_r\}) C(r) \quad (3.6)$$

に変換される。これは、完全格子中の電子に対する方程式(3.2)と全く同じ型をしている。この式で $d_j^{(i)}$ や e_j は、 r には依存しないから、前述の $U(p)$ で p を $-i \nabla_r$ に置き換えた演算子 $U(-i \nabla_r)$ を使って、(3.6)の H を対角化できて、

$$E C_d(r) = e_d(-i \nabla_r) C_d(r) \quad (3.7)$$

が出る。ただし、 $C_d(r) = U^{-1}(-i \nabla_r) C(r)$ である。また、anomalous bond の存在

は、再び $C(x>0, y=0+, z) = \exp(ik_z b) C(x>0, y=0-, z)$ で定式化でき、それより、

$$C_d(x>0, y=0+, z) = \exp(ik_z b) C_d(x>0, y=0-, z) \quad (3.8)$$

(3.7)の右辺の行列 E_d が対角行列であることから、この式は C_d の各成分毎の式に decouple 出来る。また、(3.8)も C_d の各成分に対する条件となる。したがって、この節で考えてきたようなバンドが多数ある物質中でも、解くべき方程式とそれに対する付帯条件は、バンドが一つの場合と全く同じものになり、バンド間遷移が起こらないことが分かる。したがって、以下では、再びバンドが一つの場合にもとって議論する。

§4 ゲージ場理論

r-空間での式(2.2)において、(3.5)から得られる式 $dr = (1 - \epsilon(R)) \cdot dR$ を代入すると

$$[E - e((1 - \epsilon(R))^{-1} \cdot \nabla_R)] \tilde{C}(R) = 0 \quad (4.1)$$

が出る。ここに、 $\epsilon(R)$ は distortion tensor であって、 $\epsilon_{ij} = \partial u_i / \partial R_j$ を意味する。Screw 転位では、転位軸を z 軸に選ぶと、 ϵ の成分のうち ϵ_{xz} と ϵ_{yz} のみが 0 でない値をもつ。したがって、 $\epsilon \cdot \epsilon = 0$ となり、これより、 $(1 - \epsilon)^{-1} = 1 + \epsilon$ としてよいことになる。また、これらの成分に対する弾性論的表式は、

$$\epsilon_{xz} = -b \sin \theta / 2\pi c, \quad \epsilon_{yz} = b \cos \theta / 2\pi c \quad (4.2)$$

である。以上のことを $e = \hbar^2 p^2 / 2m$ の場合に使うと(4.1)から

$$\left[\left(\frac{\partial}{\partial x} - ik_z b \frac{\sin \theta}{2\pi c R} \right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial y} + ik_z b \frac{\cos \theta}{2\pi c R} \right)^2 + k_z^2 \right] C(x, y) = 0 \quad (4.3)$$

が出る。⁶⁾ここで、すでに $\tilde{C}(R) = \exp(ik_z z) C_\perp(x, y)$ となることを使い、 C_\perp の添字の 'L' は省略した。これは、 $A = (c/e)(k_z b / 2\pi c R) e_\theta$ というゲージ場中の電子に対する Schrödinger 方程式であり、この方程式で $k_z b = e\Phi_0 / c$ (Φ : magnetic flux) とおくと Aharonov-Bohm 方程式⁷⁾になる。同じ、ゲージ場の表式を使って(4.1)を

$$[E - e(\nabla_R - \frac{ie}{c} A(R))] \tilde{C}(R) = 0 \quad (4.4)$$

と書こう。この方程式は、ゲージ変換

$$A \rightarrow A' = A + \nabla \chi \quad \tilde{C} \rightarrow C' = \exp\left(\frac{ie}{c} \int^R \nabla \chi \cdot d\mathbf{l}\right) \tilde{C}(R) \quad (4.5)$$

に関して不変になっている。また、(4.4)からゲージ場を消すためには、変換

$$\tilde{C}(R) = \exp\left[\frac{ie}{c} \int^R A \cdot d\mathbf{l}\right] C(R) = \exp(i\theta k_z b / 2\pi c) C(R) \quad (4.6)$$

を行えばよい。⁸⁾

一般の型の転位の場合、 $A = (I - \epsilon)^{-1} \cdot \epsilon \cdot \nabla_R$ というように operator の形にゲ-

ジ場を拡張してみる。しかし、 ∇_R と \mathcal{E} が交換しないために、(4.5)のようなゲージ変換に対して(4.4)は不変ではなくなる。したがって、このような A がゲージ場であるという Teichler⁹⁾の主張には賛成出来ない。しかし、変換

$$\tilde{C}(R) = \lim_{R' \rightarrow R} \exp[-(\int^{R'} dR'' \mathcal{E}(R'') \cdot \nabla_{R''})] C(R') \quad (4.7)$$

によって、(4.1)からゲージ場が消去出来るという点に関しては、(4.6)を拡張出来る。

(4.1)からゲージ場を消去した方程式は、前の二つの節の R -空間での方程式に他ならないから、(4.7)は、軌位空間から完全格子への座標変換をしたことに相当する。いま、(4.7)の積分の下限として、 $R_0 = (x > 0, y = -0, z)$ をとり、積分路は軌位軸を一周するように選ぶ。 $R = (x > 0, y = +0, z)$ のとき、

$$\int_{R_0}^R dL \cdot \mathcal{E} = b$$

と使うと、 $\tilde{C}(R_0) = C(R_0)$ $\tilde{C}(R) = C(R - b)$ が出る。ここに、 b は Burgers vector である。 $\tilde{C}(R_0) = \tilde{C}(R)$ より

$$C(x > 0, y = -0, z) = C(x - b_x, y = -b_y + 0, z - b_z) \quad (4.8)$$

という要請が出る⁹⁾。これは、(2.3)を拡張したものである。

§5 Akronov-Bohm 方程式の散乱解

最後に、付帯条件(2.3)のついた方程式(2.2)の散乱解を求める手順とその結果について簡単に議論する。一般のエネルギー・スペクトルの場合については数値解を求める^{10,11)}しかないので、ここでは、

$$e(p) = \frac{1}{2} \gamma_{xx} p_x^2 + \gamma_{xy} p_x p_y + \frac{1}{2} \gamma_{yy} p_y^2 \quad (5.1)$$

という場合に限る。また、この式の右辺は正定値であるとしておく。等方的なスペクトルの場合については、すでに筆者らにより解かれている⁹⁾から、その議論に従えばよい。まず、 $C(r)$ を Kirchhoff-Heygens の形¹²⁾で

$$C(r) = \exp(i p \cdot r) - \frac{i}{2} (e^{i k_0 b} - 1) \int_{-\infty}^{\infty} dx' [G(r-r') \psi_y(\nabla') - C(r') \psi_y(\nabla') G(r-r')]_{y=0-} \quad (5.2)$$

と書く。ここに、 $\psi_m(\nabla) = \gamma_{m0} (-i \nabla_y) / \hbar$ は群速度の演算子で ∇' は r' に関する微分、 ∇' は左側に作用することを意味する。 $G(r-r')$ は

$$(E - e(-i \nabla)) G(r-r') = \delta(r-r') \quad (5.3)$$

で定義されるグリーン関数である。入射粒子の群速度は xz 面内にあるとして、

$$C(x > 0, y = -0) = C_1 \exp(i p_x x) + O(1/x) \quad (5.4a)$$

$$\psi_y C |_{x > 0, y = -0} = C_2 \exp(i p_x x) \sqrt{\gamma_{xx} \gamma_{yy} - \gamma_{xy}^2} \sqrt{|p_x| / 2\pi x} + O(1/x) \quad (5.4b)$$

という形を仮定する。ただし、 p_x は入射波の波動ベクトルの x -成分である。すると、(5.2) で $r = (x, y = -0)$ とおいて得られる積分方程式は解けて、

$$C_1 = \exp(-i\frac{1}{2}k_z b) \cos(\frac{1}{2}k_z b) \quad (5.5a)$$

$$C_2 = 2 \cdot \exp(-i(\frac{1}{2}k_z b + \frac{3\pi}{4})) \sin(\frac{1}{2}k_z b) \quad (5.5b)$$

となる。一般の r に対する $C(r)$ の値は (5.4 a, b) と (5.5 a, b) を (5.2) の右辺に代入して、文献3と同様に求められる。なお、(5.1) の右辺が真定値のときの解は、(5.4a, b) の右辺の p_x を $-p_x$ で、(5.5b) の右辺の $3\pi/4$ を $\pi/4$ で置き換えたものになる。

これらの散乱解の振舞いのうちもっとも特徴的なことは影の存在である。すなわち、 x -軸上での波動関数の振幅が (5.4a) と (5.5a) からわかるように、1より小さいという事実である。特に、 $k_z b = \pi$ のとき、この値は0になる。さらに、この振舞いは質量の符号や非等方性にもよらないことを注意しておく。

§3で考えた半導体の場合、II-VI compound や III-V compound では、伝導帯の底も価電子帯のトップも Γ -点にあり $k_z b \ll 1$ としてよく、この解の面白味は出てこない。Si と Ge でも、価電子帯中の正孔については同様であるが、これらの物質では伝導帯の底がオーブリエアン域の境界付近にあり、 $\langle 110 \rangle$ -スクリュエー方位に好しては、どちらも共に $k_z b \approx \pi$ となる。したがって、Si と Ge の伝導電子をうまく使えば、散乱解のこのような特徴的な振舞いが観察出来るであろう。

文献

- 1) 川村清 数理科学 20 (1982) No. 9, 28.
- 2) K. Kawamura, Z. Physik B30 (1978), 1.
- 3) K. Kawamura, Y. Zempo, and Y. Irie, Prog. Theor. Phys. 67 (1982), 1263
- 4) R.A. Brown, J. Phys. F. Metal Phys. 9 (1979) L241
- 5) L.D. Landau and E.M. Lifshitz, Theory of Elasticity, Pergamon Press, Oxford, 1970
- 6) K. Kawamura, Z. Physik B29 (1978), 101.
- 7) Y. Aharonov and D. Bohm, Phys. Rev. 115 (1959), 485.
- 8) H. Teichler, Phys. Letters 87A (1981), 113.
- 9) Y. Irie and K. Kawamura, Prog. Theor. Phys. 投稿中
- 10) Y. Yosida and K. Kawamura, Z. Physik B32 (1979), 355.
- 11) K. Kawamura, Z. Physik B48 (1982), 201.
- 12) 石黒浩三 光学, 共立出版