

dislocation や dislocation を幾何学的に如何にとらえるかについては、1950年代から Kondo, Bilby, Kröner が議論している [1-3] ので紹介しよう。図

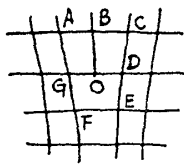


図1

1は dislocation を含む格子の例である。一点Oを除いては、各格子点は4つ角になっているので、localには完全結晶(規則格子)と同じトポロジ的性質をもつ。ここに一匹の蟻が居て、Aから出発して、 $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow E \rightarrow F \rightarrow G$ の順に歩き再びAに戻ったとしよう。蟻は local なトポロジカルな構造しか見ることはでき

ないと思えば、蟻は、それぞれの格子点と規則格子の中の四つ角であると認識し、図2のような規則格子の中を $A' \rightarrow B' \rightarrow C' \rightarrow D' \rightarrow E' \rightarrow F' \rightarrow G'$ の順に歩いたものと思込む。図2のような格子は、図1の道 $A \rightarrow \dots \rightarrow G$ において、それぞれの格子点で歪んでいる軸を直して直交軸にしてつなげてゆくことによって得られる。道の最終点が出発点Aに対応する A' にならずに B' になってしまうことから明らかなように、

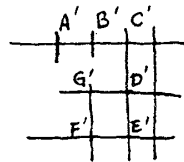


図2

図1の格子と global に図2の規則格子に対応させることができない。図3は disclination の場合である。この場合も、一点Oを除いて、各格子点は四つ角となっている。

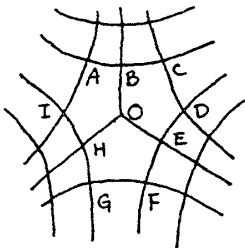


図3

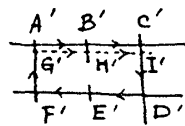


図4

従って蟻が図3の格子の上を $A \rightarrow B \rightarrow C \rightarrow D \rightarrow E \rightarrow F \rightarrow G \rightarrow H \rightarrow I$ の順に歩いたとすると、蟻自身は図4のような道を歩いたと思うであろう。disclination の場合も、図3のような歪んだ格子と規則格子とが同様の global な対応はない。disclination の著しい特徴は、ベクトルの平行移動に関するものである。図5のように一点Aに或るベクトル $\vec{u}$ があるとする。となりのBにおいて同じ格子軸に沿うものと平行と定義する。このようにして点Aにお

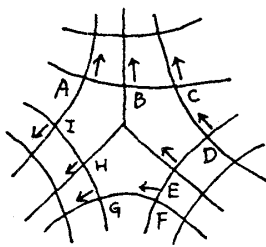


図5

けるベクトルを道 $A \rightarrow \dots \rightarrow I$ に沿って平行移動していくと、一周してAに戻ると、ベクトルが反転していることがわかる。このように格子軸が回転することが disclination の特徴である。

このような欠陥を含む媒質を微分幾何学を用いて記述するために、格子と連続体で置換え、連続体の各点 P にその点における格子軸 $\hat{e}_i(P)$ が存在すると思える。この格子軸は本来直交する単位ベクトル $\hat{u}_i$ であつたものが格子の変形によ

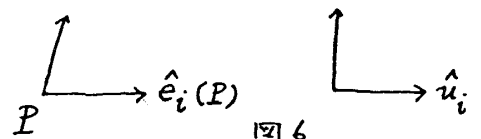


図6

て歪んだものである。いま,

$$\hat{u}_i = W_{ij}(P) \hat{e}_j(P) \quad (1)$$

なる関係があるとする。 $W_{ij}(P)$ は正則行列であるから,

$$W_{ij}(P) = U_{ik}(\vec{x}) R_{kj}(P) \quad (2)$$

と分解できる。ここで $U_{ik}(\vec{x})$ は対称行列で、点 P の座標 $\vec{x}$ の一価関数である。

$R_{kj}(P)$ は直交行列であって格子軸 $\hat{e}_i$ の回転を表わす。前に見たように、格子軸の回転は径路のとり方によるので $R_{kj}(P)$ は座標 $\vec{x}$ の多価関数である。 $R_{kj}(\vec{x})$ と書くことに $R_{kj}(P)$ と書いたのはそれと区別するためである。点 P (座標 $\vec{x}$) の近傍の点 $Q(\vec{x}+d\vec{x})$ に動いたときに直交行列 $R_{ik}(P)$ の変化は

$$dR_{ik} = dx^j K_{jin}(\vec{x}) R_{nk}(P) \quad (3)$$

で与えられるとする。ここで $K_{jin}(\vec{x})$ は座標 $\vec{x}$ の一価関数であるとする。また、 $d\vec{x} = dx^j \hat{u}_j$ 。格子軸が $\vec{x}$ から $\vec{x}+d\vec{x}$ に動いたときにどれだけ変化するのを見るために、

$$\hat{e}_i(Q) - \hat{e}_i(P) \equiv d\hat{e}_i \equiv de_i^j \hat{u}_j \quad (4)$$

$$\hat{e}_i(P) \equiv e_i^j(P) \hat{u}_j \quad (5)$$

によつて de_i^j , $e_i^j(P)$ を定義し、(1)~(3)の式を用いると、

$$de_j^i = -\Gamma_{mk}^i(\vec{x}) e_j^k(P) dx^m \quad (6)$$

と表わされる。ここで

$$\Gamma_{mk}^i(\vec{x}) \equiv U_{mk}(\vec{x}) K_{mnl}(\vec{x}) U_{li}^{-1}(\vec{x}) + \frac{\partial U_{nk}(\vec{x})}{\partial x^m} U_{ni}^{-1}(\vec{x}) \quad (7)$$

である。この接続の係数 $\Gamma_{mk}^i(\vec{x})$ を用いて曲率テンソル $R_{jkl}^i(\vec{x})$ を計算すると、

$$\begin{aligned} R_{jkl}^i(\vec{x}) &\equiv \frac{\partial}{\partial x^k} \Gamma_{lj}^i(\vec{x}) - \frac{\partial}{\partial x^l} \Gamma_{kj}^i(\vec{x}) + \Gamma_{lj}^a(\vec{x}) \Gamma_{ka}^i(\vec{x}) - \Gamma_{kj}^a(\vec{x}) \Gamma_{la}^i(\vec{x}) \\ &= U_{mj} \left[\frac{\partial K_{lmp}(\vec{x})}{\partial x^k} - \frac{\partial K_{kmp}(\vec{x})}{\partial x^l} + K_{lmp}(\vec{x}) K_{knp}(\vec{x}) - K_{kmp}(\vec{x}) K_{lnp}(\vec{x}) \right] \\ &\quad \times U_{pi}^{-1}(\vec{x}), \end{aligned} \quad (8)$$

すなわち、曲率は回転を表わす直交行列 R_{ik} の変化と関係していることがわかる。

このような空間における拡散過程は Ikeda-Watanabe^[4] で論じられている。物理的に解釈すると次のようになる。歪んだ格子の中で蟻が (random walker が) $d\vec{x}$ だけ動いたとする。それを local な歪んだ格子軸で表わしにものを $d\vec{\xi}^i$ とする。すなわち

$$d\vec{x} = dx^i \hat{u}_i = d\vec{\xi}^i \hat{e}_i(P). \quad (9)$$

ところがこの蟻は、この歪んだ格子軸を本来の規則格子の軸 $\hat{u}_i$ とみているのであるから、 $d\vec{\xi}^i \hat{u}_i$ だけ規則格子の中で動いたかの如くに振舞うのである。一方、規則格子の中の拡散は

$$\frac{d\vec{\xi}^i}{dt} = R^i(t) \quad (10)$$

と表わされ、 $R^i(t)$ は Gaussian white noise $\langle R^i(t) R^j(t') \rangle = 2D \delta(t-t') \delta_{ij}$ である。
時刻 t で状態が居る場所 P における $e_j^i(P)$ を $e_j^i(t)$ と表わすと、

$$\begin{cases} \frac{dx^i(t)}{dt} = e_j^i(t) \cdot R^j(t) \\ \frac{de_j^i(t)}{dt} = -\Gamma_{mk}^i(\vec{x}(t)) e_j^k(t) \frac{dx^m(t)}{dt} \end{cases} \quad (11)$$

が得られる。 $\vec{x}(0)$ を与えられ、 $t=0$ から、短い時間について積分し、 $R^i(t)$ について平均をとると、

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} \langle x^i(t) - x^i(0) \rangle_{\vec{x}(0)} = -g^{mk}(\vec{x}(0)) \Gamma_{mk}^i(\vec{x}(0)) \cdot D \quad (12)$$

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{t} \langle [x^i(t) - x^i(0)] [x^j(t) - x^j(0)] \rangle_{\vec{x}(0)} = 2D g^{ij}(\vec{x}(0)) \quad (13)$$

となる。ここで $g^{ij}(\vec{x}) = e_j^i(P) e_i^j(P) = U_{ie}^{-1}(\vec{x}) U_{je}^{-1}(\vec{x})$ 。従って Fokker-Planck 方程式は

$$\frac{\partial}{\partial t} P(\vec{x}, t) = D \left[\frac{\partial}{\partial x^k} g^{ij}(\vec{x}) \Gamma_{ij}^k(\vec{x}) + \frac{\partial^2}{\partial x^i \partial x^j} g^{ij}(\vec{x}) \right] P(\vec{x}, t) \quad (14)$$

となる。これが Ikeda-Watanabe の結果である。この基本解を経路積分であらわすと

$$P(\vec{x}t | \vec{x}_0 t_0) = \int_{\vec{x}(t_0)=\vec{x}_0}^{\vec{x}(t)=\vec{x}} \mathcal{D}(\vec{x}) \int \mathcal{D}(\vec{q}) \exp \left[i \int_{t_0}^t d\tau q_k(\tau) \dot{x}^k(\tau) \right. \\ \left. + D \int_{t_0}^t d\tau \left\{ i q_k(\tau) g^{ij}(\vec{x}(\tau)) \Gamma_{ij}^k(\vec{x}(\tau)) - q_i(\tau) q_j(\tau) g^{ij}(\vec{x}(\tau)) \right\} \right] \quad (15)$$

となる。 $\vec{q}(\tau)$ についての積分を行えば、

$$P(\vec{x}t | \vec{x}_0 t_0) = \int_{\vec{x}(t_0)=\vec{x}_0}^{\vec{x}(t)=\vec{x}} \mathcal{D}(\vec{x}) \prod_{t_0 < \tau \leq t} \sqrt{g(\vec{x}(\tau))} \\ \times \exp \left[-\frac{1}{4D} \int_{t_0}^t d\tau g_{km}(\vec{x}(\tau)) \left\{ \dot{x}^k(\tau) + D g^{ij}(\vec{x}(\tau)) \Gamma_{ij}^k(\vec{x}(\tau)) \right\} \right. \\ \left. \times \left\{ \dot{x}^m(\tau) + D g^{ij}(\vec{x}(\tau)) \Gamma_{ij}^m(\vec{x}(\tau)) \right\} \right] \quad (16)$$

となる。

例として図3のような二次元平面を考えよう。平面の各点 (x, y) において、

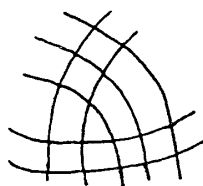
$$K_{112} = \alpha \cdot \frac{-y}{x^2 + y^2}, \quad K_{212} = \alpha \cdot \frac{x}{x^2 + y^2} \quad [x^1 = x, x^2 = y] \quad (17)$$

とする。このとき $R_{ij} = \begin{bmatrix} \cos(\alpha\theta) & \sin(\alpha\theta) \\ -\sin(\alpha\theta) & \cos(\alpha\theta) \end{bmatrix}$, 従って $x = r \cos \theta, y = r \sin \theta$ 。

従って $\alpha > 0$ の場合が図3の場合になる。Fokker-Planck 方程式 (14) は

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, y, t) = -\alpha D \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{x}{x^2+y^2} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{y}{x^2+y^2} \right) P(x, y, t) + \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) P(x, y, t) \quad (18)$$

となり、変位の自乗平均を求めると、 $\langle x^2+y^2 \rangle = 4D(1+\frac{\alpha}{2})t$ となる。すなわち図3のような場合は拡散しやすい。一方 $\alpha < 0$ は図8の場合に相当する。一般にこのような曲率中心が random に分布しているとき、拡散がどのようになるかは興味ある問題である。



$\alpha < 0$

図8

次に歪んだ格子における量子波動について考える。

tight binding 近似で $H = \sum_{\langle n, m \rangle} T a_n^\dagger a_m$ なるハミルトニアンが与えられていて、

$\langle n, m \rangle$ は、最近接格子点の対をあらわすとする。また近似として、transfer T は、歪みによる格子点間の距離の変動に依存しないものとする。そうすると、図1や図2で考えにような、それぞれの格子点が規則格子の四つ角であるかのごとく波動が発展するものと考えてよい。しかしこの場合、random force $R^i(t)$ と考え、それに Stratonovich calculus を応用すること[(14)の導出に用いた]は conceptual に釈然としない。従って次のように考えてみる。まず、格子を連続体でおきかえる。これは、tight-binding 模型に対して長波長近似をすることに対応する。従って粒子は有効質量をもつ自由粒子としてふるまうことになる。歪んだ格子(連続体)の中で $d\vec{x}$ だけ粒子が動いたとすると、粒子は(9)で与えられるような $d\xi^i$ だけ local な軸 $\hat{e}_i(\vec{r})$ に沿って動いたのであるから、 $d\xi^i \hat{u}_i$ だけ規則格子の中を動いたかの如くに振舞う。

$$\frac{d\xi^i}{dt} = \frac{dx^j}{dt} W_{ji}(t) = \frac{dx^j}{dt} U_{jk}(x(t)) R_{ki}(t) \quad (19)$$

により、経路 $\vec{x}(\tau)$ [$0 \leq \tau \leq t$] は、規則格子の中の経路 $\vec{\xi}(\tau)$ [$0 \leq \tau \leq t$] に map される。その経路の近傍に $[\vec{x}(\tau) + \delta\vec{x}(\tau), \vec{x}(\tau)]$ という gate を置けば、その gate を通りぬける経路の重みは

$$\prod_{0 \leq \tau \leq t} \delta\vec{\xi}(\tau) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \frac{m}{2} \left(\frac{d\xi^i}{d\tau} \right)^2 \right]$$

で与えられる。ここで gate $[\delta\vec{\xi}(\tau) + \delta\vec{\xi}(\tau), \vec{\xi}(\tau)]$ は、歪んだ連続体における gate を規則格子(連続体)に map したものである。(2)を用いると、

$$\left(\frac{d\xi^i}{d\tau} \right)^2 = g_{ij}(\vec{x}(\tau)) \frac{dx^i}{d\tau} \frac{dx^j}{d\tau} \quad (20)$$

となることがわかる。また、gate の間の変換を

$$\prod_{0 < \tau \leq t} \delta\vec{\xi}(\tau) = J \prod_{0 < \tau \leq t} \delta\vec{x}(\tau) \equiv J \mathcal{D}(\vec{x}) \quad (21)$$

とみると、ヤコビアン J は、行列 $\delta\xi^i(t)/\delta x^j(t')$ の行列式として得られる。実際

$$\delta\xi^i(t) = \delta x^j(t) U_{jk}(x(t)) R_{ki}(t)$$

$$\begin{aligned}
& + \int_0^t d\tau \delta x^j(\tau) \dot{x}^m(\tau) \left[\Gamma_{jm}^p(x(\tau)) - \Gamma_{mj}^p(x(\tau)) \right] U_{pq}(x(\tau)) R_{qi}(\tau) \\
& + \int_0^t d\tau \int_\tau^t dt' \dot{x}^l(t') \dot{x}^m(\tau) \delta x^j(\tau) U_{lk}(x(t')) \Lambda_{kp}(t', \tau) U_{pq}^{-1}(x(\tau)) \\
& \quad \times R_{qj}^r(x(\tau)) U_{rs}(x(\tau)) R_{si}(\tau) \tag{22}
\end{aligned}$$

である。

$$J = \prod_{0 < \tau \leq t} U(x(\tau)) \cdot \exp \left[\int_0^t d\tau \dot{x}^m(\tau) \left\{ \Gamma_{im}^i(x(\tau)) - \Gamma_{mi}^i(x(\tau)) \right\} \right] \tag{23}$$

となる。ここで

$$\Lambda_{kp}(t', \tau) \equiv \left[\exp \int_\tau^{t'} dt'' \dot{x}^j(t'') K_{kj}(x(t'')) \right]_{kp},$$

$$\left[K_{kj}(x) \right]_{kp} \equiv K_{jkp}(x)$$

$$U(x) = \det [U_{jk}(x)]$$

である。従って歪んだ格子における Schrödinger 方程式の基本解は経路積分で

$$\begin{aligned}
G(xt|x_0t_0) &= \int_{x(t_0)=x_0}^{x(t)=x} \mathcal{D}(x) \prod_{0 < \tau \leq t} U(x(\tau)) \\
&\quad \times \exp \left[\int_{t_0}^t d\tau \left\{ \dot{x}^m(\tau) \left[\Gamma_{im}^i(x(\tau)) - \Gamma_{mi}^i(x(\tau)) \right] \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{i}{\hbar} \cdot \frac{m}{2} g_{ij}(x(\tau)) \dot{x}^i(\tau) \dot{x}^j(\tau) \right\} \right]
\end{aligned}$$

という形に表わされることになる。この場合、 $\frac{im}{2\hbar} \in -1/4D$ におよぶときは、どのような拡散過程に相当するのかわからない。上記の公式を転位のある空間における電子状態の計算に応用した結果については [] を参照されたい。

文献

1. 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)
2. B.A. Bilby, Continuous Distribution of Dislocations, Prog. in Solid Mechanics, vol.1 (ed. Sneddon & Hill, NH, 1960)
3. E. Kröner, Continuum Theory of Defects, In Les Houches XXXV (ed. Balian et al, NH, '80)
4. N. Ikeda & S. Watanabe, Stochastic Differential Equations and Diffusion Processes (NH, 1981).
5. F. Yonezawa & T. Ninomiya (eds), Topological Disorder in Condensed Matter (Springer, 1983).