

格子欠陥のトポロジー

東工大・理 北 原 和 夫

格子欠陥の中でトポロジカルな乱れをもつものとして、転位、回位がある。転位の例としてらせん転位を図1に示す。AからBに行くのに

$A \rightarrow C \rightarrow B$ と進むのと $A \rightarrow D \rightarrow E \rightarrow$

Bと行くのでは段差ができるという

のが特徴である。この段差を Burg-

ers ベクトルという ($\vec{BE}$ であらわ

す)。回位は図2に示すように一周

すると軸の方向がずれるものを言う。

このような欠陥を微分幾何のことば

で表わしてみる。

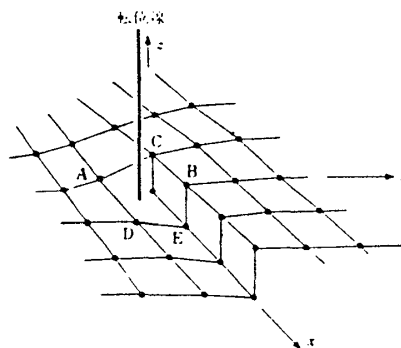
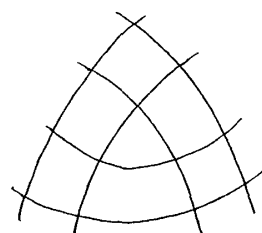


図1 らせん転位

図2 回位 ($\phi < 0$)

局所的な結晶軸を $\vec{e}_i(x)$ とする。結晶のひずみにより、必ずしも直交しておらず、また長さもかわっている。その内積を

$$(\vec{e}_i \cdot \vec{e}_j) = g_{ij}(x) \quad (1)$$

とする。デカルト座標軸 $\vec{u}_i$ との間に

$$\vec{u}_j(x) = \vec{e}_i(x) W_{ij}(x) \quad (2)$$

という関係があるとする。行列 $w_{ij}(x)$ は正則であるから

$$W_{ij}(x) = U_{ik}(x) R_{kj}(x) \quad (3)$$

と書ける。 $U_{ik}(x)$ は対称行列で x の一価関数であるが、 $R_{kj}(x)$ は直交行列で必ずしも一価ではない。 $R_{kj}(x)$ の変化に対して

$$d R_{ik} = dx_j K_{jin}(x) R_{nk}(x) \quad (4)$$

とおき、 $K_{jin}(x)$ は x の一価関数とする。たとえば、回位を表わすとする、今、回位の中心を (x, y) 平面の原点 $(0, 0)$ として、 $x_1 = x$, $x_2 = y$ とおき

$$K_{112} = \left(\frac{\phi}{2\pi}\right) \frac{-y}{x^2 + y^2}, \quad K_{212} = \left(\frac{\phi}{2\pi}\right) \frac{x}{x^2 + y^2} \quad (5)$$

とおくと、

$$R_{jk} = \begin{bmatrix} \cos\left(\frac{\phi}{2\pi}\theta\right) & \sin\left(\frac{\phi}{2\pi}\theta\right) \\ -\sin\left(\frac{\phi}{2\pi}\theta\right) & \cos\left(\frac{\phi}{2\pi}\theta\right) \end{bmatrix} \quad (6)$$

となる。ただし $x_1 = r \cos \theta$, $x_2 = r \sin \theta$ とおいた。 $\phi < 0$, $\phi > 0$ はそれぞれ図2, 図3の状況に対応する。このような媒質の中の拡散は次のようにして評価できる。今, 粒子が $d\vec{x}$, $dx_i \vec{u}_i$ だけ変位したとする。これを局所的な結晶軸でみると $d\xi_i \vec{e}_i = dx_i \vec{u}_i$ とする。

$$\therefore d\xi_i = dx_j W_{ij} \quad (W^{-1})_{ij} d\xi_j = dx_i \quad (7)$$

ところが粒子は結晶軸に沿って等方的にランダムウォークをするものとする,

$$\frac{d\xi_j}{dt} = R_j(t) \quad (8)$$

という Langevin 方程式がなりたつ。ここで, $R_j(t)$ はガウス白色過程で

$$\langle R_i(t) R_j(t') \rangle = 2D \delta_{ij} \delta(t-t'). \quad (9)$$

よって,

$$\frac{dx_i}{dt} = [W^{-1}(t)]_{ij} R_j(t) \quad (10)$$

また,

$$\frac{d}{dt} [W^{-1}(t)]_{ij} = -\Gamma_{mk}^i(x) [W^{-1}(t)]_{kj} \frac{dx_m}{dt} \quad (11)$$

$$\Gamma_{mk}^i(x) = U_{nk} K_{mnl} [U^{-1}]_{li} + \frac{\partial U_{nk}}{\partial x_m} [U^{-1}]_{ni} \quad (12)$$

これより, x の確率分布 $P(x, t)$ に対して,

$$\frac{\partial}{\partial t} P(x, t) = D \left[\frac{\partial}{\partial x_k} g^{ij} \Gamma_{ij}^k + \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} g^{ij} \right] P(x, t) \quad (13)$$

が得られる [Ikeda-Watanabe] ⁽¹⁾。ここで

$$g^{ij} = (W^{-1})_{ki} (W^{-1})_{kj} = U_{ik}^{-1} U_{jk}^{-1} \quad (14)$$

今, 回位が1つだけの場合を考える。また $U_{ij} = \delta_{ij}$ とすると,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} P(x, y, t) = & -D \left(\frac{\phi}{2\pi} \right) \left(\frac{\partial}{\partial x} \frac{x}{x^2 + y^2} + \frac{\partial}{\partial y} \frac{y}{x^2 + y^2} \right) P(x, y, t) \\ & + D \Delta P(x, y, t) \end{aligned} \quad (15)$$

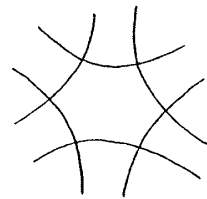


図3 回位 ($\phi > 0$)

となる。これは丁度 $V(x, y) = -\frac{\phi}{4\pi} \log(x^2 + y^2)$ というポテンシャル場の中の拡散に相当する。⁽²⁾

このように、座標軸の回転まで入れると、線状欠陥を表現することができる。

また、このような空間における量子力学の波動の記述も可能となる。⁽³⁾

さらに、面白い話題として、転位の運動に対して Dirac の拘束条件の方法⁽⁴⁾が使えることを示す。転位の運動をあらわす模型として Frenkel-Kontrova 模型⁽⁵⁾がある。これに転位の運動という自由度を加えると、原子の個別的運動 (phonon) と転位 (集団運動) は独立でなく拘束条件を生じる。これに Dirac の方法を用いると、自然の形で転位の運動方程式が導かれる。⁽⁶⁾

- (1) N. Ikeda and S. Watanabe, Stochastic Differential Equations and Diffusion Processes (North Holland, Amsterdam 1981).
- (2) K. Kitahara, H. Araki and K. Nakazato, Dislocations in Solids (Yamada Science Foundation, Univ. Tokyo, Press, 1985), 117.
- (3) K. Kitahara, K. Nakazato, H. Araki, Proc. Int. Symp. Foundations of Quantum Mechanics (Ed. S. Kamefuchi, Phys. Soc. Japan, 1984) 59.
- (4) P. A. M. Dirac, Can. J. Math. 2 (1950) 129.
- (5) T. Ninomiya, Treatise on Materials Science and Technology 8 (1975).
- (6) 北原, 大畠 1985 年物理学会 (秋, 千葉大学) で発表. 論文準備中. 1987 年 Illinois 大学物理学科における議事録 (Non-equilibrium Statistical Physics) に詳細に述べてあります.

確率過程量子化法とカイラル・アノーマリー

早大・理工 田 中 覚

確率過程量子化法 (Stochastic Quantization Method, 以下 SQM) においてカイラル・アノーマリーを導く試みはすでにいくつかあり、一応、正しいカイラル・アノーマリーが得られることがわかっていく。しかし、古典論のどこが修正されてカイラル・アノーマリーが出現するのかについては、これまで曖昧なままであった。そこで経路積分量子化法においてカイラル変換のヤコビアンからカイラル・アノーマリーが出現するということがはっきりしているように、SQM においてもカイラル・アノーマリーの起源を明確にしようというのが、この研究¹⁾の主旨である。

作用

$$S = \int dx \bar{\phi}(x) [-i \not{D} + m] \phi(x) \quad (1)$$

で記述される系を考えよう。