

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 L 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 L より上側の波と下側の波は、転位より右側の L の両側に位相がズレ、その大きさは ρ を波動ベクトルとして、 p_x に比例するということだ。

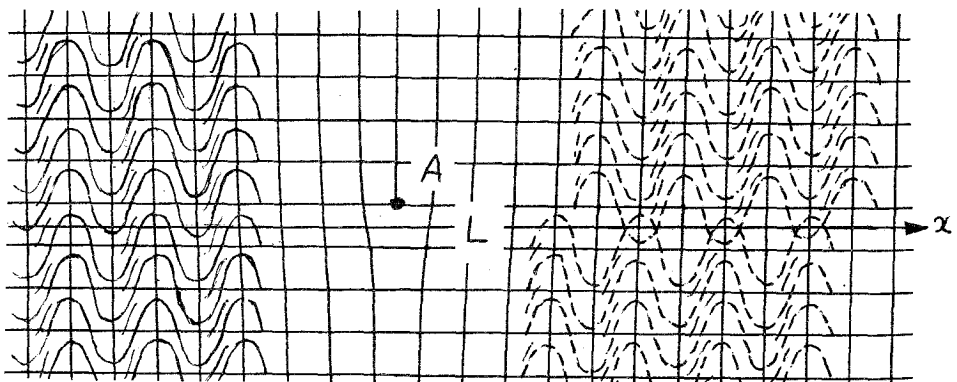


図 1

ある。しかし、波動関数は連続でなくてはならないから、 ψ はジャンプ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 近似を採用するかぎり、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、スクリー型転位の場合であり^{1)~4)}、われわれは、このような散乱を 'phase mismatching 散乱' と名づけた。スクリー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 φ_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えることにして、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るものであり、それに関わる transfer matrix も T だけのであるから、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、それぞれのトポロジー

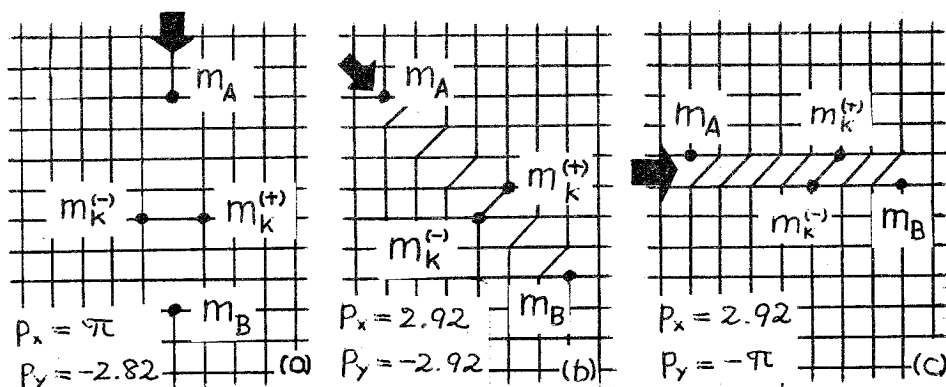


図 2

に対応して、波動ベクトル p の値を選んでゐる。これらの波動ベクトルは、いずれも正方格子のオーフ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、各図に書きこんでゐる。

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-Huygens 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ので、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 が大きくなるにしたがって、0 に近づいていくように見える。実際、この場合、

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

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、そこに回折によってまわ

りにむ入射粒子によってうすまり、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。⁵⁾ 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、 $|C_+(k)|$

は下流へいくほど大きくなり 1 に漸近しているようにみえる。 $C_+(k)$ 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

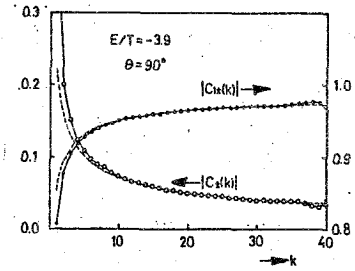
ないが 1 よりかなり小さい値に近づいていく。また $|C_{\pm}(k)|$ は、1 にかん

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、

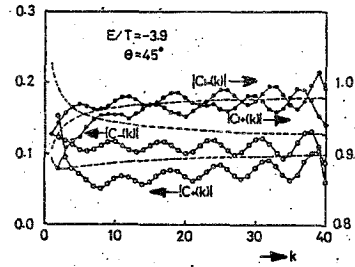
下流側無限遠にまで現われるのである。

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

(a)



(b)



(c)

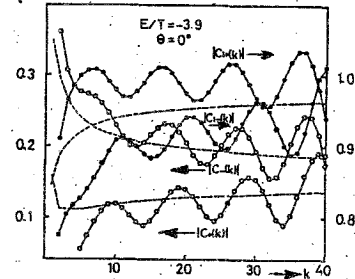


図 3

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、 $\varphi=0$ 近似の議論をしておこう。第1図で上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、 $\exp(ip_x \pm ip_x/2)$ 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、 $\cos(p_x/2) \exp(ip_x)$ 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 $\sin(p_x/2) \exp(ip_x)/\sqrt{x}$ 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 $\cos(p_x/2)$ は完全には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、スクリュウ型転位の場合について見出た^{3), 4)} いた。^{3), 4)} スクリュー型転位の場合、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³⁾、理論的にも⁴⁾ 示されている。

スクリュウ型転位の場合、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

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

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

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

としたときの Aharonov-Bohm 方程式 (AB 方程式) である。⁶⁾ 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 2π 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 2π 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。⁷⁾

ところで, エッジ型転位およびスクリー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。⁸⁾

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くてはならない。オーの問題は, 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 に対するスクリー転位の影響を調べた。⁹⁾ この系の電子は, よく知られているように, オーブリュアン域の大部分でイオンの影響を殆ど受けないが, 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なはたしくずれる。したがって, フリユ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

$$A_{dis} = \frac{c}{e} \frac{G'(p_z)}{2\pi r} \Theta_0 \quad (5)$$

と書ける。 $G'(p_z)$ は、 p_z が π で π になり、また p_z が π からはずれると、 $G'(p_z)$ は急激に 0 または 2π 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、フリエアン域境界上の電子の phase-dismatching は、out-of-phase limit の値 π 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。⁹⁾

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、フリエアン域の $\langle 111 \rangle$ 方向に垂直な六角形の境界面に出来る。われわれの解析によると、この面上の電子が入射した場合、やはり phase-dismatching は π になることが分かった。¹⁰⁾

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へよう。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

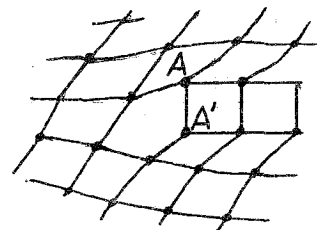


図 4

隣り合うスピンの反平行になるように並べていくと、 A' のスピンと A のスピンは平行になり、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、軌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、軌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、近い将来に公表出来るとおもう。

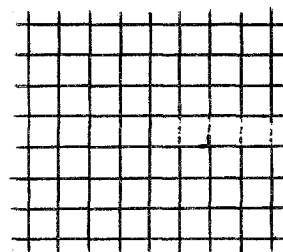


図 5

§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(延大(中国))、吉田裕午(広島市立大中卒)、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 (吉岡書店) 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)