

- 5) J. Hartmann, M. Christel Brand and K. Dose, *BioSystems* **14** (1981), 141.
- 6) S. W. Fox, R. C. McCauley and A. Wood, *Comp. Biochem. Physiol.* **20** (1967), 773; S. W. Fox and K. Dose, *Molecular Evolution and the Origin of Life* (Marcel Dekker, New York, 1977).
- 7) S. W. Fox, *Naturwissenschaften* **67** (1980), 378.
- 8) K. Matsuno, *BioSystems* **13** (1981), 237.
- 9) K. Matsuno, *BioSystem* **14** (1981), 163.
- 10) S. W. Fox, *Int. J. Quantum Chem*, **QBS8** (1981) 印刷中
- 11) K. Matsuno, *Origins Life* **10** (1980), 361.
- 12) K. Matsuno, *BioSystems* **15** (No. 1) (1982) 印刷中

転位のある結晶のリーマン幾何学

静岡大・教養 北 原 和 夫

§ 1 序

結晶中にトポロジカルな乱れが存在するとき、物性はどのように影響されるか、という問題は、最近のアモルファス物質の研究の上で重要になっていると思われる。トポロジカルな乱れの最も単純なものは転位による乱れである(図1)。規則的な結晶では原子の位置(格子点)は3個の整数を指定すると決まり、そのうちの1個が ± 1 だけ変化すると隣の格子点をあらわすことになる。しかしながら転位が存在すると格子点の番号付けが一意的にならない。2つの格子点の相対的位置を3個の整数で表わそうとすると、転位線のまわりをどのようににまわりながら格子点を数えてゆくかによって、相対的位置をあらわす整数は違ってくる。規則的な格子における素励起の伝播が

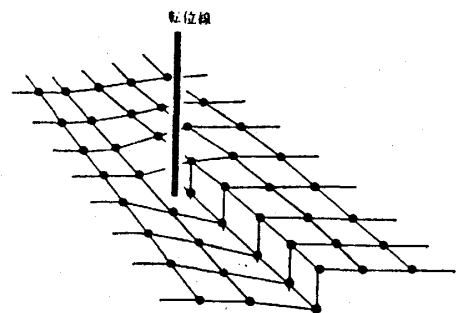


図1 らせん転位

$$H = T \sum_{\langle \vec{n}, \vec{m} \rangle} |\vec{n}\rangle \langle \vec{m}| \quad (1)$$

のようなハミルトニアンで与えられているとする。ここで和は最近接格子点の対についてとるものとする。このとき

$$|\vec{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{n}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{n}} |\vec{n}\rangle \quad (2)$$

は(1)の固有状態であり平面波をあらわす。ところが転位がある場合、最近接格子点間の遷移を T (一定) としても(2)が固有状態とならないことは明らかである。格子点 $\vec{n}$ をあらわす3個の整数の組が多価性を帯びてくるからである。川村¹⁾によって転位による波動の散乱が格子について論じられているが、ここで、我々は連続体弾性論を用いて、転位のある結晶をひずんだ空間とみなして、その中での量子的波動の伝播を論じる。

§2 ひずみを持つ連続体の記述

ひずみを持つ連続体は distortion tensor $\beta_{ji}(\vec{x})$ によって特徴づけられる。近接する2点 $\vec{x}$ と $\vec{x} + d\vec{x}$ における原子の変位の差を du とすると、

$$du^i = dx^j \beta_{ji}(\vec{x}) \quad (2)$$

と表わされる。これが $\beta_{ji}(\vec{x})$ の定義である。²⁾ 転位があると、転位線を囲む閉曲線 C において du^i を積分したもの

$$\oint_C du^i = \oint_C dx^j \beta_{ji}(\vec{x}) = -b^i \quad (3)$$

は、有限の値になる。ベクトル $\vec{b}$ は転位の Burgers ベクトルと呼ばれている。また、

$$\alpha_{ji}(\vec{x}) = -\epsilon_{jlk} \frac{\partial}{\partial x^l} \beta_{ki}(\vec{x}) \quad (4)$$

は転位密度と呼ばれ、 j 軸に垂直な面を通る転位線の Burgers ベクトルの i 成分の和をその面の面積で割ったものである。

ひずんだ結晶の中を電子が伝播するとき最近接原子間の結合だけが伝播を支配するものとしよう。それは、(1)で与えられるハミルトニアンを仮定することに対応する。簡単のために刃状転位の場合を考える。図2においてAから出発した電子が再びAに戻ってきたとする。この時、電子の運動は、図3のような完全結晶の中の道すじを運動しているのと同様である。なぜなら電子にとっては、最近接格子点の相対的關係だけが支配的であるからである。図2を仮に変形結晶 (deformed crystal) , 図3を緩和結晶 (relaxed crystal) と名付けることにする。緩和結晶においては、電子は完全結晶における場合と同じような運動をされると考えられる。

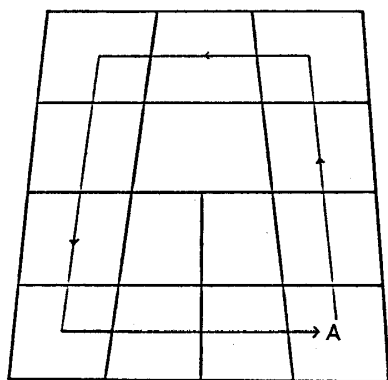


図2 刃状転位をもつ変形結晶

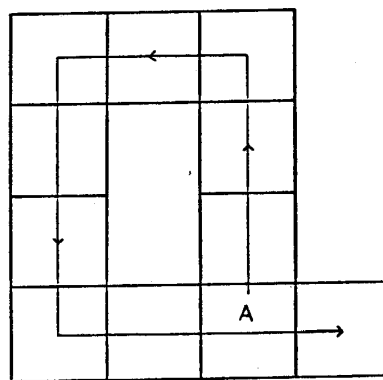


図3 に対応する緩和結晶

従って、変形結晶と緩和結晶の間の対応関係を見出せばよい、ということになる。緩和結晶は変形結晶によって一義的に決まるのではなく、変形結晶における電子の径路に依存するのである。

今、変形結晶で電子が $d\vec{x}$ だけ進んだとする。この距離の間に $d\vec{u}$ だけのひずみがあるのだから、変形結晶における変位 $d\vec{x}$ は緩和結晶における変位

$$d\vec{y} = d\vec{x} - d\vec{u} \quad (5)$$

に対応する。成分で書くと

$$dy^i = dx^i - dx^j \beta_{ji}(\vec{x}) = dx^j r_{ji}(\vec{x}) \quad (6)$$

である。電子は、変形結晶で $d\vec{x}$ だけ進む時、完全結晶において $d\vec{y}$ に相当する分だけの原子配列を見ることになる。従って電子にとっての距離は

$$dy^i dy^j = g_{ij}(\vec{x}) dx^i dx^j \quad (7)$$

となる。ここで

$$g_{ij}(\vec{x}) = r_{ik}(\vec{x}) r_{jk}(\vec{x}) \quad (8)$$

緩和結晶における直線（すなわち、例えば結晶軸に沿う径路）は $d^2 y^i = 0$ で与えられるが、(6) より、変形結晶では

$$d^2 x^i + \Gamma_{jk}^i(\vec{x}) dx^j dx^k = 0 \quad (9)$$

と表現される。ここで接続の係数 $\Gamma_{jk}^i(\vec{x})$ は

$$\Gamma_{jk}^i(\vec{x}) = \frac{\partial r_{jn}}{\partial x^k}(\vec{x}) [r^{-1}(\vec{x})]_{ni} \quad (10)$$

となる。従って変形結晶は計量 $g_{ij}(\vec{x})$ が (8) で与えられるような Riemann 空間と考えてよい。³⁾ 空間の曲率はこの計量テンソルを用いて計算することができる。

以下、簡単のために z 軸に平行ならせん転位が連続的に分布している場合を考える。この場合、distorsion tensor は

$$\beta_{xz} = \beta_{xz}(x, y), \quad \beta_{yz} = \beta_{yz}(x, y)$$

のみで他の成分は 0 である。従って

$$g_{ij} = \begin{bmatrix} 1 + \beta_{xz}^2, & \beta_{xz}\beta_{yz}, & -\beta_{xz} \\ \beta_{yz}\beta_{xz}, & 1 + \beta_{yz}^2, & -\beta_{yz} \\ -\beta_{xz}, & -\beta_{yz}, & 1 \end{bmatrix} \quad (11)$$

また、その逆行列は

$$g^{ij} = \begin{bmatrix} 1, & 0, & \beta_{xz} \\ 0, & 1, & \beta_{yz} \\ \beta_{xz}, & \beta_{yz}, & 1 + \beta_{xz}^2 + \beta_{yz}^2 \end{bmatrix} \quad (12)$$

となる。これより断面曲率が求められ

$$\frac{R_{xxzz}}{g_{xx}g_{zz} - g_{xz}^2} = \frac{R_{yyzz}}{g_{yy}g_{zz} - g_{yz}^2} = -\left(\frac{\alpha_{zz}}{2}\right)^2 \quad (13)$$

などとなる。すなわち曲率は転位密度の 2 乗に比例し、かつ負である。

§ 3 変形結晶における波動の伝播

電子は完全結晶の中で自由粒子のように振舞うものとする。然らば、緩和結晶において時刻 $t=0$ にある点 $\vec{y}(0)$ に電子が居たとして、その後、各々の時刻 $t_1 < t_2 < \dots < t_N = t$ において

$$[y^i(t_1), y^i(t_1) + \delta y^i(t_1)], [y^i(t_2), y^i(t_2) + \delta y^i(t_2)],$$

$$\cdots [y^i(t_N), y^i(t_N) + \delta y^i(t_N)]$$

という「門 (gate)」を通る量子力学的波動は

$$\left[\prod_{0 < \tau \leq t} \prod_{i=1}^3 \delta y^i(\tau) \right] \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \frac{m}{2} [\dot{\vec{y}}(\tau)]^2 \right\}$$

で与えられる。⁴⁾ 然るに実際の空間座標 $\vec{x}$ に対して緩和結晶の座標 $\vec{y}$ は (6) の微分の形で定義されているものであるから一般に $\vec{y} = \vec{y}(\vec{x})$ という一意的関係が存在せず不便である。

従って (7) を用いて

$$[\dot{\vec{y}}(\tau)]^2 = g_{ij}(\vec{x}(\tau)) \dot{x}^i(\tau) \dot{x}^j(\tau) \quad (14)$$

と置き、またヤコビアンを導入して

$$\prod_{0 < \tau \leq t} \prod_{i=1}^3 \delta y^i(\tau) = J \prod_{0 < \tau \leq t} \prod_{i=1}^3 \delta x^i(\tau) \quad (15)$$

と置く。ヤコビアン J は、(6) を

$$y^i(\tau) - y^i(0) = x^i(\tau) - x^i(0) - \int_0^\tau d\tau' \dot{x}^j(\tau') \beta_{ji}(\vec{x}(\tau')) \quad (16)$$

のように積分して、これを $y^i(\tau)$ と $x^j(\tau')$ [$0 \leq \tau' \leq \tau$] の間の変数変換とみなすことにより得られる。すなわち、(16) の変分をとれば、

$$\begin{aligned} \delta y^i(\tau) &= \delta x^j(\tau) r_{ji}(\vec{x}(\tau)) + \int_0^\tau d\tau' \delta x^j(\tau') \\ &\quad \times \{ \Gamma_{kj}^n(\vec{x}(\tau')) - \Gamma_{jk}^n(\vec{x}(\tau')) \} \dot{x}^k(\tau') r_{ni}(\vec{x}(\tau')) \end{aligned} \quad (17)$$

となるので、 $\delta y^i(\tau) / \delta x^j(\tau')$ を行列要素 [(i, τ) 行 ($j, \tau')$ 列] とする行列の行列式を求めればよい。時刻 $t = 0$ において $\vec{x}(0) = \vec{x}_0$ に居た電子が時刻 t において $\vec{x}(t) = \vec{x}$ に居るといふ量子力学的波動 [則ち、グリーン関数] を計算するには、途中の「門 (gate)」について積分すればよい。従って

$$\begin{aligned} G(\vec{x}, \vec{x}_0; t) &= \int_{\vec{x}(0)=\vec{x}_0}^{\vec{x}(t)=\vec{x}} \mathcal{D}(\vec{x}) \prod_{0 < \tau \leq t} r(\vec{x}(\tau)) \\ &\quad \times \exp \left[\int_0^\tau d\tau \{ \Gamma_{ji}^i(\vec{x}(\tau)) - \Gamma_{ij}^i(\vec{x}(\tau)) \} \dot{x}^j(\tau) \right] \end{aligned}$$

$$\times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \frac{m}{2} g_{ij}(\vec{x}(\tau)) \dot{x}^i(\tau) \dot{x}^j(\tau) \right] \quad (18)$$

となる。ここで、 $r(\vec{x})$ は行列 $r_{ji}(\vec{x})$ の行列式である。

更に、

$$\begin{aligned} & \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \frac{m}{2} g_{ij}(\vec{x}(\tau)) \dot{x}^i(\tau) \dot{x}^j(\tau) \right] \\ &= \int \mathcal{D}(\vec{p}) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \left\{ \dot{x}^j(\tau) r_{ji}(\vec{x}(\tau)) p^i(\tau) - \frac{[\vec{p}(\tau)]^2}{2m} \right\} \right] \end{aligned}$$

と表わせることに注意すると、一般的に完全結晶でバンドエネルギー $\epsilon(\vec{p})$ が与えられているとき、変形結晶における電子の波動のグリーン関数は

$$\begin{aligned} G(\vec{x}, \vec{x}_0; t) &= \int_{\vec{x}(0)=\vec{x}_0}^{\vec{x}(t)=\vec{x}} \mathcal{D}(\vec{x}) \int \mathcal{D}(\vec{p}) \prod_{0 < \tau \leq t} r(\vec{x}(\tau)) \\ &\quad \times \exp \left[\int_0^t d\tau \left\{ \Gamma_{ji}^i(\vec{x}(\tau)) - \Gamma_{ij}^i(\vec{x}(\tau)) \right\} \dot{x}^j(\tau) \right] \\ &\quad \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \left\{ \dot{x}^j(\tau) r_{ji}(\vec{x}(\tau)) p^i(\tau) - \epsilon(\vec{p}(\tau)) \right\} \right] \quad (20) \end{aligned}$$

で与えられるものと考えられる。

§ 4 らせん転位の場合

§ 2 で述べたような、 z 軸に平行ならせん転位が連続的に分布している場合を考える。即ち

$$\beta_{xz} = \beta_{xz}(x, y), \quad \beta_{yz} = \beta_{yz}(x, y)$$

として他の成分は 0 とおく。このとき接続の係数は

$$\Gamma_{xx}^z = -\partial \beta_{xz} / \partial x, \quad \Gamma_{xy}^z = -\partial \beta_{xz} / \partial y,$$

$$\Gamma_{yx}^z = -\partial \beta_{yz} / \partial x, \quad \Gamma_{yy}^z = -\partial \beta_{yz} / \partial y$$

以外は 0 である。また $r(\vec{x}) = 1$

である。従って

$$G(\vec{x}, \vec{x}_0; t) = \int_{\vec{x}(0)=\vec{x}_0}^{\vec{x}(t)=\vec{x}} \mathcal{D}(\vec{x}) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau L(\dot{\vec{x}}(\tau), \vec{x}(\tau)) \right] \quad (21)$$

$$L(\dot{\vec{x}}, \vec{x}) = \frac{m}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) + \frac{m}{2} \{ \dot{z} - \beta_{xz}(x, y) \dot{x} - \beta_{yz}(x, y) \dot{y} \}^2 \quad (22)$$

となる。これは x, y, z についての径路積分を順次行うことにより

$$G(\vec{x}, \vec{x}_0; t) = \int_{x(0)=x_0}^{x(t)=x} \mathcal{D}(x) \int_{y(0)=y_0}^{y(t)=y} \mathcal{D}(y) \int_{z(0)=z_0}^{z(t)=z - \int_0^t d\tau (\dot{x} \beta_{xz} + \dot{y} \beta_{yz})} \mathcal{D}(z) \\ \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \frac{m}{2} (\dot{\vec{x}}(\tau))^2 \right] \quad (23)$$

と書くこともできる。状態密度を計算する場合は $\vec{x}$ から出発して $\vec{x}$ にもどる径路積分を行う。

すなわち $G(\vec{x}, \vec{x}; t)$ を求める訳であるがこの時

$$\int_0^t d\tau (\dot{x} \beta_{xz} + \dot{y} \beta_{yz}) = \int (dx \beta_{xz} + dy \beta_{yz}) \\ = - \int_S dS \alpha_{zz} \quad (24)$$

となる。 α_{zz} は (4) で定義される転位密度であり、面積分は、 $\vec{x}$ から出発して $\vec{x}$ にもどる閉曲線を $x-y$ 面に投影して得られる面 S (図 4) について行われる。(24) は、転位が存在する結晶内で一周するとどれだけ結晶面がずれるか、ということを表わしている。

最も簡単な模型として (24) が面積 S のみの関数であるとしよう、すなわち、

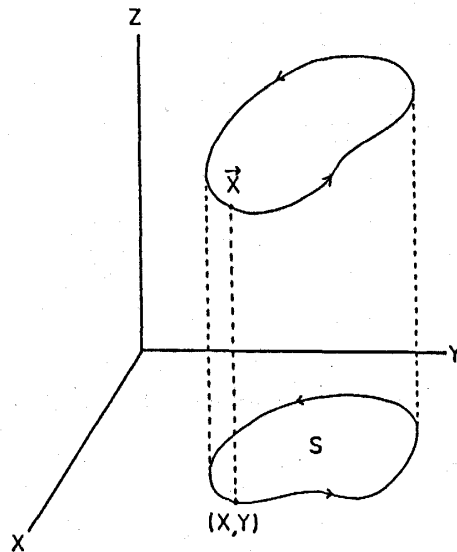


図 4 式 (24) における面積分

$$\int_S dS \alpha_{zz} = \alpha(S) \quad (25)$$

とおく。\$x\$-\$y\$ 面の閉曲線が囲む領域の面積は

$$S = \frac{1}{2} \int_0^t d\tau \{x(\tau) \dot{y}(\tau) - \dot{x}(\tau) y(\tau)\} \quad (26)$$

で与えられるから (23) のグリーン関数は

$$G(\vec{x}, \vec{x}; t) = \int_{-\infty}^{\infty} dS \int_{\vec{x}(0)=\vec{x}}^{\vec{x}(t)=\vec{x}+\alpha(S)\vec{e}_z} \mathcal{D}(\vec{x}) \delta\left(S - \frac{1}{2} \int_0^t d\tau \{x(\tau) \dot{y}(\tau) - \dot{x}(\tau) y(\tau)\}\right) \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \frac{m}{2} (\dot{\vec{x}}(\tau))^2\right] \quad (27)$$

となる。ここで \$\vec{e}_z\$ は \$z\$ 軸方向の単位ベクトルである。(27) は更に次のように表わすことができる。

$$G(\vec{x}, \vec{x}; t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \int_{-\infty}^{\infty} dS e^{i\lambda S} \int_{\vec{x}(0)=\vec{x}}^{\vec{x}(t)=\vec{x}+\alpha(S)\vec{e}_z} \mathcal{D}(\vec{x}) \times \exp\left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau L_\lambda(\dot{\vec{x}}(\tau), \vec{x}(\tau))\right] \quad (28)$$

ここで

$$L_\lambda(\dot{\vec{x}}, \vec{x}) = \frac{m}{2} (\dot{\vec{x}})^2 - \frac{\lambda \hbar}{2} (x \dot{y} - y \dot{x}) \quad (29)$$

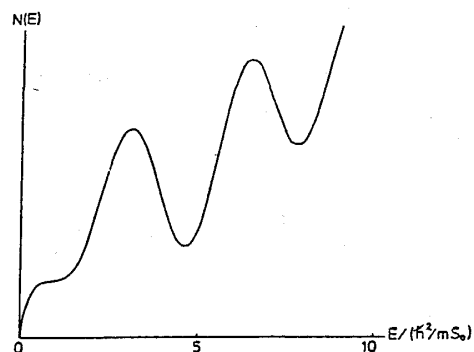
とおく。これは一様磁場 (大きさ \$\lambda \hbar\$, \$z\$ 方向) 中の荷電粒子の運動をあらわすラグランジアンと同じである。これより状態密度 \$N(E)\$ を計算すると,

$$N(E) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \int_{-\infty}^{\infty} dS \left(\frac{1}{2\pi}\right) e^{i\lambda S + i k \alpha(S)} \times \frac{|\lambda|}{(2\pi)^2} \sum_{n=0}^{\infty} \delta\left[E - \frac{\hbar^2 |\lambda|}{m} \left(n + \frac{1}{2}\right) - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right] \quad (30)$$

という表式を得る。

電子の径路が囲む面積に対して、転位による結晶面のずれがどのように依存するかは、勿論転位の分布によるわけであるが、今、

$$\alpha(S) = \begin{cases} \alpha S, & |S| \leq S_0 \\ 0, & |S| > S_0 \end{cases} \quad (31)$$


 図5 $\sqrt{2S_0}$ $\alpha = 3.0$ の場合の状態密度

としよう。面積が小さい時は転移は揃っているが、大きな面積をとる反対向きの転位も入り込んできて相殺する、という模型である。 $\alpha = 0$ すなわち完全結晶においては

$$N(E) \propto \sqrt{E}$$

であるが、 $\alpha \neq 0$ だと $N(E)$ に振動があらわれる。状態密度のピーク間の巾を ΔE とすると、

$$\Delta E \sim \frac{\hbar^2}{m} \cdot \frac{1}{S_0}$$

であり、転位が揃っている領域の巾程度の de Broglie 波長に対応するエネルギーである。

§ 5 結 論

格子の結合に乱れがある場合の量子力学的波動の伝播は公式(18)によって一般的な形で与えられる。しかしながら径路積分を具体的に評価することは一般的に困難である。§ 4 の模型は取扱い得る最も単純な模型であるが、置換型の乱れとちがって状態密度に tail が出たりしないのが特徴と言えよう。§ 2 で転位のある連続体の Riemann 幾何学的解釈を行ったが、負曲率の空間ということが何を意味するのか更に考えてみたい。(特に、最近のフランスにおける非晶質の幾何学的研究⁵⁾との関連において。)

以上は、中里和郎氏(日立)と荒木暉氏(日本鉱業)との共同研究⁶⁾に基くものである。

文 献

- 1) K. Kawamura, Z. Physik **B29** 101(1978); **B30** 1(1978).
- 2) L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Theory of Elasticity* (Pergamon Press, Oxford, 1970). E. Kröner, *Kontinuumstheorie der Versetzungen und Eigenspannungen* (Springer, Berlin, 1958).

北原 和夫

- 3) 佐々木重夫, リーマン幾何学 I 及び II (共立出版, 1957)
- 4) R. P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw Hill, New York, 1965).
- 5) M. Kleman and J. F. Sadoc, *J. de Physique* **40** L-59 (1979).
- 6) H. Araki, K. Kitahara and K. Nakazato, *Prog. Theor. Phys.* **66** 1895 (1981).