幾何学的に乱れた系における量子波動

東工大・理 北　原　和　夫・岩　城　一　郎

規則的な結晶格子の中で，平面波の状態が量子力学的定常状態となる．これは，Huygensの原理で考えると，ある波面から出発した素原波はconstructiveな干渉をして，新しい波面をつくってゆく，ということである．ところが，格子の中に転位が存在すると，転位のまわりを一周すると格子面がずれるということから，素原波も転位を迂回する仕方によって異なる位相をもつことになる．川村らは一連の論文で実際に計算機シミュレーションによって，素原波のdestructiveな干渉が生じることを示した．[1)]

我々は，同じようなtight-binding Hamiltonian

(1)
$$H = T \sum_{<m,n>} |m><n|$$

を用い，回位を含む格子における波動を調べた．回位の特徴は，空間に曲率を与えることである[2)]．

波動方程式

(2)
$$H|\vec{k}\rangle = E_{\vec{k}}|\vec{k}\rangle$$

を，Lippmann-Schwingerの方法で解く[3)]．規則格子のHamiltonianをH_0として，$V=H-H_0$とすると，

(3)
$$|\vec{k}\rangle = |\vec{k}\rangle^{(0)} + \frac{1}{E_{\vec{k}} - H_0 + i\varepsilon} V |\vec{k}\rangle$$

となる．

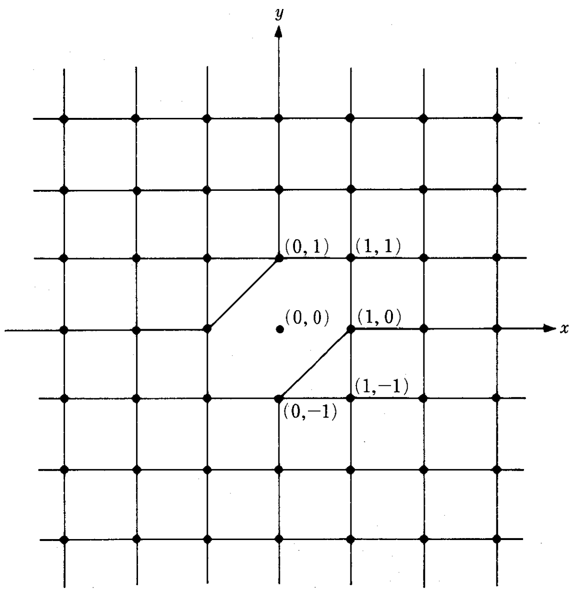

図1．回位を含む格子．各格子点は4つの最近接格子点と結ばれている．格子点(0, 0)は，この格子から除かれる．

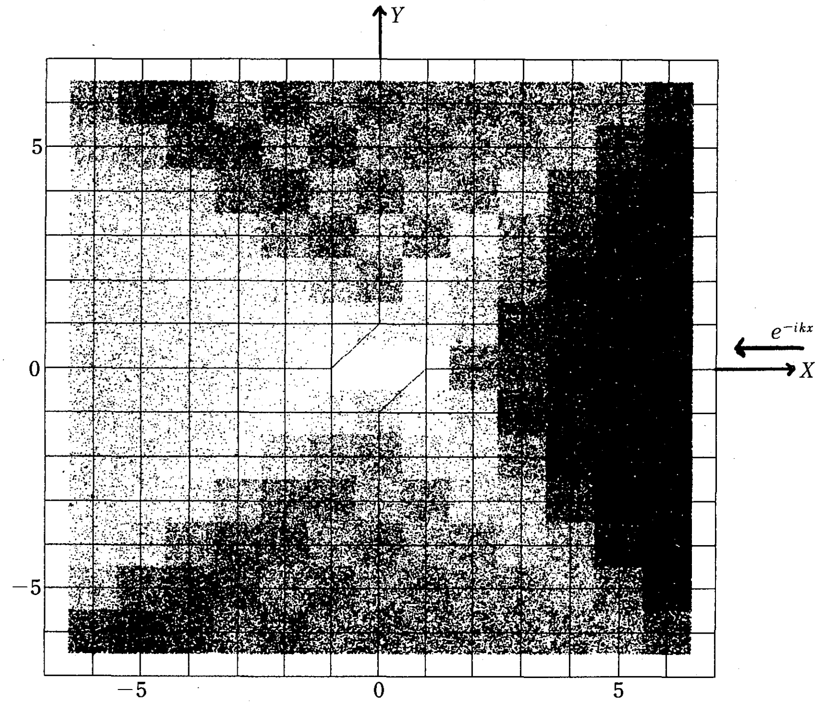

図2．右方より平面波 e^{-ikx} を送った場合の，各格子点における確率振幅．濃い所は，確率振幅が大きいことをあらわす．ここで，波数 k は π に近い値で，$k=\pi-\delta$, $1-\cos\delta=2\sin(\pi/180)$ とおいた．

ここで，$|\vec{k}\rangle^{(0)}$ は規則格子上の定常解 $H|\vec{k}\rangle^{(0)}=E_{\vec{k}}|\vec{k}\rangle^{(0)}$ で平面波 $\langle\vec{n}|\vec{k}\rangle=e^{-i\vec{k}\vec{n}}/\sqrt{N}$ である．

簡単な模型として，図1のような格子を考える．bond はすべて同じ transfer T を持つとする．外側は完全格子であるから，上記の摂動 V の働くところは，中心の9つの格子点だけであり，従って，それらの点における波動 $\langle\vec{n}|\vec{k}\rangle$ は有限次元の行列計算で求められる．それらを用いて，周囲の格子点の波動も (3) より求められる．

典型的な場合を図2に示す．これは右方から $e^{-i\vec{k}\vec{n}}[\vec{k}=(\pi-\delta,\ 0)]$ という平面波を送った場合である．濃淡は確率振幅 $|\langle\vec{n}|\vec{k}\rangle|^2$ の大小をあらわす．波数が π に近い平面波の場合，destructive な干渉が強くなり，下流側 $(x<0)$ で確率振幅が小さくなることがよくわかる．これは，転位の場合とよく似た結果である[1]．

孤立した回位の効果をみるために，現在，更に大きな格子で計算することを計画中である．

参 考 文 献

1) Y. Yoshida and K. Kawamura (1979). *Z. Physik,* **B32**, 355.
K. Kawamura and Y. Yoshida (1979). *Z. Physik,* **B34**, 369.
2) See for example, R.W. Lardner (1970). Mathematical Theory of Dislocations and Fracture (University of Toronto Press, Toronto).
3) A. Messiah (1965). Quantum Mechanics vol. II (North Holland, Amsterdam), Chap. XIX.