

結晶転位弦のピン止め点からのトンネル効果

指導教官 小杉 俊男 講師

広島大学理学部物理学科

0772037E

山本 高志

概要

結晶転位は外力、張力、質量を定義することで弦として扱える。結晶中に不純物を入れた場合、不純物原子との相互作用のために転位の動きが妨げられるが、応力を加えることで転位弦は不純物原子から逃れることができる。この現象は弦のピン止め点からの離脱として扱うことが可能である。この系のポテンシャルエネルギーは応力のする仕事、張力による弦のエネルギーの増加、ピン止めエネルギーの合計で与えられ、適当な応力のもとでは弦のピン止めの距離に対して 2 つの極小値にはさまれた障壁を持つ。熱活性過程による弦の離脱はこのポテンシャル障壁を越えることによって起こる。低温ではトンネル過程による離脱が起こる。転位のトンネル効果については多くの考察がなされていて、トンネル過程の有効質量やトンネルするポテンシャルをどう考えるかが重要になっている。しかし転位のトンネル過程は多次元多自由度の問題であるためまだ正確には解かれていない。そこでバネにつながれた 3 質点による簡単な系を考えて弦の離脱現象を近似することでシミュレーションを行い、ポテンシャルマップを作って考察した。

すると、まず両端の質点の変位が増大し、その後中央の質点の変位が増大することで離脱が起き、有効質量や有効振動数がピン止めエネルギーに依存することが分かった。

目次

§ 1 序論	4
§ 2 結晶転位と不純物原子の相互作用	
2.1 転位の構造	6
2.2 転位弦の離脱モデル (Granato-Lücke モデル)	7
§ 3 熱活性過程とトンネル過程	
3.1 弦の熱活性過程による離脱	10
3.2 トンネル過程による離脱問題	15
§ 4 簡単な系によるシミュレーション	
4.1 バネでつながれた 3 質点モデル	19
4.2 ポテンシャルマップの計算	20
4.3 考察	23
§ 5 まとめ	33

§1 序論

結晶転位は外力、張力、質量を定義することによって弦として扱うことができる。結晶中に不純物を混入した場合、転位と不純物の間に相互作用が働き、転位の動きが妨げられる。しかし応力を加えることで転位弦は不純物原子の障害から逃れる。この現象は弦のピン止め点からの離脱として一般化できる。転位弦の離脱モデルは Granato と Lücke によって最初に定量的に取り扱われた¹⁾。それによると、この系のポテンシャルエネルギーは応力のする仕事、張力による弦のエネルギーの増加、そしてピン止めエネルギーの合計で与えられる。適当な応力の下で、このポテンシャルエネルギーは弦とピン止め点の間の距離に対して、2つの極小値にはさまれた障壁を持つ。これらの極小値はそれぞれピン止め状態と離脱状態に対応し、このポテンシャル障壁を普通熱的に飛び越えることによって古典的な熱活性過程による転位弦の離脱が起きるのである。

一方、低温では量子トンネル過程による弦の離脱が起こる可能性が考えられる²⁻⁴⁾。1次元1自由度における量子トンネル効果の問題はよく理解されている。質量 M の粒子が高さ ΔU 、幅 Δx のポテンシャル障壁を単位時間あたりにトンネルする確率は、有効振動数を n_0 として $P = n_0 \exp(-2\Delta x \sqrt{2M\Delta U}/\hbar^2)$ で与えられる。(\hbar は Planck 定数 h を 2π で割った値である。) ところが転位弦のトンネル過程による離脱は多次元、多自由度系の問題である。この問題については今までに多くの考察がなされてきたが、このような系における量子トンネル効果は複雑であるため、まだ正確に理解されていないのが現状である。しかしながら転位のトンネル現象を考察することは日常のマクロな系に至る「多自由度系における量子効果の問題」に強く関係している。具体的には、第2種超伝導

体中の磁束線の運動や中性子星における超流動渦線の運動といった最近の問題にも応用できる。

ここでは、弦の離脱をより簡単な系に置き換えて考察し、転位のトンネル過程について理解することを試みた²⁾。バネでつながれた3質点の系によって弦を近似し、その系のポテンシャルエネルギーを求めた。適当な力の下でこの系のポテンシャルエネルギーは2つの極小値とそれらに挟まれた鞍点から構成される。適当な自由度を座標として選んでポテンシャルマップを作成し、どのような経路をたどって離脱が起こるかを明らかにした。またピン止めエネルギーの大きさを変えると、離脱の経路がどう変わるかを調べた。さらにトンネル過程がどのような経路をたどって起きるかを考えた。

この論文は以下のように構成される。2章では転位が弦として扱えることを説明し、弦の離脱モデルを述べる。3章ではトンネル過程による弦の離脱についてなされてきた理論的な考察を紹介する。4章ではバネにつながれた3質点系のモデルを考え、弦の離脱の経路について考察する。5章では以上の結果からどのような理解が得られたかを述べる。

§2 結晶転位と不純物原子の相互作用

2.1 転位の構造

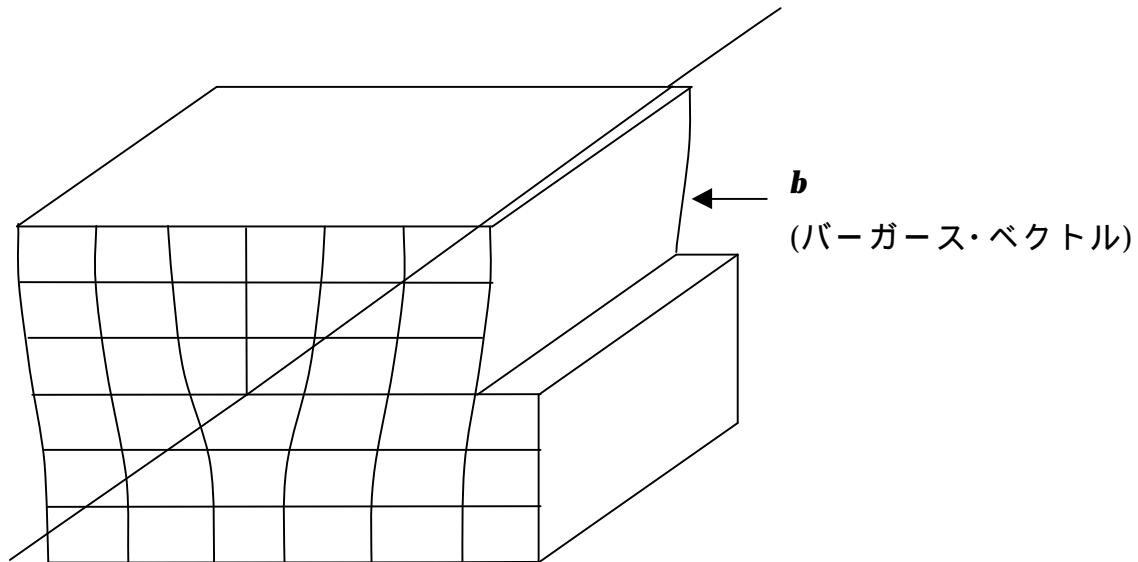


図 2.1 転位の構造

転位の構造を図 2.1 を用いて紹介する^{5,6)}。結晶内のある面においてその上下間に一部すべりが起こったとき、すでにすべった領域とまだすべっていない領域の境界には大きなしわ寄せが生じる。このしわ寄せを転位という。転位は線状になっているので転位線という呼び方もする。すべりの大きさを表すベクトルのことをバーガース・ベクトルといい、 b で表す。転位はこのように結晶格子の乱れた状態にすぎないのだが、外力、張力、質量を定義することによって弦として扱うことが可能になる。これらは次のように表現できる。

転位に働く外力 f は、転位がすべり運動をするときに外力 f がする仕事と、結晶変形によってずれ応力 t が結晶にする仕事を等しいと置いて導くことができ、

$$f = tb \quad (2.1)$$

と与えられる。

転位が波打つと、弾性エネルギーが直線の状態より増大するので、転位は直線に戻ろうとする。エネルギーの増大分が転位の長さの増大に比例すると考えると、転位は一定の張力を持つとみなすことができ、張力は単位長さあたりのエネルギーとほぼ等しいと考えることができる。この近似から転位の張力は

$$T \approx Gb \quad (2.2)$$

と求められる。ここで G はずれ弾性率である。

運動している転位の周囲の歪み場は、静止している場合と異なり運動方向に収縮を起こす。この収縮は弾性体の運動方程式をローレンツ変換することによって求められ、この歪み場の収縮を考慮して転位の運動状態のエネルギー上昇が計算できる。転位の質量はこのエネルギー上昇をもたらす慣性質量として定義され、

$$M \approx rb^2 \quad (2.3)$$

となる。ここで r は結晶の密度である。

以上のように転位の外力、張力、質量が定量化され、転位を弦として扱うことが可能になる。

2.2 転位弦の離脱モデル (Granato-Lücke モデル)¹⁾

結晶中に不純物を混入すると転位と不純物原子は相互作用する。そのため、最も強く相互作用する配置が最も起こりやすい配置となるが、そのときの結晶中の転位と不純物原子の配置は図 2.2 のように不純物原子が転位の直上 (または直下) にある場合である。転位を動かそうとすると、不純物原子との相互作用のため妨げられるが、応力を加えることで転位は不純

物原子の障害から逃れる（図 2.3）。この現象は弦のピン止め点からの離脱として扱うことができる。

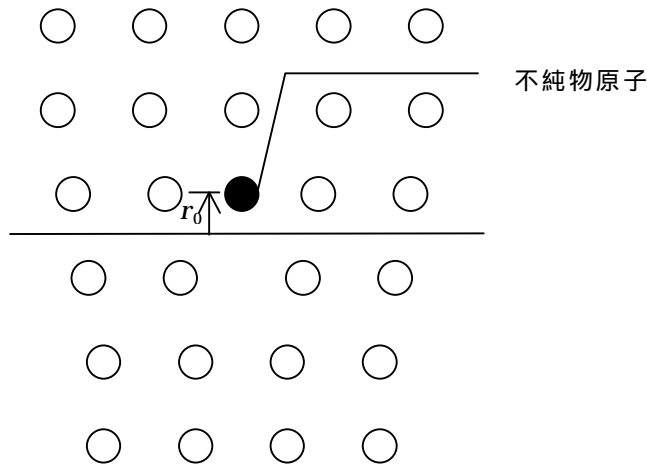


図 2.2 転位と不純物原子の配置

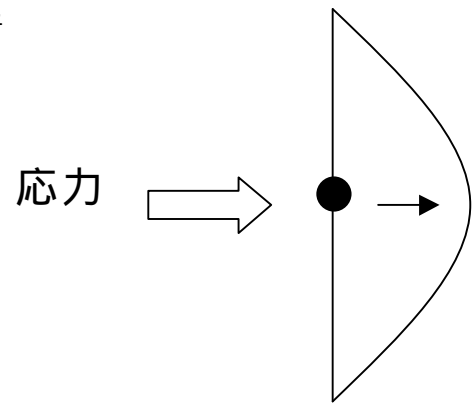


図 2.3 応力を加えた転位弦

不純物原子によって数カ所ピン止めされている転位弦を考え、応力を加えていく（図 2.4）。両端は強くピン止めされていて、応力によって離脱しないとする。まず、応力が働かないときは転位弦はピン止めされている（A）。応力を加えると弓状に張り出し、離脱応力に達するまで張り出し続ける（B - C）。離脱応力に達すると弦が離脱し、歪みはさらに増大するが、転位の応力はこれ以上増えない（C - D）。応力のそれ以上の増大は、新しい閉じた転位の増殖と拡大につながる（E - F）。転位弦が離脱した状態から応力が減少し始めると転位はそのまま戻ってきて、応力がゼロになると再びピン止めされる（D - A）。その結果、図 2.5 のようなヒステレシスを生じる。ここで、図中の s_B は離脱の起こる応力を表している。振動応力下では離脱応力以上の応力振幅を加えると振動エネルギーのヒステレシス損失が現れ、この損失を内部摩擦という。この考えは Granato と Lüke によって最初

に定量的に取り扱われた。

離脱は最も長いダブルループ $l_1 + l_2$ の中心のピン止め点から始まり、それが端まで広がって全体が離脱すると考えられる (図 2.6)。したがって弦の離脱応力を考える際には最長のダブルループの離脱のみを考えればよいことになる。絶対零度において弦の離脱が起こる応力は

$$s_M = \frac{2F_M}{(l_1 + l_2)b} \quad (2.4)$$

と表される。ここで F_M は最大のピン止め力である。有限温度では熱ゆらぎがあるため s_M よりも小さい応力 s_B で離脱する。

転位とピン止め原子の相互作用によるピン止めエネルギーは、線形弾性論によると、Cottrell 型ポテンシャルとして表される。図 2.7 のように中心で弱くピン止めされたダブルループを考え、ピン止め点からの変位を s とする。このとき、Cottrell 型ポテンシャルは

$$U_c(s) = U_0 \frac{s^2}{r_0^2 + s^2} \quad (2.5)$$

と表される。ここで U_0 は転位とピン止め原子の相互作用エネルギー、 r_0 は転位の中心とピン止め原子の最近接距離である (図 2.2)。

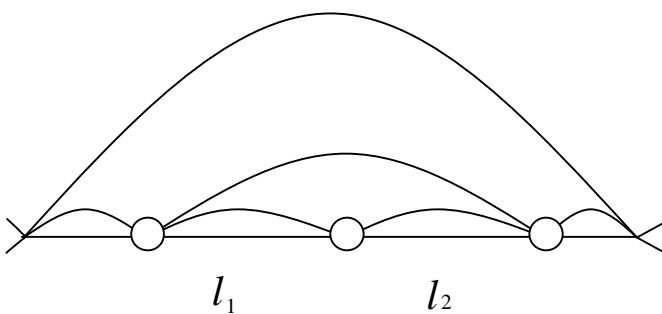


図 2.6 ピン止めされた転位弦

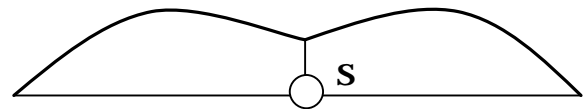


図 2.7 ピン止めされたダブルループ
ピン止め点からの変位は s である

§ 3 熱活性過程とトンネル過程

3.1 弦の熱活性過程による離脱

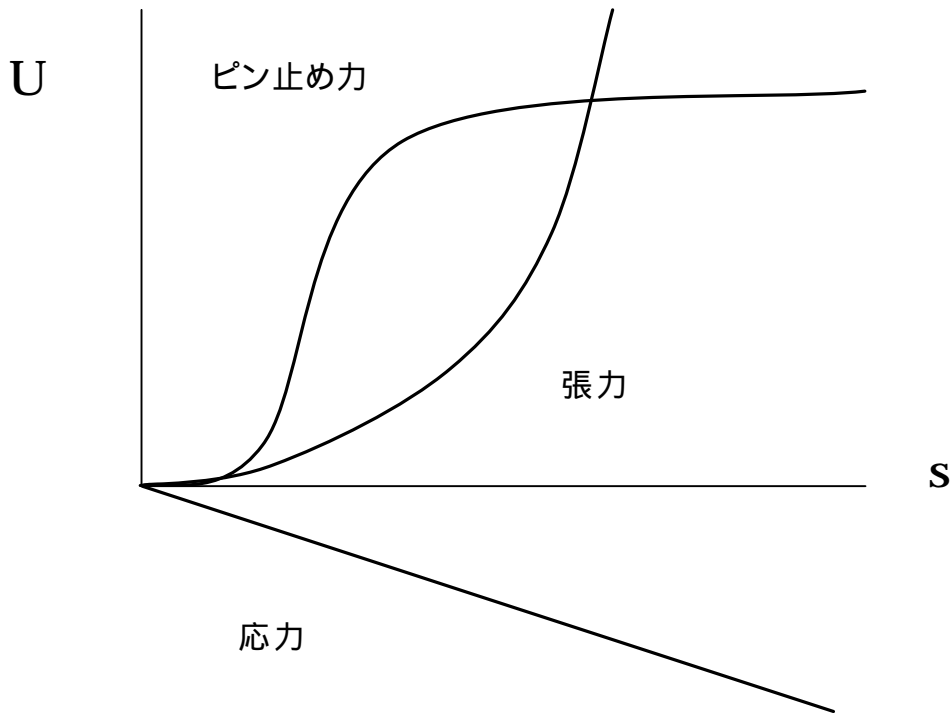


図 3.1 ダブルループのポテンシャルエネルギー

中心で弱くピン止めされたダブルループにおいて、系のポテンシャルエネルギーは、応力のする仕事、張力による弦のエネルギーの増加、そしてピン止めエネルギーの合計で与えられる²⁾(図 3.1)。ピン止めエネルギーとして、ここでは(2.5)式の Cottrell 型のポテンシャルを仮定する。応力の値を選ぶことによってこの系のポテンシャルエネルギーの様子は次の 3 つのタイプに分けられる(図 3.2)。1 つ目は低応力の場合で、ポテンシャルは 1 つの極小値、すなわちピン止め状態しか持たない。2 つ目は高応力の場合で、このときも 1 つしか極小値を持たないが、これは離脱状態に相当する。そして 3 つ目は中間の応力状態 s^* の場合で、このときポテンシャルは応力に依存する

ポテンシャル障壁によって隔てられた2つの極小値を持ち、これらはそれぞれピン止め状態と離脱状態に対応する。熱活性過程や量子トンネル過程による転位の離脱は、この中間の応力状態において重要になる。

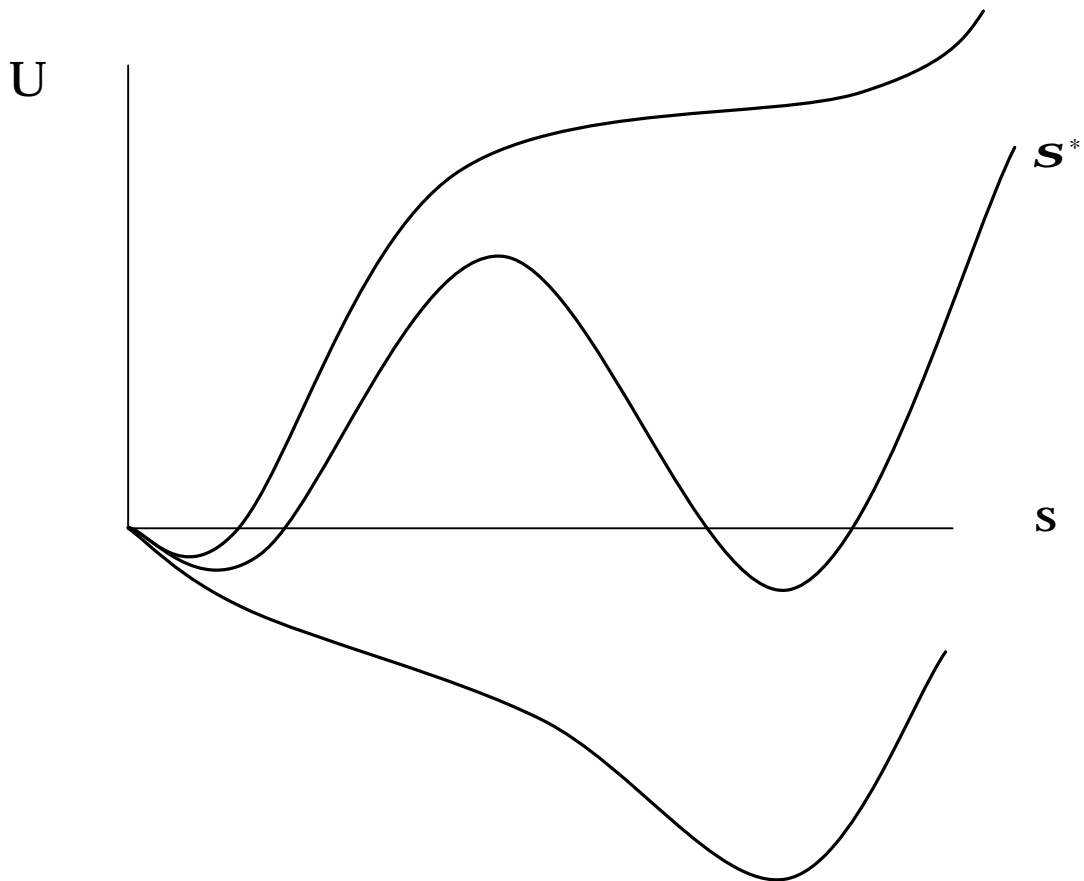


図 3.2 3つの応力状態によるポテンシャル

熱活性過程による古典的な弦の離脱は、図 3.2 のポテンシャル障壁を飛び越えることによって起こる。熱活性過程による弦の離脱が、高さ ΔU のポテンシャル障壁を越えて起こる確率は単位時間当たり

$$P = n_{eff} e^{-\Delta U/k_B T} \quad (3.1)$$

と表される。ここで n_{eff} は弦の有効振動数である。

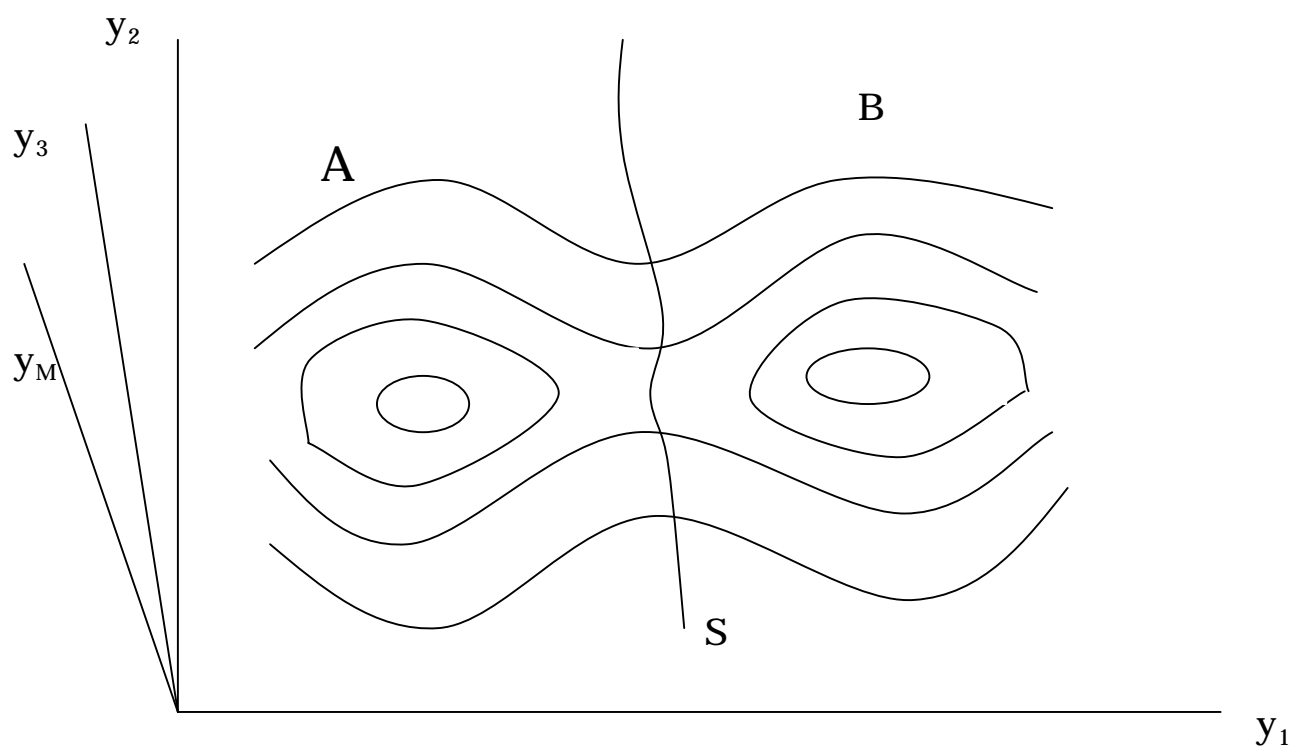


図 3.3 M次元空間における
ポテンシャルマップ

古典的な有効振動数については Granato らによって論じられている⁷⁾。
熱活性過程が進行するとき、この系の自由度の数を M とし、各座標軸を y_j ($j = 1, 2, \dots, M$) とする M 次元空間を考える (図 3.3)。系の状態は空間内の座標 $Y = \{y_1, y_2, \dots, y_M\}$ と速度 $V = \{\dot{y}_1, \dot{y}_2, \dots, \dot{y}_M\}$ で記述される。系のポテンシャル・エネルギーは $\Phi(y_1, y_2, \dots, y_M)$ で表す。ピン止め状態の位置を a 、離脱状態の位置を b 、鞍点を ξ とする。点 ξ を通りあらゆる点で等エネルギー面と直交する曲面 S を考え、この曲面より a 側にある領域を A 、 b 側にある領域を B とする。 A の中にある状態の数 Q_A は、古典的な系の場合、熱平衡状態では分配関数

$$Q_A = r_0 \int_A e^{-\Phi(Y)/k_B T} dV \quad (3.2)$$

で与えられる。ここで r_0 は規格化定数である。単位時間あたりに A から S を通って B に流れる状態の数 I は

$$I = r_0 \left(\frac{k_B T}{2p} \right)^{1/2} \int_S e^{-\Phi(Y)/k_B T} dS \quad (3.3)$$

と計算されるので、A から B に移る確率速度は

$$\Gamma = \frac{1}{t_a} = \frac{I}{Q_A} = \left(\frac{k_B T}{2p} \right)^{1/2} \frac{\int_S e^{-\Phi(Y)/k_B T} dS}{\int_A e^{-\Phi(Y)/k_B T} dV} \quad (3.4)$$

となる。ここで t_a は系が A の中に存在する平均寿命である。 Φ を点 a と点 ξ のまわりで Taylor 展開したものを $\Phi(a)$ 、 $\Phi(\xi)$ として、(3.4) 式に代入すると

$$\Gamma = n' e^{-[\Phi(\xi) - \Phi(a)]/k_B T} \quad (3.5)$$

ここで

$$n' = \prod_{j=1}^M n_j / \prod_{j=2}^M n'_j \quad (3.6)$$

で、 n_j 、 n'_j は点 a と点 ξ のまわりでの基準振動数である。

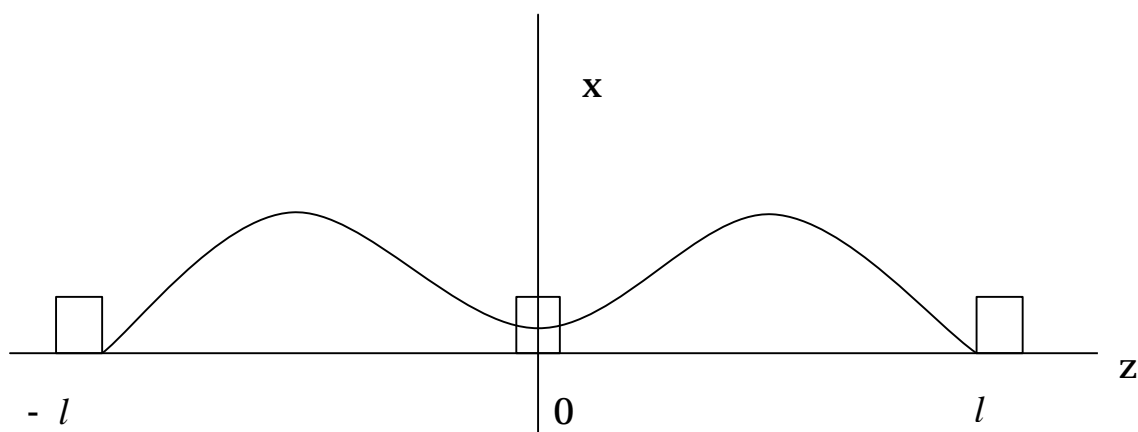


図 3.4 l 間隔でピン止めされた転位

次に n_j 、 n'_j の性質について述べる。 z 軸上に障害が l 間隔で 3 つ並び、これらにピン止めされた転位が中央 ($z = 0$) の障害を乗り越えるとする (図

3.4)。転位片の振動の運動方程式は変位を $x(z)$ として

$$T \frac{\partial^2 x}{\partial z^2} + r(z)F(x) + tb = m \frac{\partial^2 x}{\partial t^2} \quad (3.7)$$

である。ここで T は転位の線張力、 m は転位の質量、 $F(x)$ は不純物原子による相互作用力、 t はずれ応力、 $r(z)$ は障害領域の分布をあらわす関数である。つりあいの状態にあるときの変位を $X(z)$ とすると、

$$T \frac{\partial^2 X}{\partial z^2} + r(z)F(X) + t_a b = 0 \quad (3.8)$$

が成立する。転位はこの平衡配置のまわりで振動しているから

$$x = X(z) + \xi(z) \cos(2pnt) \quad (3.9)$$

とおき、(3.7) 式に代入して(3.8) 式を使うと、 ξ に関する方程式

$$\frac{d^2 \mathbf{g}}{dz^2} + \left[\frac{4p^2 n^2}{c} - \frac{r(z)f}{T} \right] \mathbf{g} = 0 \quad (3.10)$$

が導かれる。ここで相互作用力 $F(x)$ を線形のパネで近似し、

$$f = - \left(\frac{dF}{dx} \right)_{x=X(0)} \text{ を用いた。 } z \neq 0 \text{ でこの式を満たすものとして}$$

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{g} &= A \sin \left[\frac{2p\mathbf{g}}{c} \right] (l+z) & -1 < z < 0 \\ \mathbf{g} &= \pm A \sin \left[\frac{2p\mathbf{g}}{c} \right] (l-z) & 0 < z < 1 \end{aligned} \right\} \quad (3.11)$$

を考える。ここで A は振幅である。これらの解は $z=0$ で次の条件を満たす必要がある。

$$\lim_{e \rightarrow 0} \left[\frac{d\mathbf{g}(e)}{dz} - \frac{d\mathbf{g}(-e)}{dz} \right] = \frac{\mathbf{g}f}{T} \quad (3.12)$$

この式は転位片が最も張り出したとき、 $z=0$ において張力による力が障害からの相互作用とつり合うことを示している。(3.11) 式の下で式で $\xi(-z) = \xi(z)$ となる奇数モードの場合、(3.12) 式によって $z=0$ で転位片の形状に特異点が現れ、(3.11) 式を(3.12) 式に代入して $\mathbf{q} = 2pnl/c$ とおくと

$$\tan \mathbf{q} = - \frac{2T}{fl} \mathbf{q} \quad (3.13)$$

となる。 h, x をある正の数とし、安定位置では $f = x$ 、鞍点位置では $f = -hx$ とすると、 $\tan q$ と $-(2T/xl)q$ および $(2T/hxl)q$ の直線の交点の q の値が安定位置、鞍点位置での振動数を与える。それらを n_j, n'_j ($j = 2n - 1; n = 1, 2, \dots, N/2$)とすると常に $n_3 > n'_3, n_5 > n'_5, \dots$ が成立するので

$$\prod_{j=2}^N (n_j / n'_j) > 1 \quad (3.14)$$

となり、(3.6)式は

$$n' = \frac{c}{2pl} \frac{\prod_{n=1}^{N/2} q_{2n-1}}{\prod_{n=2}^{N/2} q'_{2n-1}} \quad (3.15)$$

となる。Granatoらの近似計算によると、 n' を n_{eff} と書き換えて

$$n_{eff} = 0.26 \left(\frac{U_0}{Gb^3} \right) n_D \quad (3.16)$$

と導かれる。ここで U_0 は転位とピン止め原子の相互作用エネルギー、 G はずれ弾性率、 n_D はデバイ振動数である。

3.2 トンネル過程による離脱問題

Al単結晶を用いた内部摩擦の測定において、絶対温度1K以下の低温では熱活性過程に基づいて理論的に求められる温度依存からのずれが生じていることが報告されている²⁻⁴⁾。この温度領域では、ポテンシャル障壁を熱活性過程ではなく量子的に越える、トンネル過程による転位の離脱が起こっていると考えられている。トンネル過程による転位弦の離脱はさまざまな方向から考察されているが、これは多次元、多自由度系の問題であるため、理解が難しい。

1次元1自由度における量子トンネル効果の問題はよく理解されている。質量 m の粒子が高さ ΔU 、幅 w の矩形のポテンシャル障壁を単位時間あたりにトンネルする確率は、有効振動数を n として

$$P = n \exp(-2w\sqrt{2m\Delta U/\hbar^2}) \quad (3.17)$$

で与えられる。この式を(3.1)式の古典的な弦の離脱確率と等しいと置くと量子トンネリングが起こるようになるクロスオーバー温度は

$$T^* = \frac{\sqrt{\Delta U} \hbar}{k_B} \frac{1}{2 w \sqrt{2m}} \quad (3.18)$$

と表せる。

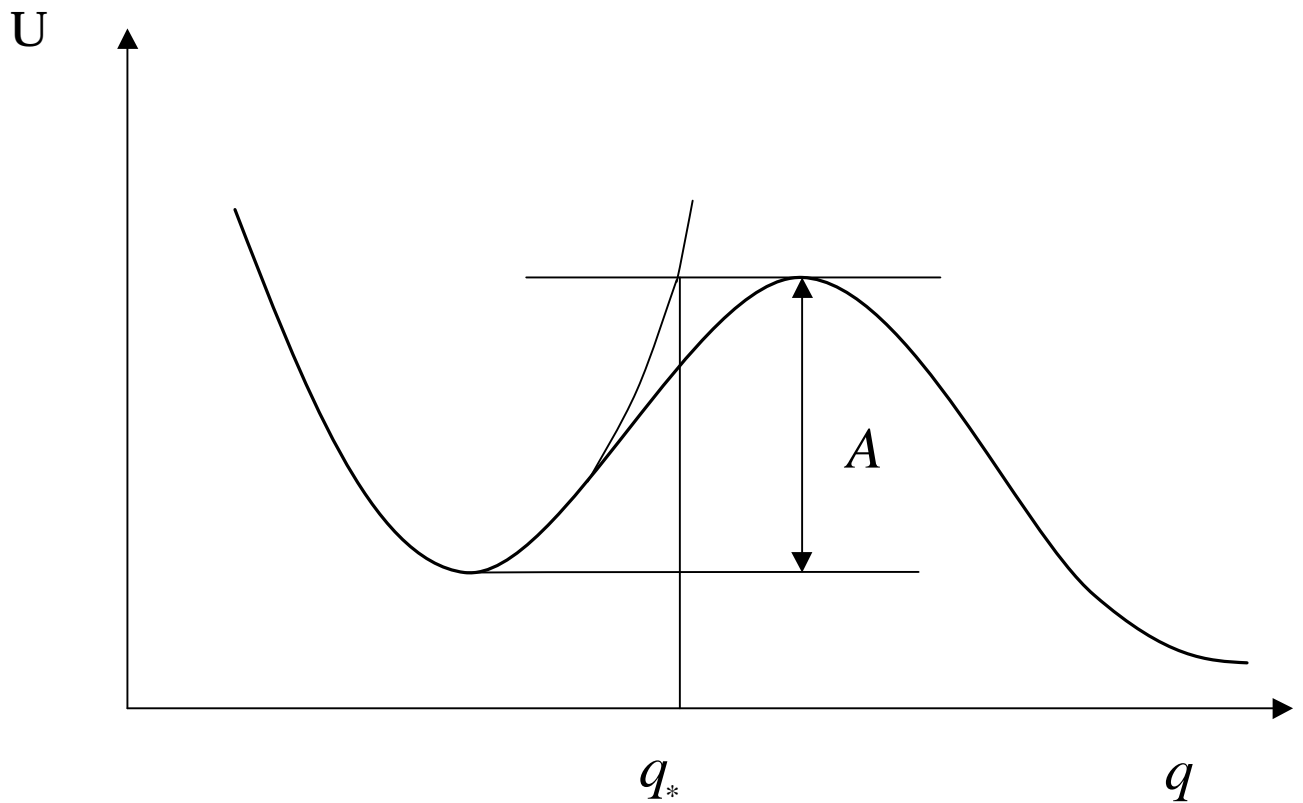


図 3.5 TP ポテンシャル

多次元のトンネル問題は理解が困難である。しかし、中性子星における超流動渦の問題で、Link らは N 次元のトンネル問題を記述している⁸⁾。Link らはまず 1 次元のトンネリング問題を先が切り取られた放物線ポテンシャル (Truncated Parabolic Potential : TP ポテンシャル) による近似を用いて考

察した。実際のポテンシャルを有限の高さ A を持った TP ポテンシャルで近似する (図 3.5)。離脱する確率は、ポテンシャルの谷の外への規格化された粒子流

$$J(q) = \langle \mathcal{E} \rangle^{1/2} P(q_*) \quad (3.19)$$

によって決定される。 q_* は TP ポテンシャルが実際のポテンシャルと同じ高さになる位置である。確率密度 $P(q)$ は波動関数 $\Psi_n(q)$ で表され、

$$P(q) = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-E_n/k_B T} \Psi_n^2(q)}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-E_n/k_B T}} \quad (3.20)$$

となる。この式は調和振動子の一般的な固有関数とエネルギーレベルを用いることによって

$$P(q) = \left[\frac{m\omega}{\hbar p} \tanh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \right]^{1/2} \exp\left[-\frac{m\omega q^2}{\hbar} \tanh\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \right] \quad (3.21)$$

と表される。同じような分布が運動量 p から理論的に求められ、運動量空間での \mathcal{E} の平均は

$$\langle \mathcal{E} \rangle^{1/2} = \frac{\langle p^2 \rangle^{1/2}}{m} = \left[\frac{\hbar\omega}{2m} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right) \right] \quad (3.22)$$

となる。式(3.19) (3.21) (3.22)を用いて

$$J(q) = \left(\frac{\omega^2}{2p} \right)^{1/2} \exp\left[-\frac{m\omega q_*^2}{\hbar} \frac{1}{\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T}\right)} \right] \quad (3.23)$$

ここでポテンシャル障壁の高さ A を

$$A = \frac{1}{2} m\omega^2 q_*^2 \quad (3.24)$$

と置き、また

$$k_B T_{eff} = \frac{\hbar w}{2} \coth\left(\frac{\hbar w}{2k_B T}\right) \quad (3.25)$$

と置くことによって

$$J(q) \cong \frac{w}{2p} e^{-A/k_B T_{eff}} \quad (3.26)$$

となる。Linkらは1次元の表現を多次元に拡張する表現を提案した。しかし、ここで w は有効角振動数 w_{eff} として考えねばならず、弦の有効角振動数 w_{eff} をどう置くかということが問題になる。そこで(3.16)式の古典的な振動数を用いると²⁾、

$$n_{eff} = 0.26 \left(\frac{U_0}{Gb^3} \right) n_D = 2.5 \times 10^{10} \text{ s}^{-1} \quad (3.27)$$

と見積もられる。パラメータには内部摩擦測定データを理論曲線でフィッティングして得られた $U_0 = 0.045 \text{ eV}$ 、アルミニウムの場合の値 $Gb^3 = 4.225 \text{ eV}$ 、またデバイ振動数 $n_D \approx 9 \times 10^{12}$ を用いた。(3.25)式で w を w_{eff} として量子トンネリングが起こるクロスオーバー温度 T^* が求められる。高温では $T_{eff} = T$ となるが、低温では $k_B T_{eff} \approx \hbar w_{eff} / 2$ となる。この近似からクロスオーバー温度は

$$T^* = \frac{\hbar w_{eff}}{2k_B} \quad (3.28)$$

と表され、(3.27)式を用いることで

$$T^* \cong 0.6 \text{ K} \quad (3.29)$$

と見積もられる。この値は実験値とよい一致を示している。

§4 簡単な系によるシミュレーション

4.1 バネでつながれた 3 質点モデル

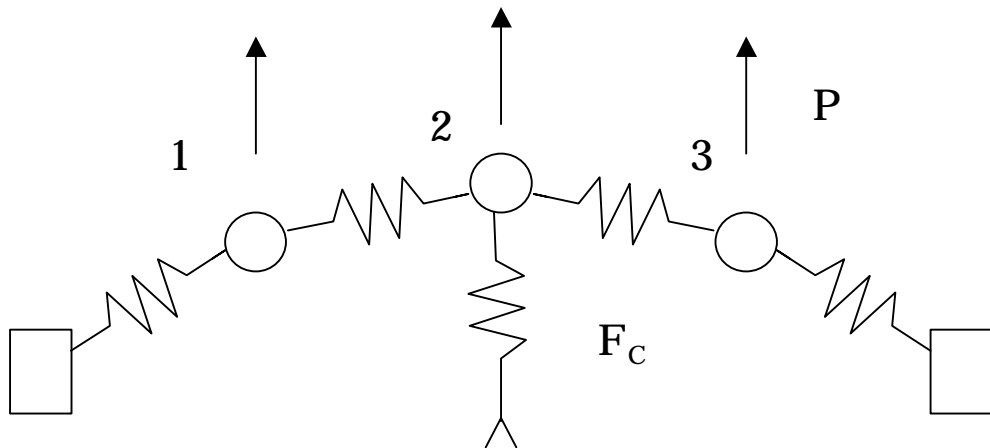


図 4.1 バネでつながれた 3 質点モデル

転位のトンネル効果を記述するためには、有効振動数をどう考えるかということが重要になる。そこでピン止め点からの弦の離脱を、より直感的かつ視覚的に理解するため、ダブルループの近似としてバネでつながれた 3 質点系によるモデルを考える²⁾。図 4.1 のように弦を 3 つの質点 (質点 1, 2, 3) に分け、それぞれをバネ定数 k のバネでつなぎ、両端を固定する。バネ定数 k は、張力を T 、質点間の水平方向の距離を l とすると、質点の変位が十分小さいとして

$$k = \frac{T}{l} \quad (4.1)$$

と表される。質点の動きは垂直方向 (y 方向) のみに制限し、各質点の変位を y_i ($i=1, 2, 3$) とする。応力 P を各質点に加え、中心の質点 (質点 2) はピン止め力 $F_c(y_2)$ でピン止めされている。すべての質点の質量を m とし、

質点の変位が水平方向の距離に対して十分小さいとすると、それぞれの質点の運動方程式は

$$\left. \begin{aligned} m\ddot{y}_1 &= k y_2 - 2k y_1 + P \\ m\ddot{y}_2 &= k y_1 - 2k y_2 + k y_3 + P + F_c(y_2) \\ m\ddot{y}_3 &= k y_2 - 2k y_1 + P \end{aligned} \right\} \quad (4.2)$$

と表される。系のポテンシャルエネルギーは

$$V = k(y_1^2 + y_2^2 + y_3^2) - k(y_1 y_2 + y_2 y_3) - P(y_1 + y_2 + y_3) + U_c(y_2) \quad (4.3)$$

となる。ピン止め力 $F_c(y_2)$ によるピン止めエネルギーは(2.5)式の Cottrell の表現式で与えられ、

$$U_c(y_2) = U_0 \frac{y_2^2}{(r_0^2 + y_2^2)} \quad (4.4)$$

である。ここで r_0 はピン止め相互作用の距離、 U_0 はピン止めエネルギーである。

4.2 ポテンシャルマップの計算

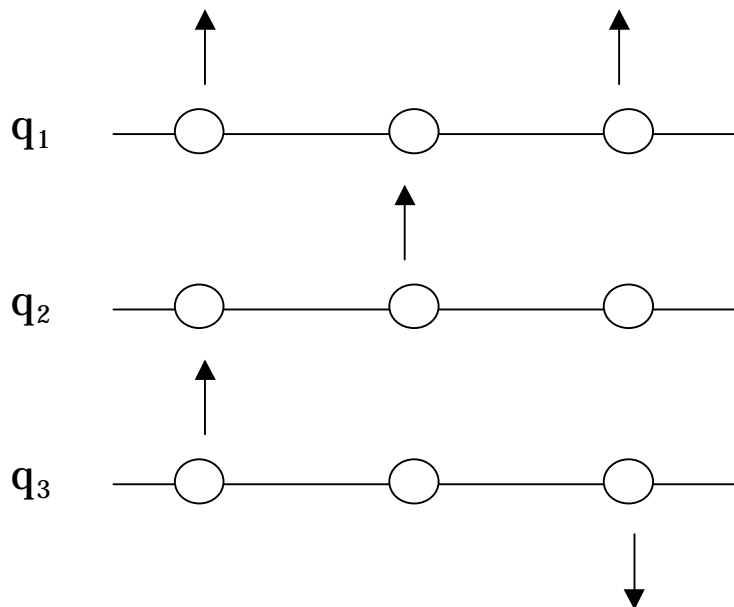


図 4.2 3つの直交モード

(4.3) 式のポテンシャルエネルギーは変数が 3 つ存在するため、そのままポテンシャルマップを作成するのは困難である。そこで、各質点の変位を図 4.2 の 3 つの直交するモード q_1, q_2, q_3 に置き換える。 q_1 は質点 1 と質点 3 が同量で同方向の変位を持ち、質点 2 の変位がゼロのモード、 q_2 は質点 2 が変位を持ち、質点 1 と質点 3 の変位がゼロのモード、 q_3 は質点 1 と質点 3 が同量で逆方向の変位を持ち、質点 2 の変位がゼロのモードである。これらを y_i を用いて行列形式で表すと、

$$\begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} \quad (4.5)$$

と書けるので、

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \end{pmatrix} \quad (4.6)$$

となる。 q_3 はピン止め点の離脱には直接寄与しないモードなので、 $q_3 = 0$ と置いてかまわない。その結果

$$\left. \begin{aligned} y_1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} q_1 \\ y_2 &= q_2 \\ y_3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} q_1 \end{aligned} \right\} \quad (4.7)$$

となる。これを(4.3)式に代入すると、 q_1, q_2 座標での系のポテンシャルエネルギーを求めることができ、

$$V(q_1, q_2) = k(q_1^2 + q_2^2) - \sqrt{2}kq_1q_2 - P(\sqrt{2}q_1 + q_2) + U_0 \frac{q_2^2}{(r_0^2 + q_2^2)} \quad (4.8)$$

となる。適当な応力を与えるとこのポテンシャルエネルギーはピン止め状態と離脱状態に対応する 2 つの極小値と、それらに挟まれた 1 つの極大値を持つ。これらの極値はポテンシャルの q_1, q_2 方向の傾きをゼロとすること

によって得られる。

$$\frac{\partial V}{\partial q_1} = 2kq_1 - \sqrt{2}kq_2 - \sqrt{2}P = 0$$

$$\therefore q_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(q_2 + \frac{P}{k} \right) \quad (4.9)$$

$$\frac{\partial V}{\partial q_2} = 2kq_2 - \sqrt{2}kq_1 - P + \frac{2U_0 r_0^2 q_2}{(r_0^2 + q_2^2)^2} \quad (4.10)$$

(4.9) 式を (4.10) 式に代入することで q_2 に関する式

$$kq_2^5 - 2Pq_2^4 + 2kr_0^2 q_2^3 - 4Pr_0^2 q_2^2 + (kr_0^4 + 2U_0 r_0^2) q_2 - 2Pr_0^4 = 0 \quad (4.11)$$

が得られる。極値の座標はニュートン法を使ってこの式を解くことで求められる。パラメータは Al 結晶の場合を想定し、 r_0 は原子面間隔の半分として計算した (図 2.2 参照)、 $r_0 = 1.17 \text{ \AA}$ 、 U_0 は内部摩擦測定データを理論曲線でフィッティングして得られた、 $U_0 = 0.055 \text{ eV}$ 、バネ定数は転位線を伝わる音の速度または張力を再現するように決定された、 $k = 0.03 \text{ N/m}$ を用いた。トンネル効果は力学的離脱応力の約 95% の応力を与えた場合に観測されるので、 P は力学的離脱応力の約 95% の値、 $P = 1.51 \times 10^8 \text{ eV/m}$ を用いた。力学的離脱応力は、応力を加えていって離脱状態に相当する極値しか存在しなくなったときの応力の値として (4.11) 式から求めた。

ポテンシャルエネルギーの等高線は (4.8) 式で V を定数として q_1 の 2 次関数として q_1 を解くことで得られる。

$$kq_1^2 - \sqrt{2}(kq_2 + P)q_1 + kq_2^2 - Pq_2 + U_0 \frac{q_2^2}{(r_0^2 + q_2^2)} - V = 0$$

$$q_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(q_2 + \frac{P}{k} \right) \pm \sqrt{\frac{1}{2} \left(q_2 + \frac{P}{k} \right)^2 - \left(q_2^2 - \frac{P}{k} q_2 + \frac{U_0}{k} \frac{q_2^2}{(r_0^2 + q_2^2)} - \frac{V}{k} \right)} \quad (4.12)$$

この式に一定のエネルギーの値を代入して得られる q_1, q_2 の値をプロットすることで、等エネルギー線を描いた。

古典的な経路（反応経路）は、ピン止め状態から鞍点を通り離脱点に到達する経路で、その道筋は鞍点から 2 つの極値に向かって、ポテンシャルの負の傾きの値が最も大きくなる方向に小さいステップ（ 10^{-4} Å）を取って行って求めた。

以上のようにして得られたポテンシャルマップを鞍点付近で拡大したものが図 4.3 である。

4.3 考察

図 4.4 は、図 4.3 のポテンシャルマップを作成したときに使用したピン止めエネルギーの大きさを $1/4$

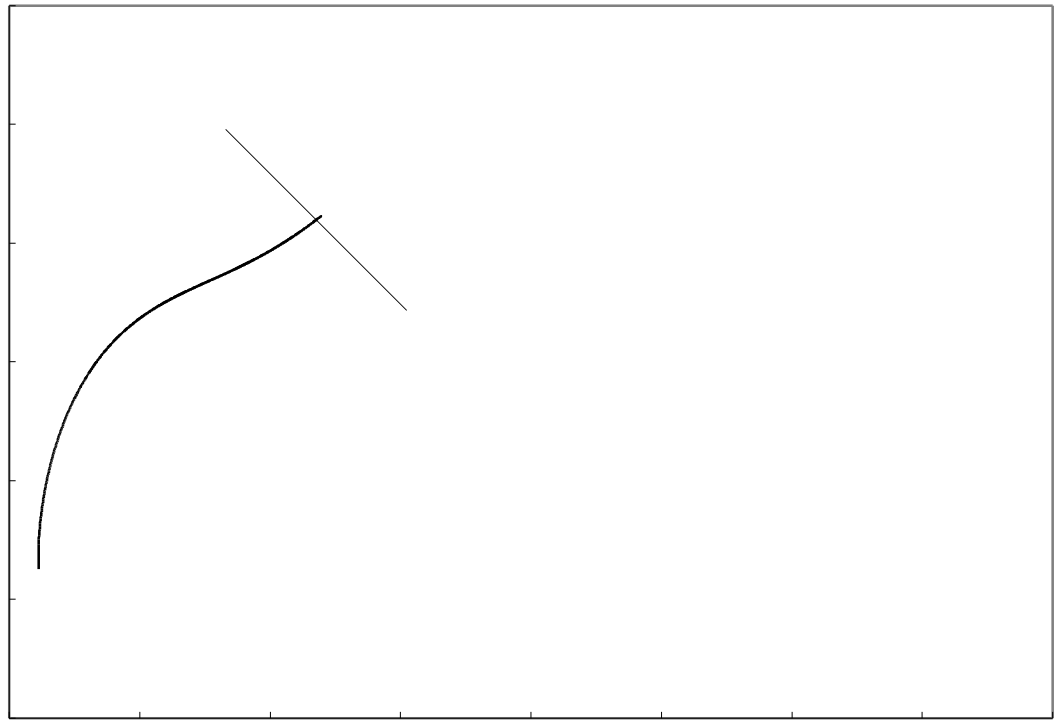
と計算され、 q_2 の値が増大し始める点から鞍点までのエネルギーの差は約 3.4×10^{-4} eV となり、前者のほうが約 20%以下と小さい。このことからトンネル過程が起こる場合には、まず弦の両側の変位が古典的熱ゆらぎで増大し、それから弦の中心部分の質量だけがトンネル効果で離脱すると考えられる。すなわち、この場合、中心点の質量がほぼ有効質量であると考えてよいことになる。

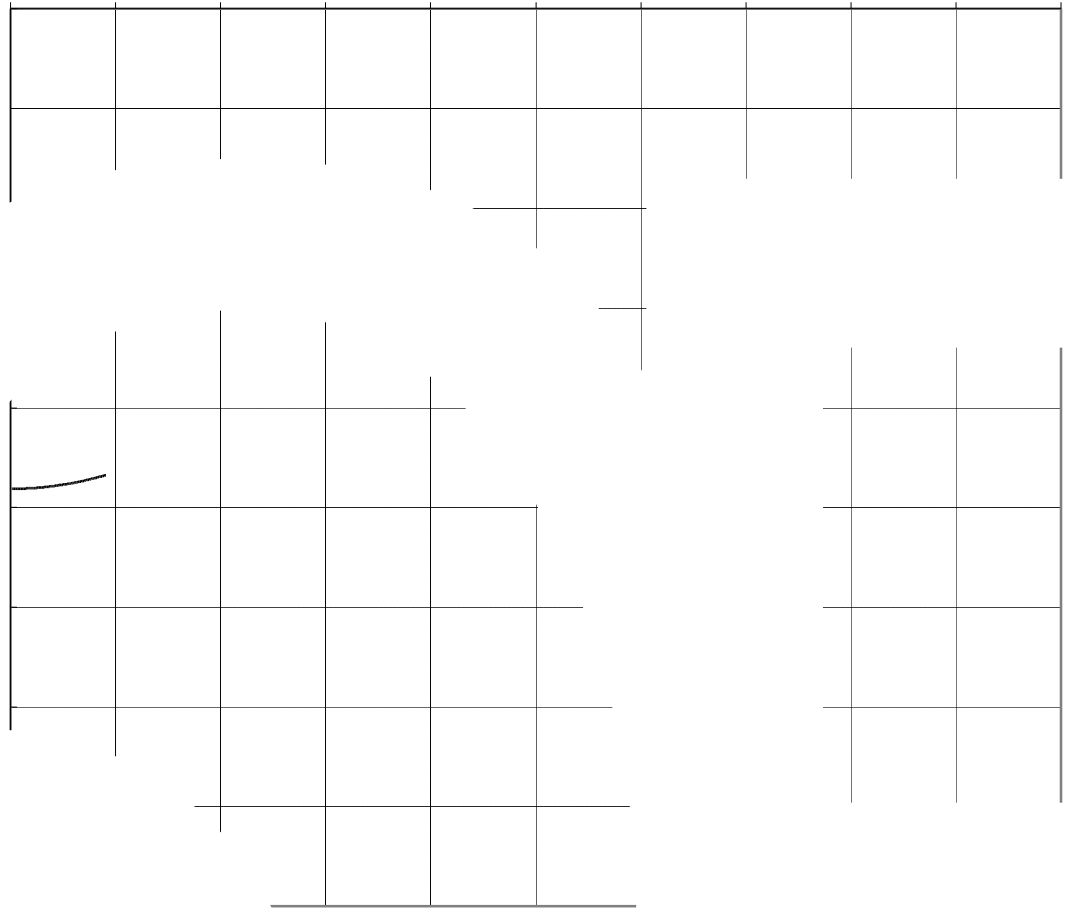
理論的にはクロスオーバー温度は (3.18) 式で示したように $T^* = \hbar \sqrt{\Delta U} / (2k_B w \sqrt{2m})$ であるので T^* は $\sqrt{\Delta U/m}$ に比例していることが分かる。ピン止めエネルギー U_0 は Cottrell の表現で (4.4) 式のように表されているため、ピン止めエネルギーが大きくなるということは活性化エネルギー ΔU の値が大きくなるということを意味する。またピン止めエネルギー U_0 が大きくなると有効質量 m が小さくなることがポテンシャルマップから理解できる。3.2 章で述べた Link らによるトンネル効果の考察では、 T^* は $T^* = \hbar n_{eff} / 2k_B$ と表せるが有効振動数 n_{eff} をどう考えればよいか問題になった。Granato らが計算した (3.16) 式の古典的領域での有効振動数を考えると、この式で振動数 n_{eff} はピン止めエネルギー U_0 に比例している。これは U_0 の増大に伴う ΔU の増大と m の減少を合わせて考えれば、 T^* の 2 つの表現 (3.18) 式、(3.28) 式の間で整合性を導くことができる。したがって、この 3 質点モデルによるシミュレーションの結果は Link らの考察に Granato らの古典的な振動数を用いることを支持している。

図 4.5 は $U_0 = 0.055$ eV、 $P = 1.51 \times 10^8$ eV/m の場合に、エネルギーを古典的な経路に沿ってプロットしたもの (実線) と、3 つの極値を直線でつないだ経路、すなわち $q_1 = 1/\sqrt{2}(q_2 + P/k)$ となる直線に沿ってプロットしたもの (破線) である。この比較から、2 つの経路は障壁の高さはどちらも鞍点を通る経路であるため同じであるが、障壁の幅は古典的な経路をたどった

ほうが小さいことがわかる。(3.17) 式の量子トンネル離脱確率の表現からわかるように障壁の幅が小さいほどトンネル過程で離脱する確率は大きくなる。したがって量子トンネル離脱はこの古典的な経路の途中から起こると考えられる。







§5 まとめ

- 1) 転位のトンネル過程による離脱は、多次元多自由度系での量子効果の問題であるため、正確には解かれていない。そこでバネによってつながれた3質点の系で転位弦の離脱を近似しシミュレーションを行った。
- 2) q_1 モード(両端の質点と同量で同方向の変位を持ち、中央の質点の変位がゼロのモード)、 q_2 モード(中央の質点の変位を持ち、両端の質点の変位がゼロのモード)を座標と取り、 q_1, q_2 座標で2次元のポテンシャルマップを作成した。
- 3) ピン止めエネルギーを変えて離脱の経路を見ると、ピン止めエネルギーが小さいときは経路が直線的であるが、ピン止めエネルギーが大きくなると、経路はまず両端の質点の変位が増大し(q_1 モード)、その後中央の質点の変位が増大する(q_2 モード)ことで離脱が起きることがわかった。
- 4) 経路上で、ピン止め点から q_1 の値が増大する範囲と、そこから q_2 が増大して鞍点まで至る範囲のエネルギー変化を計算すると、前者のほうが後者と比べ約20%程度と小さい。トンネル過程が起こる場合、まず変位 q_1 が古典的過程で増大し、それから主として q_2 モードにより準1次的にトンネル効果が起きて離脱すると考えられる。したがって中心点の質量がほぼ有効質量であると考えてよいことになる。

謝辞

本論文を作成するにあたり、最後までご指導してくださいましたハドロ
ン研究室のスタッフの皆様には感謝いたします。

また、直接ご指導くださり、多くの助言をくださいました小杉俊男講師に
深く感謝いたします。

最後にさまざまな協力をしてくれた友人諸氏に感謝します。

参考文献

- 1) A.V.Granato and K.Lücke, J.Appl.Phys. 52 (1981) 7136.
- 2) D.Mckay, Ph.D. Thesis, University of Illinois (1998).
- 3) T.Kosugi, D.Mckay and A.V.Granato, J.de Physique 6 (1996) C8 - 863.
- 4) 小杉俊男 金属, 68 (1998) 983
- 5) 鈴木秀次 : 転位論入門 (アグネ、1967)
- 6) 鈴木平 編 : 転位のダイナミックスと塑性 (裳華房、1985)
- 7) A.V.Granato, K.Lücke, J.Schlipf and L.Teutonico, J.Appl.Phys. 35 (1964) 2732
- 8) B.Link, R.I.Epstein and G.Baym, Astrophys.J. 403 (1993) 285