[研究論文]　ブロッホ関数分散式とランダウ反磁性

宍戸文雄

電気電子情報工学科

Dispersion relation of Bloch function and Landau diamagnetism

Fumio SHISHIDO

Abstract

The possibility of anomalous Landau diamagnetism caused by anomalous dispersion relation in Bloch functions is examined. For this purpose the general restriction on the dispersion relation of Bloch function is investigated in one dimensional case. The analogy between the wave equation as a function of x and the mechanical equation as a function of time is utilized. By the aid of Lagrangean action integral, variations of some important integrals are estimated. The conclusion is given that the derivative of the energy by the momentum exactly equals the current of one electron. The exact relation, although evident in the case of free electron, imposes a rather strict restriction on the dispersion relation of Bloch function.

Keywords: Analogy of action integral to wave equation, Dispersion relation and current

1. 序

大きなランダウ反磁性が実現されると、直接熱電変換等への応用に有望である。しかしその基礎理論の解明は難しい。巨大な反磁性と巨大な常磁性の差としてランダウ反磁性が現れる。従って、近似に基づいた計算の誤差は計算結果よりも大きく信頼できないことが多い。他の分野では有力な近似も、この分野では無効であることが多い。[1-5]

ブロッホ関数の分散式が特異な形を持つ場合、大きなランダウ反磁性が現れるとの予測がある。閉じた軌道の電子が磁界を印加すると開いた軌道へと激変する、従って巨大な磁化が現れる等の例である。分散式が特異な形を持つとの予測にもやはり何かの近似が含まれる、従って、その妥当性は注意深く吟味しなくてはならない。[6-10]

どのようなポテンシャルが特異な分散式を実現するのか、或いは、逆に任意の分散式を仮定したとき、それを実現させるポテンシャルが存在可能なのかを調べる。有限温度でのフォノンの振幅が分散式に及ぼす効果は論じない。ここでは議論の出発点として一次元のポテンシャルと分散式の関係を調べる。

2. 波動方程式

一次元の波動方程式を次の形に表す。

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2u}{dx^2}-[E-U(x)]u=0 \tag{1}$$

論点は分散式の形であり物性の量ではないので、質量とプランク定数は1とおく。ポテンシャル$U(x)$が$x=0$の両側で対称の場合を最初に論じ、最後に一般的な場合を論ずる。振幅と位相の因子を、

$$u(x)=A(x)\exp[i\int k(x)dx]$$

と表して(1)に代入すると、先ず虚数部は、

$$2\frac{dA(x)}{dx}k(x)+A(x)\frac{dk(x)}{dx}=0$$

となり、これを積分すると、

$$k(x)[A(x)]^2=k_0{A_0}^2 \tag{2}$$

但し　$k_0=k(0),\quad A_0=A(0)$

が得られる。これは流れの保存則である。
次に実数部は、

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2A(x)}{dx^2}+\frac{1}{2}[k(x)]^2A(x)-[E-U(x)]u=0 \tag{3}$$

となり、これに(2)を代入すると、

$$-\frac{1}{2}\frac{d^2A(x)}{dx^2}+\frac{1}{2}(k_0A_0{}^2)^2\frac{1}{[A(x)]^3}-[E-U(x)]A(x)=0 \tag{4}$$

が得られる。この(4)が以下の議論の中心となる。$k_0=0$ の場合には $u(x)$ の実数解即ち定在波が得られる。偶関数と奇関数のどちらも一周期離れた点で $A(x)=A_0$ とはならず、従って Bloch 関数とはならない。偶関数の実数部と奇関数の虚数部を適当な比率で重ね合わせる、

即ち k_0 を適当な値に定めると $A(x)$ は周期関数、従って $u(x)$ は Bloch 関数となる。そのときの A_0 の値は一周期での規格化条件で決まる。

さて、(4)を次の形に書き直す。

$$\frac{d^2A}{dx^2}=-\frac{\partial}{\partial A}[V(A)+W(A,x)] \tag{5}$$

$$V(A)=\frac{1}{2}(k_0A_0{}^2)^2\frac{1}{A^2},\ W(A,x)=[E-U(x)]A^2 \tag{6}$$

力学での時間を x に対応させると力学での結果の類推が得られる。ポテンシャルは、x に依存しない $V(A)$ と x に依存する $W(A,x)$ との和である。

先ず、力学でのエネルギーの時間微分に対応する次式が得られる。

$$\frac{d}{dx}[K(A)+V(A)+W(A,x)]-\frac{\partial}{\partial x}W(A,x)=0,$$

$$\text{ここで}\quad K(A)=\frac{1}{2}(\frac{dA}{dx})^2 \tag{7}$$

次の関係

$$A[\frac{\partial}{\partial A}V(A)]=-2V(A),\ A[\frac{\partial}{\partial A}W(A,x)]=2W(A,x)$$

を利用すると、(5)は次の形に書き直せる。

$$\frac{1}{2}A(\frac{d^2A}{dx^2})=V(A)-W(A,x) \tag{8}$$

左辺は次式に変形できる。

$$\frac{1}{2}A(\frac{d^2A}{dx^2})=\frac{1}{4}\frac{d^2}{dx^2}(A^2)-\frac{1}{2}(\frac{dA}{dx})^2 \tag{9}$$

エネルギー微分の(7)と加速度の式(8)に加えて、さらにラグランジュ関数 $L(A,\frac{\partial A}{\partial x},x)$ を利用する。先ず(7)を積分すると、

$$K(A)+V(A)+W(A,x)$$
$$=\int[\frac{\partial}{\partial x}W(A,x)]dx+\frac{1}{2}(k_0A_0)^2+[E-U(0)]A_0{}^2 \tag{10}$$

次に(9)を(8)に代入して、

$$K(A)+V(A)-W(A,x)=\frac{1}{4}\frac{d^2}{dx^2}(A^2) \tag{11}$$

ラグランジュ関数の定義は、

$$K(A)-V(A)-W(A,x)=L(A,\frac{dA}{dx},x) \tag{12}$$

3 式 (10)(11)(12) を加減すると、左辺の各項、$K(A),V(A),W(A,x)$ のそれぞれが右辺の加減で表される。極めて有力な一般式である。

3. 変分原理

さて、議論の目的である分散式を調べることは、エネルギーを変えたとき一周期での位相変化がどう変わるかを調べることである。そのために(10)(11)(12)のそれぞれを一周期積分したものの変分を調べる。(12)の積分とは即ちラグランジュの作用積分である。(10)(11)の変分と(12)の変分は意味が異なる。(10)(11)では、$E\to E+\delta E$ と変化させたときに(4)を満足する新しい解での、

$k_0+\delta k_0, A_0+\delta A_0, A(x)+\delta A(x)$ を調べるということである。それに対して(12)のラグランジュ関数の変分とは、ラグランジュ関数を変えない、即ち、E,k_0,A_0 を変えずに $A(x)$ だけを変化させる、丁度(10)(11)の変分と同じだけ変化させる。それは(4)を満足しない仮想的変位 $A(x)+\delta A(x)$ を考えるということである。$V(A)$ 等の(10)(11)での変分を $\Delta V(A)$ 等、(12)での変分を $\delta V(A)$ 等、と書くことにすると、

$$\Delta K(A)=\delta K(A),$$
$$\Delta V(A)=\delta V(A)+\frac{1}{2A^2}\delta(k_0A_0{}^2)^2, \tag{13}$$
$$\Delta W(A,x)=\delta W(A,x)+A^2\delta E$$

さて、(11)を一周期で積分する。右辺は周期関数の差であるから消える。次に積分の変分を考える。$E\to E+\delta E$ に対応する新しい解もやはり周期関数であるから、右辺が消えていることは変わらない。従って、

$$\int\delta K(A)dx+\int\Delta V(A)dx-\int\Delta W(A,x)dx=0 \tag{14}$$

次に(12)の一周期積分即ち作用積分の変分を考えると、

$$\int\delta K(A)dx-\int\delta V(A)dx-\int\delta W(A,x)dx$$
$$=(\frac{\partial A}{\partial x})\delta A\Big|=0 \tag{15}$$

端の項である右辺は周期関数の差であるから消える。

さて、(14)から(15)を引くと、

$$\int[\Delta V(A)+\delta V(A)]dx-\int[\Delta W(A,x)-\delta W(A,x)]dx$$
$$=0 \tag{16}$$

左辺の第一項と$\delta k(x)$の関係を調べる。

$$V(A)=\frac{1}{2}(k_0A_0{}^2)^2\frac{1}{A^2}=\frac{1}{2}(k_0A_0{}^2)k(x) \tag{17}$$

上式で$V(A)$をAで表した式と$k(x)$で表した式とのそれぞれの変分は次式となり、

$$\Delta V(x)=\delta V(x)+(k_0A_0{}^2)\frac{1}{A^2}\delta(k_0A_0{}^2)$$
$$=\frac{1}{2}k(x)\delta(k_0A_0{}^2)+\frac{1}{2}(k_0A_0{}^2)\delta(k(x))$$

それぞれを比較して次式が得られる。

$$\Delta V(x)+\delta V(x)=(k_0A_0{}^2)\delta(k(x))$$

これを(16)の第一項に代入し、第二項には(13)を代入すると、

$$(k_0A_0{}^2)\delta\int k(x)dx=\delta E\int[A(x)]^2dx$$

規格化条件を考慮すると結局、

$$\frac{\delta E}{\delta\int k(x)dx}=(k_0A_0{}^2) \tag{18}$$

という結論が得られた。これは次の形にも表せる。

$$\frac{\delta E}{\delta p}=J \tag{19}$$

左辺はいわゆる群速度、右辺は流れである。自由電子の場合には自明な結果であるが、それをブロッホ関数に拡張したものが厳密に成立することは意義深い。波束の拡がりを調べるとき拡がりの速さが流れに近い筈との直感的推測から(19)に近い結論は得られそうに見える。しかしその厳密な議論は難しい。議論の目的は分散式が複雑な形の場合であるが、その場合には波束の拡がりの議論は無効であろう。(19)の意味は、右辺即ち一つの固有解の数値から、左辺即ち隣の固有解の数値が判るという意義深い内容である。

ここまでの議論は厳密である。分かり易さのために$U(x)$は対称という仮定をしたが、結論(19)を導く過程に対称性は使われていない。従って(19)は一般的に成立する。(10)(11)(12)から$K(A),W(A,x)$を見積もる場合には対称性無しでは難しくなる。

4. 流れの変分

次に$E\to E+\delta E$と変化させたときのJの変化を調べよう。そのために次式を利用する。

$$\frac{d}{dx}\left[\frac{dA_1}{dx}A_2-A_1\frac{dA_2}{dx}\right]=\frac{d^2A_1}{dx^2}A_2-A_1\frac{d^2A_2}{dx^2} \tag{20}$$

$E\to E+\delta E$と変化させる前と後の関数をA_1,A_2として比較する。(20)の一周期積分を評価する。左辺は消える。右辺は

$$A\delta\left[\frac{d^2A}{dx^2}\right]-\left[\frac{d^2A}{dx^2}\right]\delta A \tag{21}$$

(4)をJで書き直すと、

$$\frac{d^2A(x)}{dx^2}=J^2\frac{1}{[A(x)]^3}-[E-U(x)]A(x)$$

$$\delta\left[\frac{d^2A(x)}{dx^2}\right]=J^2\frac{1}{[A(x)]^3}\left[2\frac{\delta J}{J}-3\frac{\delta A(x)}{A(x)}\right]$$
$$-[E-U(x)]\delta A(x)-A(x)\delta E$$

これを(21)に代入して積分し、規格化条件を考慮すると、

$$\frac{\delta J}{J}\int\frac{dx}{A^2}=2\int\left(\frac{\delta A}{A^3}\right)dx-\frac{1}{2J^2}\delta E \tag{22}$$

$U(x)$が対称の場合には中心点と半周期離れた点とで、$A(x)$は極値である。それを使うと(22)の上限と下限の見積もりが可能となる。対称の仮定が無い場合の評価は難しい。エネルギーの変分と流れの変分の関係を示す(22)は(19)への補足となる。

5. 考察と結論

波動方程式を調べるのに力学の類推が有用である。$K(A),V(A),W(A,x)$のそれぞれの評価が可能となる。作用積分の変分を調べることにより、重要な結論(19)が得られた。一つの固有解からその近傍の分散式は決まってしまう。但し、ここでの議論は一次元の場合であり、３次元ではどうなるかを今後追求しなくてはならない。３次元でも(19)が成立するのか、それとも特異な分散が現われる可能性があるのかを今後の課題とする。

References

[1]S. S. Nedorezov, JETP LETT 33, 215(1981)

[2]S. S .Nedorezov, Sov. J. LTP JETP6, 449(1981)

[3]F. Shishido, Phys. Lett. A 152, 443(1991)

[4]F. Shishido, Research Reports of Kanagawa Institute of Technology NoB-26(2002)

[5]M. Y. Azbel, Phys. Rev. Lett. 82,442(1999)

[6]M. Steinberg, W. Ebeling and J. Ortner, Phys.Rev. E

61,2290(2000)
[7]S. S. Nedorezov, Sov. J. LTP JETP 16, 1287(1991)
[8]S.S.Nedorezov and E.F.Rofe-Bekotova, Low Temp. Phys. 23,39(1997)
[9]R.Z.Peierls,Phys. 81,186(1933)
[10]F.Shishido,Phys.Lett. A152,427(1991)