

有限高の仕事関数でのランダウ反磁性

宋戸文雄

電気電子工学科

Landau Diamagnetism in a finite height work function

Fumio SHISHIDO

Abstract

The exact treatment of Landau diamagnetism by using the $r-\epsilon$ (energy versus center of orbit) trajectories, which was developed by the author for the case of infinite work function, is generalized to an arbitrary shape of potential. The calculation for the case of finite height square potential is carried out. Exact result is given that no enormous divergence appears.

Key Words: Generalization of $r-\epsilon$ trajectories, Finite work function

1. 序論

ランダウ反磁性の基礎論においては未解明の問題が残されている。その一つの例は表面ポテンシャルの影響で表面に局在する巨大な反磁性が生ずることがあるのかどうかということである。これは以前はよく取り扱われたのであるが、その後未解明のまま放置されているようである[1-7]。それをここで論ずる。

注意すべきことは問題の取り扱い方の厳密性である。個々の電子の磁性への寄与の計算には厳密性が要求され、近似に対して注意深くなくてはならない。なぜならば、結果は巨大な反磁性と巨大な常磁性とのわずかな差で決定されるからである。自由電子モデルという最も簡単なものであれ、あるいは適当な外部ポテンシャル内での電子というモデルであれ、厳密な計算結果は現実に対しての示唆的なものと考えられる。近似が許される場合として次の2つ例がある。その1は巨大な反磁性と巨大な常磁性とのわずかな差が厳密な表式で得られそれが定符号の積分であるとき、その表式への近似が許される。その2は近似による誤差が最終結果よりも高次であることが明らかなきときである。その反対に、例えば self-consistent field approximation は出発点から近似を含み、それによる誤差がどんな次数か明らかでないため、その計算結果は無意味である。[8, 9]

今までの研究では界面を無限大の階段型ポテンシャルとしたものが多かった。この場合には巨大な表面効果は生じないとする結論が多い[4, 6, 7]。但し $\propto H^{-1/3}$ の発散に関してはそれが存在しないという結論もあるが、筆者の意見では未だ未解決である[5, 7, 10]。

ここでは界面が有限の階段型ポテンシャルである場合を論ずる。無限大の場合に対して筆者により開発された厳密な方法、すなわちモーメントを r - a 軌跡 で表す方法が一般の場合にも拡張出来ることを示す。有限の階段型ポテンシャルと無限大との差には巨大な発散は生じないことが正確に導かれる。

2. ランダウ反磁性

z 方向の一様な磁場内の大きな箱 $LL_y L_z (-L < x < 0)$ に閉じ込められた自由電子を考える。ベクトルポテンシャル $[0, (L+x)H, 0]$ を用いて 波数が k_y, k_z で指定される状態のハミルトニアンはつぎの形に表される。[2, 7]

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} p_x^2 + \frac{1}{2} m\omega^2 (x-a)^2 + \frac{1}{2m} (\hbar k_z)^2 + V(x) \quad (1)$$

ここで $\omega \equiv eH/mc$ はサイクロトロン周波数、 $a \equiv -L - (c/eH)k_y$ は軌道の中心座標、 $V(x)$ は表面ポテンシャルを表す。

波動関数は $\phi(x, E, a) \exp(ik_y y + ik_z z) (L_y L_z)^{-1/2}$ の形に書ける。

一個の電子の電流の演算子 $j \equiv -e\omega(x-a)$ の期待値 $\langle j \rangle$ は次の形に書ける。

$$\langle j \rangle \equiv -e\omega \int (x-a) |\phi|^2 dx,$$

エネルギー $E \equiv \langle H \rangle$ を a で微分した値に関して次の重要な関係が成立する。

$$\frac{\partial E}{\partial a} = \frac{m\omega}{e} \langle j \rangle \quad (2)$$

モーメント演算子 j_x の期待値 $\langle j_x \rangle$ によって、磁化 \mathbf{M} の表面効果 $\Delta \mathbf{M}$ は次の形に表される。[7]

$$\frac{c}{2} \Delta M / L_y L_z = \int_r x J dx = \int dk_z \frac{e}{2\pi^2 \hbar} \sum_n \left[\left(\frac{m\omega}{e} \right) \int_{-D_n}^{\infty} \langle j_x \rangle da + D_n \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \right] \quad (3)$$

結局、表面ポテンシャルの関数としての $\langle j_x \rangle$ が分かれば $\Delta \mathbf{M}$ が分かる。そのため以下 $\langle j_x \rangle$ を論ずる。

3. 波動関数

位相を実にとり、 $\phi(x, E, a)$ は次の形に書ける。[2, 7]

$$\phi(x, E, a) = a^{1/2} u(t, r) / \left[\int [u(t, r)]^2 dt \right] \quad (4)$$

$$\text{ここで } a^2 \equiv \frac{m\omega}{\hbar}, \quad t \equiv a(x-a), \quad \left(r + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \equiv E - \frac{(\hbar k_z)^2}{2m}, \quad (5)$$

$$\text{であり} \quad \left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} - t^2 + (2\zeta + 1) \right] u(t, r) = 0 \quad (6)$$

界面で高さ $2B(\hbar\omega)$ の階段があるとする場合には、金属内 $t < b$ ($b = -a_0$) で $\zeta = r$, 金属外 $b < t$ で $\zeta = r - B$ 。

直接微分することで次の2つの公式が確認できる。

$$2 \int t u^2 dt = [t^2 - (2\zeta + 1)] u^2 - \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 \quad (7)$$

$$4 \int [t^2 - (\zeta + \frac{1}{2})] u^2 dt = t [t^2 - (2\zeta + 1)] u^2 - t \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 + u \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right) \quad (8)$$

上記の2式を $t < b$ と $b < t$ との両領域で適用して加えると、右辺は $t = \pm\infty$ で消えてしまい、 $t = b - 0$ と $t = b + 0$ との差だけが残る。

$$\int t u^2 dt = -B [u(b)]^2 \quad (9)$$

$$2 \int [t^2 - (\zeta + \frac{1}{2})] u^2 dt = -bB [u(b)]^2 \quad (10)$$

上記の (9), (10) を次の $\langle j \rangle, \langle j_x \rangle$ の定義式 (11), (12) に代入する。

$$\langle j \rangle = - \left(\frac{e\hbar}{m} \right) a \int t u^2 dt / \int u^2 dt \quad (11)$$

$$\langle j_x \rangle = - \left(\frac{e\hbar}{m} \right) \int (-b + t) t u^2 dt / \int u^2 dt \quad (12)$$

代入された結果と (2) とを組み合わせ、結局、

$$\frac{\partial r}{\partial a} = aB [u(b)]^2 / \int u^2 dt \quad (13)$$

および

$$\langle j_x \rangle = - \left(\frac{e\hbar}{m} \right) \left[\left(r + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2} a \frac{\partial r}{\partial a} - B \int_b^{+\infty} u^2 dt / \int u^2 dt \right] \quad (14)$$

が得られ、さらに (14) の第3項に (13) を代入して、

$$\langle j_x \rangle = - \left(\frac{e\hbar}{m} \right) \left[\left(r + \frac{1}{2} \right) - \frac{\partial r}{\partial a} \left\{ \frac{1}{2} a + a^{-1} \int_b^{+\infty} [u(t)/u(b)]^2 dt \right\} \right] \quad (17)$$

$B \rightarrow \infty$ のときは (17) の最後の項が消え、(13) においては $2B[u(b)]^2 \rightarrow [u'(b)]^2$ となった。これ以降 (17) を使って $\Delta \mathbf{M}$ を評価する計算をする。

4. 表面効果

$B \rightarrow \infty$ のときは図に示すように $r=n-0$ で $\Sigma a=0$, また $r=n+0$ で Σa =左端の a である。このことが ΔM の評価に見通しのよい議論を可能にした。 B が減少すると a は少し増加する。それを評価しよう。

$$a(r, m) = a_0(r, m) + a^{-1}g(r, m)$$

と書く。 $a_0(r, m)$ は $B \rightarrow \infty$ のときの値、 $g(r, m)$ はその差、 r は (17) に現れる r でありエネルギーに対応する。 m は $r-a$ 軌跡 (図) の量子数であり与えられた r に対して $m=0, 1, 2, \dots, [r]$ の branch が有る。

g を評価するため界面の左近傍を正弦波で右近傍を指数関数で近似する。この近似は H に関しての高次の誤差しか与えないことが分かっている。

u'/u の連続条件から

$$k \cot(kg) = \kappa \quad (18)$$

$$\text{ここで} \quad k^2 = (2r+1) - t^2, \quad \kappa^2 = 2B - k^2$$

これを解いて、

$$\sin(kg) = Ak \quad \text{ただし} \quad A = (2B)^{-1/2} \quad (19)$$

\arcsin を A の3次まで展開して、

$$g = A[1 + (1/6)(Ak)^2]$$

$g(r, m)$ を r を固定して m に関して加える。そのためつぎの分布関数をかけて積分する。

$$[(2r+1) - t^2]^{1/2} / \pi \quad (20)$$

その結果、

$$\Sigma g(r, m) = (r+1/2)A[1 + (1/8)A^2(2r+1)] \quad (21)$$

次に (17) の [] 内の第3項の積分は $1/2\kappa$ であり、これを評価する。

$$\kappa^{-1} = (2B - k^2)^{-1/2} = A[1 + (1/2)(Ak)^2] \quad (22)$$

(21) を得たと同様にこれを m に関して加える。

$$\Sigma \kappa^{-1}(r, m) = (r+1/2)A[1 + (3/8)A^2(2r+1)] \quad (23)$$

(21) と (23) を使い (17) を評価する。(17) はそれを a で積分したものが (3) の右辺に現れるので

$$\int \langle j_x \rangle da = - \left(\frac{e\hbar}{m} \right) \int da \left[\left(r + \frac{1}{2} \right) - \frac{\partial r}{\partial a} \left\{ \frac{1}{2}a + a^{-1} \int_b^{+\infty} [u(t)/u(b)]^2 dt \right\} \right]$$

を評価すればよい。

右辺の第1項は反磁性の寄与

$$- \int (r+1/2) da$$

であり、第2項と第3項とは常磁性の寄与

$$(1/2) \int (a + a^{-1} \kappa^{-1}) dr$$

である。 $B \rightarrow \infty$ の場合との差を取り出すと、
反磁性の寄与は

$$-a^{-1} \int (r+1/2) dg \quad (24)$$

常磁性の寄与は

$$a^{-1} (1/2) \int (g+k^{-1}) dr \quad (25)$$

と書ける。この2つ寄与を $n-1-0 < r < n-0$ の範囲で積分する。 a^{-1} はさしあたり省略する。
まず反磁性の寄与は、

$$\begin{aligned} n-1-0 < r < n-1+0 \text{ での寄与は左端の1本だけの branch; } g(r=n-1, m=n-1) \text{ による寄与であり、} \\ \text{それは} \quad (n-1/2)A \quad (26) \end{aligned}$$

$n-1+0 < r < n-0$ での寄与を考える。両端付近の branch では (20) から分かるように一様な A の平行移動をしている。そして両端付近以外では branch は直線で近似しても高次の誤差しか生じないことが分かっているので、その寄与は

$$n[(\sum g(r=n)-A) - \sum g(r=n-1)] \quad (27)$$

と書け、(21) により (27) を評価すると、結局 (26) と (27) の和は、

$$-A[(n-1/2) + (1/2)A^2n^2] \quad (28)$$

他方、常磁性の寄与は (25) を評価して、

$$n-1-0 < r < n-0 \quad (1/2) \sum (g+k^{-1})$$

と書けて、これは (21) と (23) とから

$$A[n + (1/2)A^2n^2] \quad (29)$$

となる。(28) と (29) とを加えて結局、

$$n-1-0 < r < n-0 \text{ での総ての寄与は} \quad (1/2)A$$

$$\text{同様な計算で } n-1+0 < r < n+0 \text{ での総ての寄与は} \quad -(1/2)A$$

となり、 $\propto A^3$ の項は消えてしまう。この結果は単に磁性体の x 方向の長さが L から $L+a^{-1}A$ に伸びたということと等価な微小な効果を与えるだけである。

このことが A の高次まで成り立つのかどうかをこれから精密に調べる。

反磁性の寄与 (26) と (27) との和を考えそれから上記の最終結果である $A/2$ の常磁性すなわち $-A/2$ の反磁性をひいておくと結局、

$$n[\sum g(r=n) - \sum g(r=n-1)] \quad (30)$$

常磁性の寄与は (25) から

$$(1/2) \sum (g+k^{-1}) \quad (31)$$

もしも (30) と (31) とが正確に打ち消し合うならば上記の予想が成り立つ。そのことを証明しよう。(20) の分布関数 $\rho(r, t)$

$$\rho(r, t) = [(2r+1)-t^2]/\pi k/\pi \quad (20)$$

を使って (31) を正確に書く。(18) から

$$\Sigma g(r, m) = \int [k^{-1} \arcsin(Ak)] \rho dt = \int \arcsin(Ak) dt / \pi \quad (32)$$

$$\Sigma k^{-1}(r, m) = \int A[1 - (Ak)^2]^{-1/2} \rho dt \quad (33)$$

(30) で差分を微分に置き換えて

$$n\{\partial[\Sigma g(r=n-1/2)]/\partial n\} \quad (34)$$

(32) で $t = (2r+1)^{1/2} \cos \theta$ と変数変換をすると

$$\Sigma g(r=n-1/2) = \int [(2n)^{1/2} \sin \theta] \arcsin[A(2n)^{1/2} \sin \theta] d\theta / \pi \quad (35)$$

(33) でも同様にして

$$\Sigma k^{-1}(r, m) = \int A(2n)[1 - A^2(2n)(\sin \theta)^2]^{-1/2} (\sin \theta)^2 d\theta / \pi \quad (36)$$

この形にして (35) を n で微分し (34) を計算する。すると (35) の被積分関数の \arcsin の外の n で微分して n をかけると微分する前の半分になり、 \arcsin のなかの n で微分して n をかけたものは丁度 (36) の半分になることが分かる。従って (30) と (31) とは正確に打ち消し合うことが証明された。

5. 一般化

階段型ポテンシャルの高さが無限大の場合と有限の場合の差には発散は現れないという結論が正確に得られたが、このような精密な議論は (17) の $\langle jx \rangle$ を $r=0$ 軌跡で表すという方法で可能になったのであり、 $\langle jx \rangle$ を波動関数から通常の方法で計算するというやり方からは期待し難い。

さらに一般の形のポテンシャルに適用できる一般化された式を導く。

先ず (6) に対応して

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} - t^2 + (2r+1) - v(t) \right] u(t, r) = 0 \quad (37)$$

ただし $(\hbar\omega)v(t) \equiv V(x)$

(7) と (8) とに対応して

$$\int [2t + v'(t)] u^2 dt = [t^2 - (2r+1) + v(t)] u^2 - \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right)^2 \quad (38)$$

$$\int \left\{ 4 \left[t^2 - \left(r + \frac{1}{2} \right) \right] + 2v + tv' \right\} u^2 dt = t [t^2 - (2r+1) + v] u^2 - t \left(\frac{\partial u^2}{\partial t} \right) + u \left(\frac{\partial u}{\partial t} \right) \quad (39)$$

(9), (10) とに対応して, (2), (11) を参照して

$$(\partial r / \partial a) \propto -2 \int t u^2 dt = - \int v'(t) u^2 dt \quad (40)$$

$$4 \int \left[t^2 - \left(r + \frac{1}{2} \right) \right] u^2 dt = - \int (2v + tv') u^2 dt \quad (41)$$

(40), (41) からどんな場合に r - q 軌跡の方法が使えるかの見通しに関する議論ができる。少なくとも何層かの階段型ポテンシャルおよび δ 関数型の場合には見通しが得られそうであり、続く研究課題である。

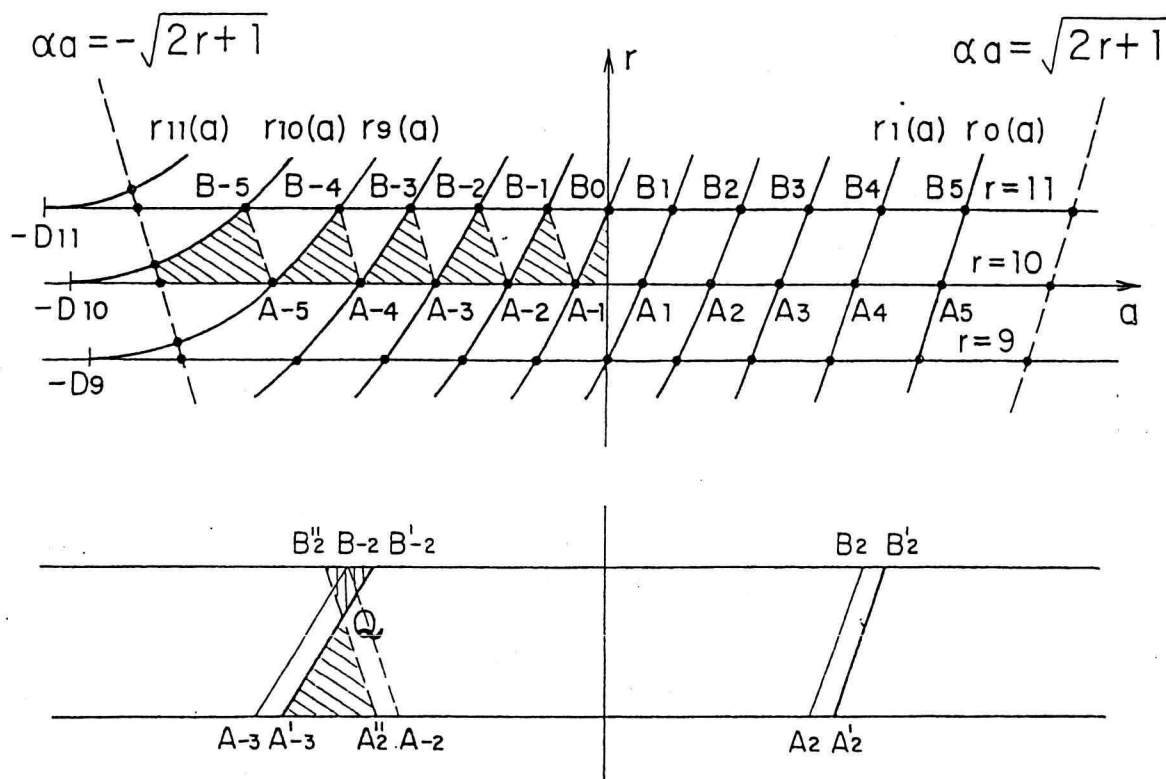


Fig. r - q trajectories: The curve A_2B_2 in an infinite potential is displaced into $A'_2B'_2$ in a finite potential.

References

- [1] K.Ohtaka and T.Moriya, J.Phys.Soc.Jpn. **34** (1973) 1203.
- [2] F.Shishido, Phys.Lett. **A 152** (1991) 437.
- [3] M.Robnik, J.Phys. **A 19** (1986) 3619.
- [4] Nedorezov, S.S.: JETP **37**, (1973) 317.
- [5] Nedorezov, S.S.: JETP LETT **33**, (1981) 215.
- [6] Nedorezov, S.S.: Sov.J.LTPJETP **6**, (1981) 449.
- [7] Shishido, F.: Phys.Lett. **A 152**, (1991) 443.
- [8] U.Sivan and Y.Imry, Phys.Rev.Lett. **61** (1988) 1001.
- [9] V.A.Grazhulis, Solid.State.Comm. **79** (1991) 917.
- [10] M.Calvo, J.Phys. **C 19** (1986) 7253.