ランダウ反磁性の界面効果と密度行列

宍戸文雄
電気電子工学科

Surface Effect in Landau Diamagnetism and Density Matrix

SHISHIDO Fumio

Abstract

The density matrix of free electrons confined in a large box is calculated by perturbation. The relation beteween the second order term and the the average value of magnetization ⟨M(μ,H)⟩ is discussed. The uniform convergence of $\mathbf{Z}(\beta)$ in the limited region near β=0 requires some restriction on the shape of ⟨M(μ,H)⟩. Exact derivation gives the conclusion that a divergent term in ⟨M(μ,H)⟩ with H→0 is non-existent.

Key Words: Density matrix and divergernt magnetization, Non-existent singularity, Non-uniform convergence.

1.序

もしも巨大な表面Landau反磁性が発見されたら、それは理論的に興味深いだけではなく、応用上の大きな可能性を持つ。そのような物質は大きな Nernst-Ettinghausen効果を持つと予想されるので、理想的な熱電エネルギ変換素子が得られるの可能性がある。表面Landau反磁性に関しては多くの研究がある。初期の研究では H→0, で巨大に発散する項が有ると指摘された。典型的な計算では巨大な正の量と巨大な負の量の僅かの差が計算結果になっていて、巨大な正の量に僅かの近似が含まれていても結果は全く誤った量を与える。その後の研究ではより厳密な進歩した取り扱いがなされており、巨大な表面Landau反磁性は存在しないと言う結論も導かれてはいる[1,2,3]。しかし計算の出発点にはやはり近似が含まれており、結果がどのように評価されるのか筆者には未だ断定できない。さらなる問題は仮定された表面ポテンシャルは殆どの研究で無限大の階段関数であり、計算の過程がその表面ポテンシャルの場合にだけ適用できるもの(例えば ζ関数の公式) を含むために、少しでもより一般的な形の表面ポテンシャルの場合の結果に全く見通しが立たないということである。

この論文では無限大の階段関数の場合について密度行列と表面Landau反磁性の関係を論ずる。分配関数 Z(β)が β=0の近傍で一様収束するということに基づき巨大な表面Landau反磁性は存在しない、より一般的には少なくとも半無限の境界条件では巨大な表面Landau反磁性発散は存在しないという結論を厳密に導く。

2. 密度行列

z方向に一様な磁界 Hを印加された大きな箱の中の自由電子を考えよう。ヴェクトルポテンシャルのゲージを $\mathbf{A}=(0, Hx, 0)$ と定める。2つ理由により以下の議論をx-y方向2次元に限定する。1に3次元の密度行列は2次元の密度行列とz方向の密度行列の単なる積であること、2に3次元の平均磁化は2次元の平均磁化を化学ポテンシャルに関して積分して得られることである。

ハミルトニアンは次の形に表される。

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}\left[\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial x} + eHx\right]^2 + V(x) \tag{1}$$

但し、単位系は　c=h=m=1，と定めた。V(x)は表面ポテンシャルである。

密度行列 G は次のように定義される。

$$G(x, y; X, Y:\beta) = \langle x, y | \exp(-\beta \mathbf{H}) | X, Y \rangle \tag{2}$$

$x \to X, y \to Y$，のときの Gが分かれば、次式により分配関数 $Z(\beta)$が求まる。

$$\int dXdY\, G(X, Y; X, Y:\beta) = \Sigma \exp(-\beta E_i) = Z(\beta) \tag{3}$$

ここで E_iはエネルギー準位である。

H=0 で界面が無いときの解 G_0は

$$G_0(x, y; X, Y:\beta) = G_0(x; X:\beta) G_0(y; Y:\beta),\quad G_0(x; X:\beta) = (2\pi\beta)^{-1/2} \exp[-(x-X)^2/2\beta] \tag{4}$$

H≠0 で界面が無いときの厳密解は分かっており[4]、$x \to X, y \to Y$, では、

$$G(X, Y; X, Y:\beta) = (1/2\pi\beta)(\beta eH/2)/\sinh(\beta eH/2) \tag{5}$$

3. 摂動

H≠0 で界面が有るときの解を摂動で調べる。

無限大の階段型表面ポテンシャル V(x)を仮定する。

$$V(x)=0,\quad -L<x<L.\quad V(x)=\infty,\quad |x|>L. \tag{6}$$

界面があり、H=0 のときの解 G_s は鏡像法により

$$G_s = G_0(x; X:\beta) - G_0(x; -2L-X:\beta) \qquad -L<x<0$$

$$G_s = G_0(x; X:\beta) - G_0(x; 2L-X:\beta) \qquad 0<x<L \tag{7}$$

但し (7)が成立するためには Lは充分大きくなくてはならない。その限度は βの関数であり後に論ずる。先ず対称性により $G(X, Y; X, Y:\beta)$ への $\propto H$ の寄与は消える。

次に$\propto H^2$ の項を求める。それは次の 2つの項である。

$$\mathrm{I}:\quad -\frac{1}{2}\int_0^\beta dt \int dxdy\, G_s(X, Y; x, y:t)\, x^2\, G_s(x, y; X, Y:\beta-t) \tag{8}$$

$$\mathrm{II}:\quad -\int_0^\beta ds \int dxdy\, G_s(X, Y; x, y:s) \left(x\frac{\partial}{\partial y}\right) \int_0^{\beta-s} dt \int dudv$$

$$G_s(x, y; u, v:t) \left(u\frac{\partial}{\partial v}\right) G_s(u, v; X, Y:\beta-s-t) \tag{9}$$

y方向の計算は界面が有るときと無いときで同じである。そこで y方向に関しては (4)を代入して計算を行うと

$$\mathrm{I}:\quad -\frac{1}{2}\frac{1}{(2\pi\beta)^{1/2}}\int_0^\beta dt \int dx\, G_s(X; x:t)\, x^2\, G_s(x; X:\beta-t) \tag{10}$$

$$\mathrm{II}:\quad \frac{1}{(2\pi\beta^3)^{1/2}}\int_0^\beta ds \int_0^{\beta-s} dt \int dxdu\, G_s(X; x:s)\, x\, G_s(x; u:t)\, u\, G_s(u; X:\beta-s-t) \tag{11}$$

Ⅱ:の計算は難しい。半無限の境界条件の場合の解は［5］で与えられている。非常にやっかいな計算である。 ここでは別の工夫をしてゲージ不変で簡明な方法を示す。(11)では x, u, に関して積分し、その後その積分を (3)に従い X, Y, に関して積分して Z(β)を求める。半無限の境界条件の場合、積分の順序を交換することは許されない。被積分関数が遠方で発散するからである。それに対してここでは積分範囲が有限であるから順序を交換できる。次の一般的な関係式

$$\int dX G_s(X;x:s)G_s(u;X:t)=G_s(x;u:s+t) \tag{12}$$

を使い Ⅱ:をXに関して積分する。

$$\int [\mathrm{II}]dX=\frac{1}{(2\pi\beta^3)^{-1/2}}\int_0^\beta ds\int_0^{\beta-s}dt\int dxdu G_s(x;u:\beta-t)xuG_s(x;u:t) \tag{13}$$

さらに被積分関数 f(t)について f(t)=f(β−t) が成立するので、

$$\int_0^\beta ds\int_0^{\beta-s}dt f(t)=\frac{1}{2}\int_0^\beta dt[(\beta-t)+t]f(t)=(\beta/2)\int_0^\beta f(t)dt \tag{14}$$

を使え、結局、

$$\int [\mathrm{II}]dX=\frac{1}{2(2\pi\beta)^{1/2}}\int_0^\beta dt\int_0 dxduG_s(x;u:\beta-t)xuG_s(x;u:t) \tag{15}$$

次に Ⅰ:を Xに関して積分したものを考える。$G_s(X;x:t)$ は Xと xに関して対称であることを使うと、

$$\int [\mathrm{I}]dX=-\frac{1}{4(2\pi\beta)^{1/2}}\int_0^\beta dt\int dxdXG_s(X;x:t)(x^2+X^2)G_s(x;X:\beta-t) \tag{16}$$

(15)と(16)との和を考える。(15)で u→X と置き換えて、

$$\int [\mathrm{I}+\mathrm{II}]dX=-\frac{1}{4(2\pi\beta)^{1/2}}\int_0^\beta dt\int dxdXG_s(X;x:t)(x-X)^2G_s(x;X:\beta-t) \tag{17}$$

の最終的な式が得られ、これは対称的なゲージ不変の形になっている。

(7)を (17)に代入し、変数変換 u=2L+(x+X), v=(x−X), s=β−t, をして、

$$\int_{-L}^{L}dX\int_{-L}^{L}dxG_s()(x-X)^2G_s()=\frac{1}{\pi(st)^{1/2}}\int_0^{2L}du\int_0^u dv\ v^2(F_1+F_2+F_3+F_4) \tag{18}$$

但し

$$F_1=G_0(x;X:t)G_0(x;X:\beta-t)\times 2\pi(st)^{1/2}=\exp[-(\beta/2st)v^2]$$
$$F_2=G_0(x;-2L-X:t)G_0(x;-2L-X:\beta-t)\times 2\pi(st)^{1/2}=\exp[-(\beta/2st)u^2]$$
$$F_3=-G_0(x;X:t)G_0(x;-2L-X:\beta-t)\times 2\pi(st)^{1/2}=-\exp[-v^2/2t-u^2/2s]$$
$$F_4=-G_0(x;-2L-X:t)G_0(x;X:\beta-t)\times 2\pi(st)^{1/2}=-\exp[-u^2/2t-v^2/2s]$$

各積分は、

$$\int_0^{2L}du\int_0^u dv\ v^2F_1=\int_0^{2L}dv(2L-v)v^2\exp[-(\beta/2st)v^2]$$
$$=(2L)(\sqrt{\pi}/4)(2st/\beta)^{3/2}-(1/2)(2st/\beta)^2 \tag{19}$$

$$\int_0^{2L}du\int_0^u dv\ v^2F_2=\int_0^{2L}du(\frac{1}{3}u^3)\exp[-(\beta/2st)u^2]$$
$$=(1/6)(2st/\beta)^2 \tag{20}$$

F_3の積分は次のように工夫をする。

$$\int v^2F_3=(2t^2)\frac{\partial}{\partial t}\int_0^{2L}du\int_0^u dv\ -\exp[-v^2/2t-u^2/2s]$$

$$\int F_3=-2\sqrt{st}\int d\xi d\eta\exp[-\xi^2-\eta^2]=-2\sqrt{st}\int dr\int^\theta d\phi r\exp[-r^2]\quad ;\tan\theta=(s/t)^{1/2}$$

$$=-(st)^{1/2}\arctan(s/t)^{1/2}$$

$$\therefore \quad \int v^2F_3=-t[(st)^{1/2}\arctan(s/t)^{1/2}-st/\beta] \tag{21}$$

同様にして、

$$\int v^2F_4=-t[(st)^{1/2}\arctan(s/t)^{1/2}-st/\beta] \tag{22}$$

(19-21)を (18)に代入し、さらにそれを (17)に代入して、

$$(17)=-\frac{1}{4\pi}\left(\frac{\beta}{2\pi}\right)^{1/2}\int_0^{\beta}dtf\left(\frac{s}{\beta},\frac{t}{\beta}\right)=-\left(\frac{\beta}{2\pi}\right)^{3/2}\int_0^{\pi/2}d\phi\,(\cos\phi\sin\phi)f[(\cos\phi)^2,(\sin\phi)^2]$$

ここで fは、

$$f=(2L/\sqrt{\beta})(\cos\phi\sin\phi)^2-(4/3)(\cos\phi\sin\phi)^3+(\cos\phi\sin\phi)-(\cos\phi)^2\phi-(\sin\phi)^2\phi(\pi/2-\phi)$$

であり、

$$(17)=-(2L)\beta/48\pi+(3/128\sqrt{2\pi})\beta^{3/2}$$

これと $\propto H^0$の項 $\int dXG(X;X:\beta)$ を加えて、

$$(2\pi\beta)^{-1}L-(1/4)(2\pi\beta)^{-1/2}+[-(1/24)(2L)(2\pi\beta)^{-1}+(3/128)(2\pi\beta)^{-1/2}](\beta eH)^2$$

３次元の$Z(\beta)$は単に これに $L_z(2\pi\beta)^{-1/2}$を掛けて得られる。 結局、

$$\frac{Z(\beta)}{L_yL_z}=\frac{L}{(2\pi\beta)^{3/2}}-\frac{1}{4}\frac{1}{(2\pi\beta)}+\left[-\frac{1}{24}(2L)\frac{1}{(2\pi\beta)^{3/2}}+\frac{3}{128}\frac{1}{(2\pi\beta)}\right](\beta eH)^2\ +0(H^4) \tag{23}$$

ここまでの計算は (7)の鏡像の式が成立すべく Lが十分大きいときに正しい。そこで $2L[\partial Z(\beta)/\partial(2L)]$をバルクの$Z(\beta)$と考え、$L\to\infty$ のときの $\lim\{Z(\beta)-2L[\partial Z(\beta)/\partial(2L)]\}$ を界面効果と定義すると、それは (23)の最後の項であり、従って $L\to\infty$ で鏡像法が有効であるときの界面効果を正しく与える。

4. 一様収束

(23)の最後の項が界面効果の $\propto H^2$の項である。Hが十分小さいとき; $H<H_a$ のとき高次の項は無視できるのであるが、注意するべきことは H_aは βに依存して決まるということである。その例は界面が無いときの厳密解 (5)に示される。(5)の右辺は H=0で正則であり Hの冪に展開できる。しかし Hがどんなに小さくても、それに対して βを適当にとると高次の項が支配的になり $\beta\sim i\pi/H$ で発散する。即ち $H_a=H_a(\beta)$ である。言い換えると $Z(\beta)$は $H\to0$ で収束する。しかし β面の全面で『一様収束』ではない。β面で有限の領域例えば $|\beta|\leq K$, $\mathrm{real}(\beta)>0$ に着目するとそこでは $H<H_a(K)$ で一様収束する。このことを以下の議論の出発点とする。

5. 平均磁化

有限の温度の磁化は T=0での磁化の重ね合わせとして表せる[6,7]。従って以下の議論は T=0のときに限定する。 Lを固定すると磁化 Mは化学ポテンシャル μと Hと Tとの関数であり、T=0と定めると Mは μと Tとの関数 $M(H,\mu)$となる。

$$-M(H,\mu)=\frac{\partial}{\partial H}[\Sigma E_i(H)-N\mu]=\frac{\partial}{\partial H}\Sigma\,[E_i(H)-\mu]=\Sigma\frac{\partial}{\partial H}E_i(H),\qquad \text{但し}\ E_i(H)\leq\mu \tag{24}$$

の式から $M(H,\mu)$と $Z(\beta)$の関係を論ずる。

エネルギを変数とする状態密度関数 $\rho(E)$を定義する。

$$\rho(E,H)=\Sigma\,\delta(E-E_i(H)) \tag{25}$$

これからエネルギ密度関数 $\eta(E)$が定義できる。

$$\eta(E,H)=\Sigma E_i(H)\delta(E-E_i(H)) \quad (26)$$

さらにモーメント密度関数 m(E)が定義できる。

$$m(E,H)=-\Sigma(\partial E_i/\partial H)\delta(E-E_i(H)) \quad (27)$$

(24)と (27)から、

$$M(\mu,H)=\int_0^{\mu} m(E,H)\,dE \quad (28)$$

(25)と (3)から、

$$Z(\beta,H)=\int \rho(E,H)\exp(-\beta E)\,dE \quad (29)$$

(3)を Hで微分して (27)と比較し、さらにそれに (28)を代入する。

$$\frac{\partial}{\partial H}Z(\beta,H)=\int m(E,H)\exp(-\beta E)\,dE=\int \left[\frac{\partial}{\partial E}M(E,H)\right]\exp(-\beta E)\,dE \quad (30)$$

(30)の右辺を部分積分する。M(E=0, H)=0, であるから、

$$\frac{\partial}{\partial H}Z(\beta,H)=-\beta\int M(E,H)\exp(-\beta E)\,dE \quad (31)$$

$M(\mu,H)$は周知のように μ/H の激しく振動する関数であり（周期=eh/mc)、その振幅は $\propto H^{-1}$, である。観測される値は μを固定して Hを変えたときの平均であるが、Hを固定して μを変えたときの平均としてもよい [6,7]。それは次式で定義できる。

$$\langle M(\mu,H)\rangle=\frac{1}{d^2}\left\{\int_0^d (t+d)M(\mu+t,H)\,dt+\int_0^d (d-t)M(\mu+t,H)\,dt\right\},\ \text{但し}\ d=\left(\frac{eH}{mc}\right)h \quad (32)$$

$\langle M(\mu,H)\rangle$はゆっくりと変わる関数である。次に $\langle M(\mu,H)\rangle$と $Z(\beta,H)$の関係を調べる。そのため (32)の左辺をラプラス変換する。

$$\int \langle M(E,H)\rangle\exp(-\beta E)\,dE=\frac{2}{(\beta d)^2}[\cosh(\beta d)^2-1]\int M(E,H)\exp(-\beta E)\,dE \quad (33)$$

(33)を (31)と比較して、

$$\int \langle M(E,H)\rangle\exp(-\beta E)\,dE=\frac{2}{(\beta d)^2}[\cosh(\beta d)^2-1]\left(-\frac{1}{\beta}\right)\left[\frac{\partial}{\partial H}Z(\beta,H)\right] \quad (34)$$

(34)を以下の議論に使う

6. 特異性

$a<\mu<b$ で $\langle M(\mu,H)\rangle=\pm G(\mu)H^{\gamma}$ ($\gamma<1$, $G(\mu)>0$) の特異性が現れると仮定する[1,2,3]。個の仮定は (34)と矛盾するという議論を以下に展開する。磁化の界面効果 ΔMに関して (34)と (23)から、

$$\int \langle \Delta M(E,H)\rangle\exp(-\beta E)\,dE=\frac{2}{(\beta d)^2}[\cosh(\beta d)^2-1](-AH+\text{高次}) \quad (35)$$

(35)の右辺を $B(\beta,H)$と書く。最初の因子 $[1+(\beta d)^2/12+\cdots]$は以下の議論では 1とみなせる。ラプラスの逆変換の式は、

$$\langle \Delta M(E,H)\rangle\exp(-i\alpha E)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} B(\alpha+ik,H)\exp(ikE)\,dk \quad (36)$$

右辺の $-K<k<K$ の領域での寄与を左辺から引いたもの f(E)を考える。

$$f(E)=\langle \Delta M(E,H)\rangle\exp(-i\alpha E)-\frac{1}{2\pi}\int_{-K}^{+K} B(\alpha+ik,H)\exp(ikE)\,dy \quad (37)$$

f(E)のフーリエ成分は $-K<k<K$ では 0である。 $|\beta|\leq 2K$ の領域で (23)の右辺が一様収束