ランダウ反磁性界面効果のスペクトル分析

宍戸文雄
電気電子工学科

Surface Effect in Landau Diamagnetism and Its Spectrum Analysis

SHISHIDO Fumio

Abstract

In order to obtain an information of $\mathcal{Z}(\beta)$ near $\beta=0$, substitution of $(x-X)^2$ by some suitable function is examined. The result by this method agrees with an exact calculation by a mirror image method. However, it has a possibility of general applicability as different from a mirror image. Some difficult problems become soluble, provided the suitable function has only a few non-diagonal matrix elements.

Key Words: $\mathcal{Z}(\beta)$ near $\beta=0$, Substitution of $(x-X)^2$ by some suitable function, A few non-diagonal matrix elements.

1.序

Landau反磁性の界面効果が如何なる条件で発散するのかは殆ど解明されていない。薄膜の場合と厚い試料とについてそれぞれ述べると、

a）薄膜

電子軌道の回転半径が膜厚よりも大のときは摂動計算ができる。しかし計算結果は各々の固有関数からの寄与よりも高次の僅かな差となる。従って計算は厳密でなくてはならない。無限高階段ポテンシャルの場合だけ計算されているが、一般の場合の予想ができない [1-3]。

b）厚い試料

電子軌道の回転半径が厚さよりも小のとき、磁気モーメント $M(\mu,H)$ は $H=0$, で真性特異点を持つ。無限高階段ポテンシャルの場合の厳密な取り扱いが最近可能となったが、やはり一般の場合の予想ができない [4-9,12]。

さて密度行列 $Z(\beta,H)$ を用いた議論が有力となる場合ががある。$M(\mu,H)$ の真性特異点は $Z(\beta,H)$ の遠方での無限個の極に写像される。従って 厚い試料の場合であっても摂動

計算が許される。薄膜 の場合には $Z(\beta,H)$ の摂動計算は巨大な項の差とはならないので $M(\mu,H)$ そのものよりも近似計算の可能性が拡がる [10-12]。

さて $Z(\beta,H)$ の完全な計算ができなくても、$Z(\beta,H)$ の $\beta=0$ 近くでの振る舞いが有用な情報を与えることに着目しよう。薄膜の場合それは 厚さの関数として振動する $M(\mu,H)$ の定常項を与える。 厚い試料では半無限のポテンシャルの場合の一次の項を与える。

この論文では $Z(\beta,H)$ の $\beta=0$ 近くでの振る舞いを調べる方法を論ずる。

2. 密度行列と分配関数

分配関数 $Z(\beta,H)$は次式で定義される。

$$Z(\beta,H)=\Sigma\exp[-\beta E_i(H)]. \tag{1}$$

密度行列の二次の摂動から分配関数の二次 Z_2 は次式であらわされる [11,12]。

$$\frac{Z_2}{(eH)^2}\times 4(2\pi\beta)^{1/2}=\int_0^\beta dt\int dxdX\,G(X;x:t)(x-X)^2G(x;X:\beta-t). \tag{2}$$

但し $c=1,\ m=1,\ h=1.$ とした。

ここで $G(x;X:t)$ は $H=0$, のときの密度行列である。密度行列とはグリーン関数の時間を $-i\beta$ とおいたものとも言い換えられる。界面が存在しないときの密度行列 G_0は、

$$G_0(x;X:\beta)=(2\pi\beta)^{-1/2}\exp[-(x-X)^2/2\beta]. \tag{3}$$

この場合 (2)は簡単に計算できる。答は、

$$(2)=(1/6)(\beta^3/2\pi)^{1/2}\times\int dX \tag{4}$$

界面が存在する一般の場合 (2)の計算は非常に難しい。

3. 自由電子の場合

鏡像法は無限高階段ポテンシャル以外には適用しにくい。 そこで一般のポテンシャルに拡張できる計算をさがすため フーリエ積分の方法を調べる。

$$G_0(x;0:\beta)=\frac{1}{2\pi}\int dk\exp(ikx)\exp[-\omega(k)\beta],\qquad \omega=\frac{1}{2}k^2. \tag{5}$$

(2) は β に関しての convolution であることに着目してこれを Laplace変換する。
さらに $G_0(x;0:\beta)=G_0(0;x:\beta)$ を使って、

$$\mathrm{Lap}[(2)]=\frac{1}{(2\pi)^2}\int dX\int\int dkdh[\int dx\cdot x^2\exp(ikx)\exp(-ihx)]D(k,h). \tag{6}$$

Lap[(2)]の変数を pと書き

$$D(k,h)=[\frac{1}{p+\omega(k)}][\frac{1}{p+\omega(h)}]. \tag{7}$$

(6) で $x^2\exp(-ihx)=-\partial^2[\exp(-ihx)]/\partial h^2$, と変形し kについて2回部分積分をする。

$$\mathrm{Lap}[(2)]=\frac{1}{(2\pi)^2}\int dX\int\int dkdh[\int dx\cdot\exp(ikx)\exp(-ihx)][-\frac{\partial^2D(k,h)}{\partial h^2}]. \tag{8}$$

x についての積分は $2\pi\delta(k-h)$ であるから、

$$\mathrm{Lap}[(2)]=\frac{1}{2\pi}\int dX\int dk[-\frac{\partial^2D(k,h)}{\partial h^2}],\ (h\to k). \tag{9}$$

ところで

$$\begin{aligned}\partial^2D(k,h)/\partial h^2,(h\to k)&=\{1/[p+\omega(k)]\}\{\partial^2[1/(p+\omega(h))]/\partial h^2\},(h\to k)\\&=\{1/[p+\omega(k)]\}\{\partial^2[1/(p+\omega(k))]/\partial k^2\},\end{aligned}$$

となるので、(9) を再び1回部分積分をして、

$$\mathrm{Lap}[(2)]=\frac{1}{2\pi}\int dX\int dk[\frac{\partial}{\partial k}(\frac{1}{p+\omega(k)})]^2\ . \tag{10}$$

被積分関数は　$k^2/[p+\omega(k)]^4$, であり これの逆変換は $k^2\beta^3\exp[-\omega(k)\beta]$ であるから、

$$(2)=\frac{1}{2\pi}\int dX\cdot\beta^3\int dk\cdot k^2\exp[-\frac{1}{2}k^2\beta]. \tag{11}$$

k についての積分を実行すると、

$$(2)=(1/6)(\beta^3/2\pi)^{1/2}\times\int dX \tag{12}$$

となり 直接計算の結果である (4) に一致する。

4. 近似法

さて上記で比較的簡単に計算できた理由を考えよう。

それは　$x^2\exp(-ihx)=-\partial^2[\exp(-ihx)]/\partial h^2$ と変形できたところにある。

$x^2\exp(-ihx)$ を項別に積分すると大きな扱いにくい値になるのに、それが k のとなりの値の項とうまく打ち消し会うのである。

$$x^2=(2/\varepsilon^2)[1-\cos(\varepsilon x)],\quad \varepsilon\to 0.$$

とおいたことに相当する。

エネルギー準位が離散的であるときにも上記のように簡単な計算が出来ないであろうか。そのため

$$x^2\sim(2/\Delta^2)[1-\cos(\Delta x)]$$

と近似してうまくいくかを調べる。ここで Δ は波数の間隔である。

5. 箱の中の電子

無限高階段ポテンシャルにより　$0<x<L$, に閉じ込められた電子について調べる。

密度行列は、

$$G(x;X:\beta)=\frac{1}{L}\Sigma\sin(n\Delta X)\sin(n\Delta x)\exp[-\omega(k)\beta],\quad \Delta=\frac{\pi}{L},\quad n=\pm1,\pm2,\pm\infty \tag{13}$$

Σ の計算が簡単になるように n に正負両方の値をとらせる。

(2) で $(x-X)^2$ を掛けて積分する前の値すなわち $G(x;X:\beta)$ の convolution $G\therefore G$ の Laplace変換は

$$\mathrm{Lap}[G\therefore G]=\frac{1}{L^2}\Sigma\sin(n\Delta X)\sin(n\Delta x)\Sigma\sin(m\Delta X)\sin(m\Delta x)D(n\Delta,m\Delta). \tag{14}$$

ここで 前章で論じた近似　$(x-X)^2\sim(2/\Delta^2)\{1-\cos[\Delta(x-X)]\}$ を考える。

$(x-X)=0$, の近くで良い近似であり遠方では $(x-X)^4$ より高次の誤差が現れる。

$(x-X)^4$ を (14)にかけて積分したものは $(x-X)^2$ をかけて積分したものに較べて $\propto\beta^1$ 高次であることが分かっている。但し それは X が界面 $X=0, X=L$ から少し離れている場合であり X が界面に接近したときにどの程度正しいかはさらなる検証を要する。

$$(x-X)^2\sim(2/\Delta^2)\{1-\cos[\Delta(x-X)]\}=(2/\Delta^2)\{1-\cos(\Delta X)\cos(\Delta x)-\sin(\Delta X)\sin(\Delta x)]\} \tag{15}$$

を (14) にかけて $0<x,X<L$ で $\int\int dxdX$ の積分を実行する。 1 又は cos をかけたものは簡単に積分できて、

$$\Sigma(1/4\Delta^2)[4D(n\Delta,n\Delta)-D[n\Delta,(n+1)\Delta]-D[n\Delta,(n-1)\Delta]$$
$$=\Sigma(1/\Delta^2)D(n\Delta,n\Delta)-(1/4)[\partial^2D(k,h)/\partial h^2]\ (h\to k) \tag{16}$$

となりここまではうまくいきそうに見えるが、sin をかけて積分したものが難しい。

$$\frac{1}{2(\pi\Delta)^2}\{[\frac{1}{m-n+1}+\frac{1}{m+n-1}]^2+[\frac{1}{m-n-1}+\frac{1}{m+n+1}]^2-[\frac{1}{m-n+1}+\frac{1}{m+n-1}][\frac{1}{m-n-1}+\frac{1}{m+n+1}]\}D(n\Delta,m\Delta) \quad (17)$$

ここで m+n=偶数 である。奇数のときの項は現れない。$D(n\Delta,m\Delta)$ の対称性を考慮すると簡単になる。$D(n\Delta,m\Delta)=D(m\Delta,n\Delta)$ であるからこの両者の寄与を加えると交差する積は打ち消しあい 2乗の項だけが残る。

$$(17)=\Sigma\frac{1}{2(\pi\Delta)^2}\{[\frac{1}{m-n+1}]^2+[\frac{1}{m+n-1}]^2+[\frac{1}{m-n-1}]^2+[\frac{1}{m+n+1}]^2\}D(n\Delta,m\Delta). \quad (18)$$

次に$D(n\Delta,m\Delta)=D(n\Delta,-m\Delta)$を考慮すると第2項と第4項の Σは第1項と第3項の Σに等しい。

$$(17)=\Sigma\frac{1}{(\pi\Delta)^2}\{[\frac{1}{m-n+1}]^2+[\frac{1}{m-n-1}]^2\}D(n\Delta,m\Delta) \quad (19)$$

と大分簡単になった。しかし未だうまくいかない。(16)の第1項と(19)とはそれぞれ $\propto L^3$ の項でありそれの2次高次の項を正確に求めるのは難しい。

そこで工夫をする。 $(x-X)^2\sim(2/\Delta^2)\{1-\cos[\Delta(x-X)]\}$ の式で Δ を 2Δ, $q\Delta$ 等に置き換えてもかまわないことに着目する。その階差を考える。

$$\begin{aligned}(x-X)^2&\sim(1/4\Delta^2)\{2\cos[q\Delta(x-X)]-\cos[(q+2)\Delta(x-X)]-\cos[(q-2)\Delta(x-X)]\}\\&=(1/4\Delta^2)\{2\cos[q\Delta x]\cos[q\Delta X]-\cos[(q+2)\Delta x]\cos[(q+2)\Delta X]-\cos[(q-2)\Delta x]\cos[(q-2)\Delta X]\\&\quad+2\sin[q\Delta x]\sin[q\Delta X]-\sin[(q+2)\Delta x]\sin[(q+2)\Delta X]-\sin[(q-2)\Delta x]\sin[(q-2)\Delta X]\}\end{aligned} \quad (20)$$

としてみる。

再び cosを (14)にかけて積分したものは簡単で

$$\begin{aligned}&\Sigma(1/32\Delta^2)\{2D[n\Delta,(n+q)\Delta]-D[n\Delta,(n+q+2)\Delta]-D[n\Delta,(n+q-2)\Delta]\\&\qquad+2D[n\Delta,(n-q)\Delta]-D[n\Delta,(n-q-2)\Delta]-D[n\Delta,(n-q+2)\Delta]\}\\&\quad=\Sigma(1/8)[-\partial^2D(k,h=k+q\Delta)/\partial h^2-\partial^2D(k,h=k-q\Delta)/\partial h^2]\end{aligned} \quad (21)$$

sin をかけた積分は (19)に現れる 1 を q, q±2, と置き換えて得られる。

$$\Sigma\frac{1}{8(\pi\Delta)^2}\{[\frac{1}{m-n+q}]^2+[\frac{1}{m-n-q}]^2\}\{2D(n\Delta,m\Delta)-D[n\Delta,(m+2)\Delta]-D[n\Delta,(m-2)\Delta]. \quad (22)$$

但し m+n+p=奇数, これは

$$(22)=\Sigma\frac{1}{2\pi^2}\{[\frac{1}{m-n+q}]^2+[\frac{1}{m-n-q}]^2\}[-\partial^2D(k=n\Delta,h=m\Delta)/\partial h^2].$$

$1/1^2+1/3^2+1/5^2+\quad=\zeta(2)-(1/4)\zeta(2)=\pi^2/8$, を使い、

$$(22)=\Sigma\frac{1}{8}[-\partial^2D(k=n\Delta,h=k+q\Delta)/\partial h^2-\partial^2D(k=n\Delta,h=k-q\Delta)/\partial h^2]. \quad (23)$$

が最低次であり (21)と (23)において Δ^2高次の項を捨てると、

$$[(21)+(23)]\text{の最低次}=\Sigma\frac{1}{2}[-\partial^2D(k=n\Delta,h)/\partial h^2],\ (h\to k).$$

となり、これから得られる (2)の値は自由電子の場合の (9)に一致する。

6. 高次項

Δ^1 高次の項を評価すると界面効果が得られる。

(21)と (22)の最低次の評価から自由電子の場合と同じ値が得られた。(21)での高次項は $\propto\Delta^2$ である。それに対して (21)から (24)への変形で $\propto\Delta^1$の項が無視されているのでそれを論ずる。

(22)で nを一定にして mを変えると最初の因子は偶関数であり $D(n\Delta,m\Delta)$の偶関数成分だけが和に寄与する。{$D(n\Delta,m\Delta)\times[p+\omega(k)]$,の偶関数成分} を $f(x)$と書くと

$$f(x)=\frac{1}{2}\{[\frac{1}{p+\omega(k+x)}]+[\frac{1}{p+\omega(k-x)}]\}, \tag{24}$$

(22)を $f(x)$で表すと

$$(22)\times\pi^2[p+\omega(k)]=\Sigma\frac{\Delta^2}{2x^2}[f''(-q\Delta-x)+f''(-q\Delta+x)+f''(q\Delta-x)+f''(q\Delta+x)],\quad x=(2l-1)\Delta. \tag{25}$$

2次の高次は捨てるので $q=0$, としてよい。

$$(25)\text{の右辺}=\Sigma\frac{\Delta^2}{x^2}[f''(0)+\frac{1}{2}f^{(4)}(0)x^2+\frac{1}{24}f^{(6)}(0)x^4+\ \ +\ \ ],\qquad x=(2l-1)\Delta. \tag{26}$$

初項は $f(0)(\pi^2/8)\times2$ を与えた。第二項以降を積分に置き換えて評価する。それが界面効果を表す。 $\Sigma\to(1/2\Delta)\int$ であり $0<x$ での積分の 2倍として、

$$(26)\text{の第二項以降}=\Delta\int_0^\infty\frac{1}{x^2}[f''(x)-f''(0)]dx, \tag{27}$$

部分積分を2回行い、

$$(27)=(6\Delta)\int_0^\infty\frac{1}{x^4}[f(x)-f(0)-\frac{1}{2}f''(0)x^2]dx. \tag{28}$$

被積分関数に (24)の定義を代入して整理すると分子が2次式、分母が4次式となる。従って留数から積分計算できる。留数を求めるには被積分関数の第一項すなわち $f(x)$だけを調べればよいので簡単である。 結果は

$$(28)=(3\Delta)\sqrt{2\pi}\ \frac{1}{p^{1/2}}[\frac{1}{2}\ \frac{1}{(p+\omega)^2}-2\frac{k^2}{(p+\omega)^3}+\frac{k^4}{(p+\omega)^4}] \tag{29}$$

(25)から式の定義を再確認すると (29)に $(p+\omega)^{-1}$ をかけたものの逆変換が最終結果であることが分かる。 $p^{-1/2}$ の逆変換と $[\ \ ]\times(p+\omega)^{-1}$ の逆変換との convolution を計算すればよい。$p^{-1/2}$ の逆変換は $\omega(k)$ によらないので 後者の逆変換を kについて積分してから convolution を求めればよいので、計算は簡単である。

$p^{-1/2}$ の逆変換は　　$(1/\sqrt{\pi})\beta^{-1/2}$

$[\ \ ]\times(p+\omega)^{-1}$の逆変換は　　$(1/24)(6\beta^2-8\beta^3k^2+\beta^4k^4)\exp(-\beta k^2/2)$

これの $\int dk$ は　　$(1/24)(2\pi)^{1/2}\cdot\beta^{3/2}$

両者の convolution ×定数 が最終結果であり

$$\text{最終結果}=\Delta(3\pi^2/32)\beta^2$$

他方 (26)の初項の和 $f(0)(\pi^2/4)$ から得られる最終結果の 2倍は

$$(\pi^2/12)(2\pi)^{1/2}\cdot\beta^{3/2}$$

従って 両者の比率は　　$(3/16)[(2\pi\beta)^{1/2}/L]$　　(30)

これは鏡像法で計算した結果と完全に一致している。

7.検討

$(x-X)^2$ を cos で近似することにより、$Z(\beta,H)$ の $\beta=0$ 近くでの様子を最低次及び次の高次である界面効果について計算し、鏡像法での厳密な結果と完全に一致した。鏡像法は無限高階段ポテンシャル以外には適用出来ない。それに対してこの近似法は相当広範囲のポテンシャルに適用可能と期待される。

界面から離れたところでは近似関数の誤差 $(x-X)^4$ が最終結果に β^1高次の誤差を与え、従って最低次すなわち体積に比例する項を正しく与えることは予想された通りである。然るにそれよりも高次である界面効果までに正しい結果を与えるのは何故であるか。界面近くでは密度行列は非対称に歪む。しかし近似の誤差は偶関数であるから歪みの偶関数成分だけが結果を変える。界面から離れたところで密度行列は $\beta^{1/2}$ 程度の範囲に拡がっている。 界面近くの密度行列もその程度の拡がりむしろ少し圧縮されているであろう。すると誤差の $(x-X)^4$ の積分はやはり β^1高次である。従ってこの近似は界面近くの1個の電子に関する最低次を正しく与える。正しい最終結果を得るためには 界面から離れた電子に関する $\beta^{1/2}$ 高次と界面近くの1個の電子に関する最低次だけの正しい値を得ればよい。近似関数はこれを満足している。

近似関数は定数項の無い偶関数であればよいという殆ど無制限に近い条件である。その条件内で非対角要素がなるべく少ないものを探すということになる。 2つの問題が興味深い。

1は与えられたポテンシャルでどんな近似関数が非対角要素数を最小にするか。

2は現実のポテンシャルを少し修正して非対角要素数を大きく減らせるか。

調和振動子のポテンシャルは何故扱い易いかに直ちに気が付く 非対角要素は上下 5つだけである。調和振動子のポテンシャルというゆっくり変わるものと無限高階段ポテンシャルはそれぞれ両極端であることに気が付く。無限高階段ポテンシャルは非対角要素数が無限でありしかも離れた準位の寄与が大きい。それを鏡像法等の全く別の側面からみて最も易しい対象と見える。有限高階段ポテンシャル は実際には非常に難しい対象かもしれない。界面近くで少し振動しているものが都合がよい可能性があり今後の研究課題である。

References

1) Nedorezov,S.S.:JETP **37** (1973) 317.

2) Nedorezov,S.S.:JETP LETT **33** (1981) 215.

3) Nedorezov,S.S.:Sov.J.LTPJETP **6** (1981) 449.

4) Shishido,F.:Phys.Lett.A **152** (1991) 443.

5) Azbel,M.Y.:Phys.Rev.Lett. **82** (1999) 422.

6) M.Steinberg,W.Ebeling and J.Ortner:Phys.Rev.E **61** (2000) 2290.

7) Nedorezov,S.S.:Sov.J.LTPJETP **16** (1991) 1287.

8) Nedorezov,S.S.and Rofe-Bekotova,E.F.:Low Temp.Phys. **23** (1997) 39.

9) Shishido,F.:Phys.Lett.A **152** (1991) 427.

10) K.Ohtaka and T.Moriya,:J.Phys.Soc.Jpn. **34** (1973) 1203.

11) Shishido,F.:神奈川工科大学研究報告 B25.

12) Shishido,F.:神奈川工科大学研究報告 B26.