

遷移強度磁場下のランダウ反磁性

宍戸文雄
電気電子工学科

Landau Diamagnetism in a transient field strength
Fumio SHISHIDO

Abstract

The Landau diamagnetism in a transient field strength is studied. The orbit radius of the ground state is smaller than the sample size, while those near the Fermi energy are larger. The thermodynamic potential $\Omega(H, \mu)$ is investigated. The shift in $\Omega(H, \mu)$ due to the boundary effect is far larger than the Landau energy, however, nearly the same term already exists at $H=0$. The $E-\mu$ relations are examined for the boundary condition that the phase at the boundary is $\pi/2$. The average of the shift in $\Omega(H, \mu)$ for 0 and $\pi/2$ is evaluated. A singular diamagnetic moment is possible to appear in the transient region.

Key Words: transient field strength, $E-\mu$ relations for $\pi/2$ phase.

1. 序

Landau反磁性に関しては磁界 H が弱い極限と強い場合には研究されているが境界領域は解明されていない。弱い極限とは最低状態の回転半径が試料よりも十分大きい場合である。この系は摂動計算が適用できる。基本原理において不明の部分は無い [1, 2, 3]。強い場合とはフェルミエネルギーでの回転半径が試料よりも小さい場合である。今までの研究の大部分はこれを対象としてきた [4-9]。界面効果に関しては解明されていない問題が多い。

ここで取り扱う境界領域とは両者の中間の場合、すなわち最低状態の回転半径は試料よりも小さくフェルミエネルギーでの回転半径が試料よりも大きい場合を意味する。一見して取り扱いが困難に見えるし、実際殆ど研究されていない。

次の考え方で取り組む。 $H=0$ のときの熱力学ポテンシャル Ω と H が強い場合の Ω を比較する。すると磁化 M を積分した値を見積もることができる。但し振動する M の存在は差し当たり問わない。有限温度の磁化 $M(H, \mu, T)$ は $T=0$ のときの $M(H, \mu)$ の重ね合わせとして表されることが分かっているので以下の議論は $T=0$ の場合に限定する [6, 9]。次の $\Omega(H, \mu)$ についての関係が出発点となる。

$$\Omega(H, \mu) = \sum E_i(H) - N\mu = \sum [E_i(H) - \mu] \quad (1)$$

$$d\Omega(H, \mu) = -Nd\mu - MdH \quad (2)$$

N は全電子数、 $E_i(H)$ はエネルギー準位である。

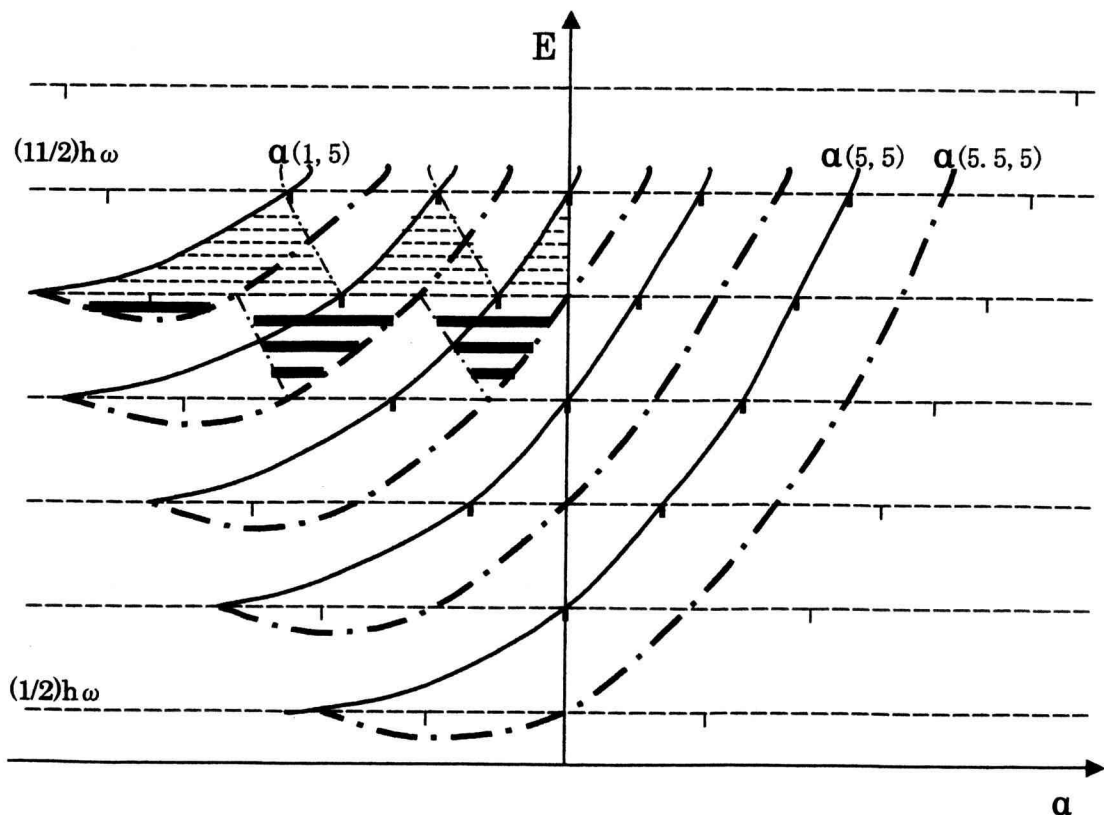
2. (E- α)関係図

議論の便宜のため実際の $\Omega(H, \mu)$ と界面効果が存在しないと仮定したときの仮想的な $\Omega_0(H, \mu)$ を比較する。 $\Omega(H, \mu)$ と $\Omega_0(H, \mu)$ との差は図から見積もられる。

図の縦軸 E はエネルギー、横軸 α は電子状態の軌道中心を表す。縦軸は界面に位置する。左側は試料右側は真空である。表面ポテンシャルとして無限高階段関数を仮定したときの (E- α) 関係を実線で表す。十分左側では $E=(n+1/2)h\omega$ であることは周知でありこの状態を完全軌道と呼ぶ。完全軌道のまま α が 0 に近づいても界面の位置が節の位置に一致すればそれは解である。完全軌道の対称性から次のことがいえる。 $\alpha=0$ を中心とする完全軌道の波動関数を描く。その節の位置を中心として $E=(n+1/2)h\omega$ である解が存在する。結局各々の節を結ぶ実線の曲線が (E- α) 関係を表す。

十分左側での $E=(n+1/2)h\omega$ の直線を $\alpha=0$ まで延長して切断するとそれが界面効果が存在しないと仮定したときの仮想的な (E- α) 関係を与える。(1) から分かることは二つの (E- α) 関係の対応する E の差が $\Omega(H, \mu) - \Omega_0(H, \mu)$ を与える。完全軌道の対称性から右側の曲線の鏡像を考えるとそれは左側の曲線と共に各 $(n-1/2)h\omega < E < (n+1/2)h\omega$ 領域内で連続曲線を成しており考えやすい。結局横点線で塗りつぶした面積の和が $\Omega(H, \mu) - \Omega_0(H, \mu)$ を与えることが分かる。

図 (E- α) 関係図 左側は試料右側は真空、 α は軌道中心の位置である。 $0 < \alpha$ の場合波動関数は左側に在るがその軌道中心は右側に在る。—— は無限高ポテンシャルの場合、- - - - - は波動関数の微分が境界で零となる場合に対応する。



表面効果を見積もるため $\Omega_0(H, \mu)$ と $\Omega_0(0, \mu)$ を比較する。z方向に H が印加されているとする。k_z の値は固定して考える。xy面でのエネルギーを E とする。電子数 dN は

$$dN = CdE \quad [C = dk_x L_x L_y L \cdot m / h^2 (2\pi)^2]$$

m は電子の質量である。直方体 $L_x L_y L$ の L_y は十分大きいと仮定する。

$\mu = \ell h\omega$ のとき (ℓ は整数) $\Omega_0(H, \mu) = \Omega_0(0, \mu)$ であるから、

$(\ell - 1/2)h\omega < \mu < (\ell + 1/2)h\omega$ のとき

$$\begin{aligned} \Omega_0(H, \mu) - \Omega_0(0, \mu) &= Ch\omega [(\ell - 1/2)h\omega - \mu] - \int C(E - \mu) dE \\ &= Ch\omega [(\ell - 1/2)h\omega - \mu] - C[\mu - (\ell - 1)h\omega] \{[\mu + (\ell - 1)h\omega] / 2 - \mu\} \\ &= C(\mu - \ell h\omega)^2 \end{aligned} \quad (3)$$

となりこれが Landau 反磁性のエネルギーである。

この極大値は $C(h\omega)^2 / 4$

電子数 $C\mu$ で割ると電子一個につき

$$(h\omega)^2 / 4\mu$$

の微小なエネルギーである。しかしこれを H で微分するとき

$$\ell = \text{Int}[\mu / h\omega + 1/2] = \text{Int}[mc / heH + 1/2]$$

を通して巨大な微係数が現れ、de Haas-van Alphen 効果を生ずる。

次に $\Omega(H, \mu)$ と $\Omega_0(H, \mu)$ を比較する。その差は上記のように横線部の面積の和に対応する。これは (3) のような μ の振動関数ではない。 $0 < E < \mu$ の全ての領域で同符号の寄与が生ずる。従って巨大である。単純に $\Omega(H, \mu)$ と $\Omega_0(0, \mu)$ の差を $-\int M dH$ とすると巨大な M が現れることになってしまう。M の値は強磁性に匹敵する。しかしこの推論は正しくない。実際には $\Omega(0, \mu)$ と $\Omega_0(0, \mu)$ の差もこれとほぼ同じ値を持ち、従って $-\int M dH$ は殆ど消えてしまうことを以下に示す。

3. 界面エネルギー

$\Omega(0, \mu)$ と $\Omega_0(0, \mu)$ の差の原因は x 方向の波数 $k_x = 0$ の状態の欠落である。

$\Omega_0(0, \mu)$ は k_x に関する積分から得られる。それに対して $\Omega(0, \mu)$ は

$k_x = (\pi/L), (2\pi/L), (3\pi/L), \dots$ からの寄与の和から得られる。この最低次の評価は

$(\pi/2L) < k_x$ の積分として得られる。すなわち $\Omega(0, \mu) - \Omega_0(0, \mu)$ は $0 < k_x < (\pi/2L)$ の区間での積分である。 $0 < k_x < (\pi/2L)$ の区間での積分を除くことは全ての電子の k_x を $(\pi/2L)$ 増加させることと等価である。何故ならば (1) から分かるように積分区間の端 $E = \mu$ では被積分関数は 0 であるから。従って、

$$\Omega(0, \mu) - \Omega_0(0, \mu) = \sum (\partial E / \partial k_x) (\pi/2L) \quad (4)$$

次に $\Omega(H, \mu)$ と $\Omega_0(H, \mu)$ の比較をする。図の面積を評価するとその最低次は、

$$\Omega(H, \mu) - \Omega_0(H, \mu) = \sum (R(E)/L) (h\omega/2)$$

$R(E)$ は回転半径である。

$$(\partial E / \partial k) / h = R(E)\omega$$

の関係代入して、

$$\Omega(H, \mu) - \Omega_0(H, \mu) = \sum (\partial E / \partial k) / L \quad (5)$$

$(\partial E/\partial k_x)$ を k の xy 面での方向で平均すると、

$$(\partial E/\partial k_x) \text{の平均} = (2/\pi)(\partial E/\partial k)$$

であるから、結局

$$(4)=(5)$$

である。従って、

$$\begin{aligned} \Omega(H, \mu) - \Omega(0, \mu) &= \Omega_0(H, \mu) - \Omega_0(0, \mu) \\ &= C(\mu - nh\omega)^2 \end{aligned}$$

となり巨大なエネルギー差は現れない。但しこの評価はあくまでも最低次に関してである。

4. 境界条件

二つの問題を考える。第一は上記のエネルギー差の見積もりは高次においてはどうかということ、第二は表面の境界条件が異なると結果がどう変わるかということである。先ず第二の問題を取り扱う。上記の議論は表面のポテンシャルとして無限高階段関数すなわち波動関数の界面での値は 0 を仮定していた。その反対の極限すなわち波動関数の微分が界面で 0 になる場合を考えよう。これは必ずしも現実離れした数学的モデルというわけではない。界面の単原子層に深いポテンシャルが存在してその領域で波動関数の位相変化が $\pi/2$ であるときこのモデルに等価となる。

$\Omega(0, \mu)$ は $k_x=0, (\pi/L), (2\pi/L), (3\pi/L), \dots$ からの寄与の和から得られる。これの最低次の評価は $-(\pi/2L)k_x$ の積分として得られる。従って

$$\Omega(0, \mu) - \Omega_0(0, \mu) = \Sigma(\partial E/\partial k_x)(-\pi/2L) \quad (6)$$

この結果は (4) を異符号にしたものである。

次に $\Omega(H, \mu) - \Omega_0(H, \mu)$ を調べるため先ず最低状態の $(E-\alpha)$ 関係を考察する。十分左側に離れている完全軌道を考える。E を $(1/2)h\omega$ よりも無限小上げると右の遠方に節が現れる。無限小下げると右の遠方に 微係数=0 の点が現れる。従って界面から十分離れているときは $E=(1/2)h\omega$ であることは自明である。この波動関数の中心では波動関数の微係数は 0 である。従って中心が界面に位置する状態すなわち $E=(1/2)h\omega, \alpha=0$, の解が存在する。 α が界面の外側に移動すると E は増加する。 $E=(n+1/2)h\omega, \alpha=0$ の完全軌道の右端の 微係数=0 の位置を通る曲線が $(E-\alpha)$ 関係である。

$-R < \alpha < 0$, の領域での $(E-\alpha)$ 関係が難しい。完全軌道について成立する次の一般論に着目する。量子数 n の場合 $-\infty$ から $+\infty$ までの位相の変化は $(n+1)\pi$ である。左右の転換点の外側でそれぞれ $\pi/4$, 内側で $(n+1/2)\pi$ である。最低状態の例では転換点内では $\pi/2$ である。界面に接するときは左の転換点から界面まで $\pi/4$ でなくてはならない。上記の $E=(1/2)h\omega, \alpha=0$, の場合はその一例である。右の転換点が界面であるとき エネルギーが極小となる。このとき $E=(1/4)h\omega, \alpha=-R(1/2)/2$, と見積もられる。ここで $R(1/2)$ は $E=(1/2)h\omega$ のときの回転半径を表す。量子数 n の場合も同様の類推が当てはまる。右の転換点が界面であるときエネルギーが極小となる。そのとき左右の転換点の内側での位相変化は $(n+1/4)\pi$ である。これを完全軌道での $E=(n+1/2)h\omega$ 位相変化 $=(n+1/2)\pi$ と比較すると、極小点では $E=(n+1/4)h\omega$ となり完全軌道よりも $(1/4)h\omega$ 下がっているという結論は全ての n について成立する。そのときの α を見積もる。 n が大きいときは n を $1/4$ 減らしたときの転換点の位置の変化は転換点近くの波長に比べて無視できる。

従って a はほぼ左側の転換点にある。図の太い破線が $(E-a)$ 関係を表す。

$[\Omega(H, \mu) - \Omega_0(H, \mu)]$ は負であり、太い横実線で塗りつぶした部分の面積の和に対応する。

5. 面積の評価

$[\Omega(H, \mu) - \Omega_0(H, \mu) - \text{Landauエネルギー}]$ の最低次は消えることが分かったが高次の評価は難しい。波動関数の端の波長は $\propto H^{-1/3}$ で $H \rightarrow 0$ で発散するため高次の評価にこの因子が残ると難しい。そこで次の工夫をする。上記の二つの両極限の境界条件の平均について評価する。 $[\Omega_0(H, \mu) - \Omega_0(0, \mu)]$ に関してはそれは消えている。又両者の中間の境界条件すなわち界面での位相が $\pi/4$ という場合も消えることは明らかである。

$[\Omega(H, \mu) - \Omega_0(H, \mu)]$ は両極限で異符号であるから、然るべき位相でそれが消えるはずであるが位相が $\pi/4$ で正確に消えるかどうかは断定できない。完全軌道の節または微係数=0 の位置は左右対象である。そのため両極限での $(E-a)$ 関係に関しては精密な議論が可能であった。位相が $\pi/4$ 等他の場合には対称性が破れ評価が難しい。

横線の面積と黒く塗りつぶした面積の評価をしよう。 $E=(n+1/2)h\omega, a=0$ の完全軌道の節の位置を左から並べて: $a(1, n), a(2, n) \rightarrow a(n, n)$: と表す。微係数が 0 の位置を: $a(0.5, n), a(1.5, n) \rightarrow a(n+0.5, n)$: と表す。 $E=(r+1/2)h\omega, a=0$ ($n < r < n+1$) のときは完全軌道ではなく、右の遠方で収束するときは左の遠方で発散する。

節の位置を $a(0, r), a(1, r), a(2, r) \rightarrow a(n, r)$

微係数=0 の位置を $a(0.5, r), a(1.5, r) \rightarrow a(n+0.5, r)$

と表す。すなわち $a(0, r)$ がつけ加わる。横線の面積は端の切片を切り離して評価する。端の曲線は対数発散しているからである。塗りつぶした面積はそのまま評価する。どちらも $a(j, r)$ の和の積分である。前者は $n < r < n+1$ で 後者は $n-1 < r < n$ での積分である。

前者の被積分関数は $|a(1, n)|, r=n: 0, r=n+1: -a(n+1, n+2) = -|a(2, n+2)|, r=n+2:$

後者の被積分関数は $0, r=n-1: a(n+0.5, n) = |a(0.5, n)|, r=n:$

$a(n+0.5, n+1) + a(n+1.5, n+1) = |a(0.5, n+1)| + |a(1.5, n+1)|, r=n+1:$

被積分関数を二次式で近似すると、

前者の積分は $(1/2)|a(1, n)| - (1/12)[|a(1, n)| - |a(2, n+2)|]$

後者の積分は $(1/2)|a(0.5, n)| + (1/12)[2|a(0.5, n)| - |a(0.5, n+1)| - |a(1.5, n+1)|]$

n が大のとき $a(1, n)$ と $a(1, n+1)$ の差は無視できるのでどちらも $a(1)$ と書く。

端の切片の面積を S_0 , 下の窪みの面積を S_1 と表す。斜線の面積から塗りつぶした面積を引いた結果は

$$S_0 - S_1 - (1/12)[7x(1) + 2x(1.5) + x(2)] \quad (7)$$

ここで $x(1) = |a(0.5)| - |a(1)|$, $x(1.5) = |a(1)| - |a(1.5)|$, $x(2) = |a(1.5)| - |a(2)|$.

と定義した。(7)を変形して、

$$(7) = (1/12)\{2[x(1) - x(1.5)] + [x(1) - x(2)]\} + [S_0 - x(1)] - \{S_1 - (1/6)x(1)\} \quad (8)$$

不等式 $x(1) > x(1.5) > x(2)$, に着目する。第一の $\{ \}$ は正であり $x(1)$ の数分の一程度の値をもつ。その数値は Airy関数の解析から可能である。第二の $[\]$ は正であるが殆ど消える。第三の $- \{ \}$ は正負は不明であるがこれも殆ど消える。第一の $\{ \}$ が優勢であり (8) は正と断定できるので反磁性が予想される。

$$(8) = \eta x(1, n) \quad (9)$$

とおいてみる。 η は数分の一程度である。(7), (8)では n と $n \pm 1$ との差を無視したが、以下 $0 < n < N$ で加えるため (9)では n を復活させた。この結果から Ω のずれを見積もる。

Ω のずれへの (9)からの寄与は

$$\sim C[\eta x(1, n)/L](h\omega)^2 \quad (10)$$

C は (3)に現れた。端の四分の一波長 $x(1, n)$ の評価は

$$[x(1, n)]^3 \sim [x(1, 1)]^2 x(n/2, n) = [x(N/2, N)]^3 N^{3/2} n^{-1/2} \quad (11)$$

ここで $N = \mu/h\omega$, とおいた。(11)を(10)して n について加える。電子一個あたりの磁化は

$$\sim \eta(eh/mc)N^{-2/3} \quad (12)$$

Landau反磁性に比べて $\sim N^{1/3}$ 大きく、強磁性に比べて $\sim N^{-2/3}$ 小さいとの結論である。

6. 検討

強い H の場合の端の波長の影響に関しては多くの研究がある[3, 5, 6]。 H の増加に対して図の (E - ω)曲線は横に縮み縦に伸びる。面積の最低次は一定である。端の波長の影響は無いという結論はもっともにみえる。それに対してこの研究では (E - ω)曲線が形成される領域を扱う。従って $\sim N^{1/3}$ の磁化は今までの研究結果と矛盾しない。 Ω のずれを位相が 0 又は $\pi/2$ の各々の場合について直接評価することは難しい。両者の平均を考えることにより厳密な議論が可能になっている。反磁性が両者に同じ程度又はどちらかで強く現れるのかは今後の研究課題である。

References

- [1] E.H.Sondheimer and A.H.Wilson:Proc.Roy.Soc.A **210**(1951)173.
- [2] K.Ohtaka and T.Moriya,:J.Phys.Soc.Jpn.**34**(1973)1203.
- [3] Nedorezov,S.S.:Sov.J.LTPJETP **6**, (1981)449.
- [4] Nedorezov,S.S.:JETP **37**, (1973)317.
- [5] Nedorezov,S.S.:JETP LETT **33**, (1981)215.
- [6] Shishido,F.:Phys.Lett.A **152**, (1991)443.
- [7] Azbel,M.Y.:Phys.Rev.Lett.**82**,2, (1999)422.
- [8] M.Steinberg,W.Ebeling and J.Ortner:Phys.Rev.E **61**,3(2000)2290.
- [9] Shishido,F.:Phys.Lett.A **152**, (1991)427.