

量子極限における
固体中ディラック電子の軌道磁化

河村 省吾

電気通信大学 情報理工学研究科
博士(理学)の学位申請論文

2024年3月

量子極限における
固体中ディラック電子の軌道磁化

博士論文審査委員会

主査	伏屋	雄紀	教授
委員	松林	和幸	准教授
委員	佐々木	成朗	教授
委員	斎藤	弘樹	教授
委員	池田	暁彦	助教

著作権所有者

河村 省吾

2024年

Orbital magnetization of three-dimensional Dirac electrons in the quantum limit

Shogo Kawamura

Abstract

The dependence of magnetization of three-dimensional Dirac electrons in the quantum limit on the magnetic field and temperature was studied. The magnetization was calculated by differentiating the free energy with respect to the magnetic field. The field and temperature dependence of the chemical potential were entirely considered under the canonical ensemble condition. The total magnetization M consisted of two contributions from the conduction M_c and valence M_v bands. M_v was insensitive to temperature and exhibited sub-linear field dependence, which is consistent with the previous research on Dirac electrons. By contrast, M_c was sensitive to both temperature and magnetic field, yielding a non-trivial contribution to the total M . As a result, at low temperatures M exhibited sub-linear field dependence, whereas M exhibited super-linear field dependence at high temperatures.

量子極限における固体中ディラック電子の軌道磁化

河村 省吾

概要

軌道磁化は磁場中においてローレンツ力を受けた電子が作る反磁性電流に起因する。この軌道磁化を弱磁場において量子力学を用いて最初に説明したのがランダウであり、ランダウ反磁性として知られている。これにより一般的に反磁性磁化は磁場に対して linear に依存すると考えられている。

弱磁場での反磁性理論の研究はランダウの反磁性磁化の理論の後、パイエルスによって周期ポテンシャル中の電子の議論に拡張され、LP 公式が導かれた。これにより多くの物質の反磁性が説明された。しかし、固体中にディラック電子が実現しているとされる、歴史的に最初に反磁性が発見されたビスマスの反磁性は説明できなかった。その原因は、LP 公式ではのちにそれがバンド間磁場効果と関係があると分かる、ハミルトニアン H の非対角項を無視するという近似をしていたためであった。1970年に Fukuyama と Kubo は固体中ディラック電子を記述するモデルにおいてバンド間磁場効果を厳密に取り入れた理論を完成させ、弱磁場におけるディラック電子の反磁性は解明されることとなった。しかし、量子極限のような強磁場でのディラック電子の反磁性は完全には理解されていない。量子極限はキャリアが感じるサイクロトロンエネルギーが系の化学ポテンシャルよりも高くなり、全てのキャリアが最低ランダウ準位だけを占有した状態を言う。3次元ディラック電子の場合、磁場によりランダウ分裂したエネルギー準位の最低準位のみ一方向のみのスピン状態をもち、かつその準位のみ磁場の大きさに依存しない。そして最低ランダウ準位以外は2重縮退が残り、各準位とそれらの間隔が磁場の大きさに依存する。この様に、3次元ディラック電子の最低ランダウ

ウ準位は単一スピン状態しかないので、3次元ディラック電子は量子極限に至ると伝導帯のキャリアが全て同じスピン状態を持つことになる。つまり、一種の強磁性状態になると予想される。弱磁場における3次元ディラック電子の磁化 M は、 $M < 0$ であることが分かっている。しかし、系が量子極限になり単一スピン状態になったとき、 $M < 0$ を保つのか、それとも $M > 0$ になるのかは理論的に分かっていない。

近年の理論研究で絶対零度において3次元ディラック電子の価電子帯寄与の反磁性磁化は sub-linear になることが報告された。また実験では 1.3K の低温において量子極限におけるビスマスの磁化が反磁性を示し、sub-linear の磁場依存性となることが示された。理論では伝導帯寄与は考慮されておらず理論的に量子極限でのディラック電子の磁化の磁場依存性が議論されていない。そして、理論でも実験でも高温においても磁化が sub-linear の磁場依存性を保つかは謎のままである。

我々は伝導帯寄与も考慮し、量子極限そして有限温度においても3次元ディラック電子の軌道磁化が sub-linear の磁場依存性を保つかを明らかにするために、磁化の磁場および温度依存性を評価した。その際、カノニカル条件下であっても従来では無視されていた化学ポテンシャルの磁場依存性も考慮した。従来の理論では、電子系が正準集団に属するときにも化学ポテンシャルの磁場依存性はないものとして計算されていた。確かに3次元電子系の化学ポテンシャルは弱磁場では磁場に依存しないとみなせるが、量子極限においては化学ポテンシャルの磁場依存性はもはや一定とはみなすことはできない。量子極限の様な強磁場領域における磁化を計算するには、系の化学ポテンシャルの磁場依存性を考慮する必要があることは容易に推察できる。

本研究では、等温、等積、等密度というカノニカル条件下の電子系を考える。まず、基本的な電子系である自由電子に着目しその磁化を求めた。これによりカノニカル条件下において量子極限における物理量を計算する際には従来の研究では無視されていた化学ポテンシャルの磁場と温度依存性を考慮すべきこと明らかにした。その後、3次元ディラック電子の磁化の磁場依存性を求めた。その結果、自由電子の磁化は、化学ポテンシャルの磁場と温度依存性を考慮する場合は有限の値に近づくが、考慮しない場合は量子極限で消失することが分かった。ディラック電子の場合、 $M \propto -B^\varphi$ と分類される磁化の磁場依存性は、温度によって変化することが分かった。低温では、 $\varphi \simeq 0.7 - 0.8$ の sub-linear の磁場依存性が観察され、従来のディラック電子の研究結果と一致した。高温では、 $\varphi > 1$ の super-linear の磁場依存性が観察された。この φ の定性的な変化は、伝導帯寄与の非単調な磁場依存性、ひいては化学ポテンシャルの磁場および温度依存性に関連していることが明らかとなった。

目次

第 1 章	序論: 背景	1
1.1	ディラック電子と反磁性	1
1.2	ビスマスの電子構造	2
1.3	強磁場領域におけるディラック電子の磁化	3
第 2 章	理論	5
2.1	ランダウ量子化	5
2.2	ランダウ縮重度	8
2.3	ランダウ反磁性	9
2.4	磁場中粒子の半古典論	13
2.4.1	磁場中の電子の動き	13
2.4.2	電子運動の量子化	18
2.4.3	熱力学ポテンシャルと磁化	21
2.4.4	2次元系, $T=0$ における熱力学ポテンシャル	22
2.4.5	3次元系, $T=0$ における熱力学ポテンシャル	30
2.4.6	位相スミアリング	34
2.4.7	Lifshitz-Kosevich の公式	38
2.5	Fukuyama 公式と弱磁場におけるディラック電子の磁化率	39
2.5.1	3次元ディラック電子の模型	39
	Luttinger-Kohn による $k \cdot p$ 理論	39
	Wolff ハミルトニアン	45
2.5.2	バンド間磁場効果	48
2.5.3	ディラック電子の磁化率	48
2.5.4	ディラック電子の磁化の起源	52
第 3 章	自由電子	55
3.1	状態密度	56
3.2	キャリア密度	59
3.3	自由エネルギー	59
3.4	磁化	62

第 4 章	ディラック電子	67
4.1	状態密度	67
4.2	カットオフ関数の導入	68
4.3	キャリア密度	69
4.3.1	伝導帯-キャリア密度 N_c	69
4.3.2	価電子帯-キャリア密度 N_v	72
4.4	自由エネルギー	74
4.4.1	伝導帯-自由エネルギー F_c	76
4.4.2	価電子帯-自由エネルギー F_v	78
4.5	磁化	79
	伝導帯-磁化数値計算 M_c	79
	価電子帯-磁化数値計算 M_v	81
4.5.1	磁化数値計算 $M = M_c + M_v$	84
第 5 章	議論	85
5.1	自由電子	85
5.1.1	磁化の磁場依存性	85
5.1.2	磁化の強磁場極限	88
5.2	ディラック電子	93
5.2.1	磁化の磁場依存性	93
5.2.2	磁化の温度依存性	94
5.2.3	磁化率の化学ポテンシャル依存性	95
5.2.4	化学ポテンシャルの磁場による制御	98
5.2.5	磁化以外の物理量の磁場および温度依存性	98
5.2.6	先行研究との比較	100
第 6 章	総括	103
付録 A	カットオフ関数なしの場合のディラック電子の伝導帯寄与	105
A.1	伝導帯-キャリア密度 N_c	105
A.2	伝導帯-自由エネルギー F_c	105
A.3	伝導帯-磁化 M_c	107
付録 B	磁化と磁化率の単位	111
付録 C	ランダウ量子数の和の上限	113
付録 D	ディラック電子の磁化 M の凸性	115
付録 E	局所最小二乗法による微分	117
付録 F	$\int \sqrt{x^2 - g} dx$ の計算	119

第1章

序論: 背景

1.1 ディラック電子と反磁性

近年, トポロジカル絶縁体, トポロジカル半金属など, ディラック電子系物質の物性が注目を集めている [1–5]. 量子ホール効果 [6–11], 量子スピホール効果 [1, 12], 量子異常ホール効果 [13–16], プレーナーホール効果 [17, 18], 線形磁気抵抗, 非飽和磁気抵抗 [19], 高易動度 [20], 反磁性 [21–25] など多岐に渡る. それらはいずれもディラック電子の特異なバンド構造に由来しているとされ, 電子状態との関係が盛んに議論され研究が進んでいる.

中でも反磁性とディラック電子の歴史は長い. 反磁性は 1778 年に Brugmans によってビスマスにおいて初めて発見され, 1845 年に Faraday によって現象の研究が進められた [26–28]. 弱磁場領域の反磁性の解明は多くの理論家によってなされた. 最初にランダウが自由電子模型において軌道反磁性を説明し [29], その後パイエルスによって周期ポテンシャル中の電子の議論に拡張された [30]. この LP 公式 (Landau-Peierls 公式) によって, 多くの反磁性磁化は説明できたものの, 一番初めに実験で発見されたビスマスの反磁性は説明できなかった. その原因は, LP 公式はのちにそれがバンド間磁場効果と関係があると分かる, ハミルトニアン¹の非対角項を無視するという近似をしていたことだった. ビスマスはバンド構造として L 点にディラック電子を持っており [31], バンド間磁場効果がとても大きい物質である. このため, ビスマスの反磁性を説明するには LP 公式は適さなかった. その後, Adams [32] が理論でバンド間磁場効果の重要性を指摘し, バンド間磁場効果を厳密に取り入れた理論が Hebborn-Sondheimer などによって考えられた [33–38]. しかし, これらの公式は実際の物質に適用するには難しかった. 1970 年に Fukuyama と Kubo は Wolff 模型 [39] においてバンド間磁場効果を厳密に取り入れた理論を完成させ [40], ランダウの反磁性理論から 40 年かかったビスマスの弱磁場領域での反磁性の謎は解き明かされた. このようにビスマスで最初に発見された反磁性は一般にはバンド間磁場効果が大きいとされるディラック電子の性質に起因していた.

1.2 ビスマスの電子構造

ハミルトニアンの特異な電子構造に起因している。このように特異な電子構造が故に、結果的に様々な現象が観測されやすく、反磁性以外にもビスマスで歴史上初めて発見された現象が多く存在する (表 1.2.1)。ビスマスの電子構造は Shoenberg,Uddin[48, 49] の実験と

西暦	発見された現象
1778	反磁性 [26–28]
1821	ゼーベック効果 [41]
1886	ネルンスト効果 [42]
1928	線形磁気抵抗効果 [43]
1930	シュブニコフ=ド・ハース効果 [44]
1930	ド・ハース=アルフェン効果 [45]
1955	金属中のサイクロトロン共鳴 [46]
1963	磁気歪み振動 [47]

表 1.2.1: ビスマスにおいて歴史上初めて発見された現象 ([28] を参考にし作成)

Jones[50, 51] の理論研究を皮切りにスタートし、バンド構造の理論計算 [52–54]、キャリアの符号 [55]、全キャリア数 [56]、フェルミ面ごとのキャリア数 [49, 55, 57, 58]、電子面 [59]、L 点におけるバンドギャップの大きさ [60–63] など様々な議論を経て 1970 年代頃にはおおよそ正確な理解が得られた [64]。

V 族半金属であるヒ素、アンチモン、ビスマスは全て菱面体構造を形成する。V 族半金属は単位胞には 2 つの原子を有し、それぞれの原子あたり 5 つの価電子構造 (s^2p^3) が存在する。エネルギーの大きさは、結合-s 状態、反結合-s 状態、結合-p 状態、反結合-p 状態の順に高い。V 族の場合は s 電子と p 電子のエネルギーの乖離が大きい。その結果、結晶化するときは s^2 電子は寄与せず p^3 のみで 3 価を示すことになる。この 3 つの p ボンドが 6 個の隣接原子を結びつけることで sc(2 つの fcc が組み合わせさせたもの) が安定な結晶構造になる。さらにここで一方の fcc に属する格子点を単位胞の対角線方向 [111] にわずかにずらす変位を加わることで、sc 格子ではなく菱面体構造を形成することになる。この加える変位の大きさは頂角 α を使用する。それぞれの結晶構造定数はヒ素 ($a=4.13, \alpha = 54.1^\circ, u = 0.226$)、アンチモン ($a=4.51, \alpha = 57.1^\circ, u = 0.233$)、ビスマス ($a=4.75, \alpha = 57.2^\circ, u = 0.237$) である。変位を加わることで、ブリルアンゾーン内で fcc の L 点の対称性が低下し、結果として、3 回対称軸を持った 2 つの T 点と 4 つの L 点が出現する [64, 65]。

このように、ビスマスにおけるこの微細な変位が L 点におけるバンドギャップの形成に寄与し、高い易動度と極めて小さい有効質量を引き起こす。ビスマスの L 点でのバンドギャップは約 14meV[60–63] と非常に小さくディラック電子が実現しているとされている。また、ビスマス原子のスピン軌道結合は 1.7eV であり [66]、ビスマスの特徴の一つである。このよ

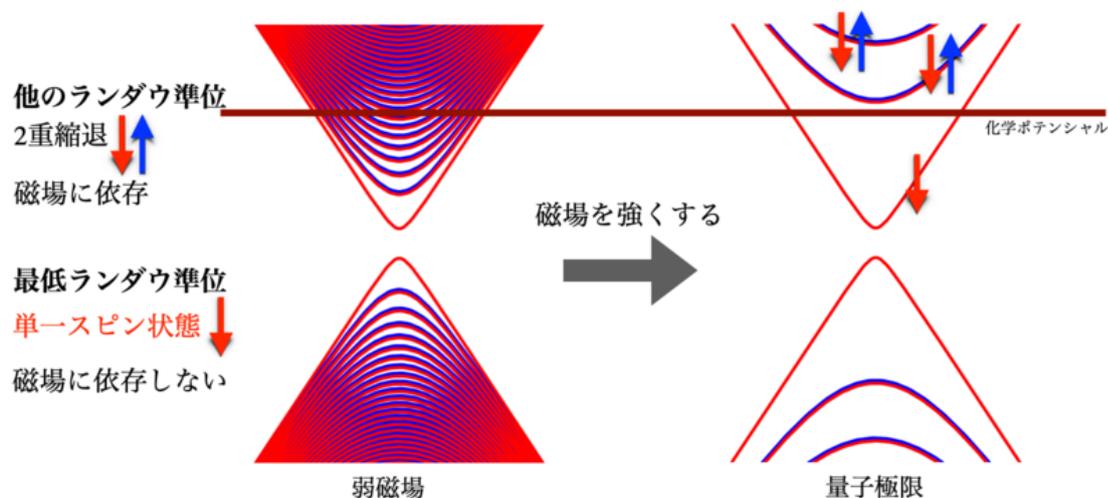


図 1.3.1: 3次元ディラック電子の量子極限。量子極限はキャリアが感じるサイクロトロンエネルギーが系の化学ポテンシャルよりも高くなり、全てのキャリアが最低ランダウ準位だけを占有した状態のこと。量子極限に入る磁場は最低ランダウ準位より一つ上位のランダウ準位のバンド端と化学ポテンシャルが接するときの磁場である。量子極限では化学ポテンシャルは最低ランダウ準位のみと交点を持つ。量子極限は物理用語であり、普通の意味での極限ではない。

うにビスマスでは結晶構造と電子構造の相互作用により特異な性質が引き起こされ、結果としてトポロジカルな性質や他の興味深い現象を示す物質となっている。

1.3 強磁場領域におけるディラック電子の磁化

弱磁場領域でのディラック電子の反磁性は解明されたものの [21–25]、強磁場領域、特に量子極限におけるディラック電子の反磁性は、弱磁場領域ほど理解されていない。量子極限はキャリアが感じるサイクロトロンエネルギーが系の化学ポテンシャルよりも高くなり、全てのキャリアが最低ランダウ準位だけを占有した状態を言う (図 1.3.1)。ビスマスで実現されるとされる 3次元ディラック電子の場合、磁場によりランダウ分裂エネルギー準位の最低ランダウ準位のみ一方のスピン状態だけをもち、かつその準位のみ磁場の大きさに依存しない。そして最低ランダウ準位以外は 2重縮退が残り、各準位とそれらの間隔が磁場の大きさに依存する。この様に、3次元ディラック電子の最低ランダウ準位は単一スピン状態しかないので、3次元ディラック電子は量子極限に至ると伝導帯のキャリアが全て同じスピン状態を持つことになる。つまり、一種の強磁性状態になると予想される。0 磁場における 3次元ディラック電子の磁化 M は、 $M < 0$ であることが分かっている [40]。しかし、系が量子極限になり単一スピン状態になったとき、 $M < 0$ を保つのか、それとも $M > 0$ になるのかは理論的に分かっていない。このように単一スピン状態の物性はあまりにも知られていない。

近年では、3次元ディラック電子を含むトポロジカル物質の強磁場中の磁化の研究が進んでいる。2次元ワイル電子であるグラフェン [67, 68] や 3次元ワイル電子である TaAs [69]

やグラファイト [70] は強磁場 B で磁化 M が $M \propto -B^d (d < 1)$ となって, sub-linear の磁場依存性を持つことが実験や理論によって示された.

3次元ディラック電子に関する強磁場における実験は Kapitza [43] により始まった. 2019年には, 量子極限におけるビスマスの磁化は反磁性を示し, sub-linear となることが実験で示された [71]. 3次元ディラック電子の磁化が sub-linear の磁場依存を持つことは, ハミルトニアンが 2×2 であるギャップのある3次元ワイル電子を用いた計算 [69] や量子電磁気学を用いた磁化の価電子帯寄与の計算 [72] によって理論的にも研究されている. しかし, 彼らの理論は絶対零度における理論であり, 有限温度における説明はされていない. また, 3次元ディラック電子のモデルは 4×4 のハミルトニアン [39] を用いることが適切である.

3次元ディラック電子系である Bi[31], PbTe[73–76] では, 弱磁場において, 温度の上昇に伴って反磁性が小さくなることが観測されている [75, 77]. 3次元ワイル電子系の Cd_3As_2 [78] においても同様の反磁性の温度依存性が観測された [79]. また, 2次元ワイル電子であるグラフェンでは, 化学ポテンシャルがワイル点に固定されている場合, 弱磁場/高温極限でも強磁場/低温極限でも, 温度の上昇に伴って反磁性が小さくなることが理論的に示された [68]. しかし, 本来, 化学ポテンシャルは温度と磁場の関数である. 弱磁場においては, 化学ポテンシャルは温度に依存しないとみなせるが, 量子極限では化学ポテンシャルは温度に依存する. 化学ポテンシャルが温度と磁場に依存するとき, 量子極限において反磁性の温度依存性はどうなるのだろうか.

また, 磁化の磁場依存性の計算においても, 従来の理論 [80, 81] では, 電子系が正準集団に属するときにも化学ポテンシャルの磁場依存性はないものとして計算されていた. 確かに3次元電子系の化学ポテンシャルは弱磁場では磁場に依存しないとみなせるが, 量子極限においては化学ポテンシャルの磁場依存性は無視できない. このことは Zhang らによっても指摘された [69]. 量子極限の様な強磁場領域における磁化を計算するには, 系の化学ポテンシャルの磁場依存性を考慮する必要があることは容易に推察できる.

本論文の構成

本論文の構成は次の通りである. 第2章では, 本論文の計算を進める上での背景となる理論を記載する. 電子系に磁場を印加するときの基本事項であるランダウ量子化, ランダウ縮重度をさらい, 弱磁場領域での反磁性磁化率の基本公式であるランダウ反磁性, 半古典論を用いた強磁場領域における磁化の理論, Fukuyama 公式を用いた0磁場におけるディラック電子の磁化率を説明する. 第3章において, まず3章および4章で扱う計算の概要を簡単に説明する. その後, 自由電子の磁化の温度および磁場依存性の計算結果を示す. ここでは化学ポテンシャル μ の磁場 B と温度 T 依存性が特に量子極限で磁化 M に重要な役割を果たすことを示し, しばしば見過ごされている $\mu(B, T)$ の重要性を説明する. その後, 第4章において本題であるディラック電子の磁化の温度および磁場依存性についての計算結果を示す. 第5章では自由電子とディラック電子の磁化についての議論をする. 強磁場極限での自由電子の磁化の飽和値, ディラック電子の磁化の磁場および温度の依存性, 従来理論との比較を行う. 第6章を本論文全体の総括とした.

第2章

理論

2.1 ランダウ量子化

磁場による量子化はランダウ量子化と呼ばれる。この章では主に文献 [82] を参考にした。磁場中の自由電子のハミルトニアン \mathcal{H} を考えて、そのエネルギー固有値と波動関数を求める。求めたエネルギー固有値が磁場によって離散化することを示す。周期境界条件を持つ L_x , L_y , L_z の箱に閉じ込められた自由電子系を考える。磁場を B として、これに対応するベクトルポテンシャルを \mathbf{A} とする。簡単のためスピンは無視する。このとき、磁場中の自由電子のハミルトニアン \mathcal{H} は次で与えられる。

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m_e} (-i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2 \quad (2.1.1)$$

この固有方程式は次である。

$$\frac{1}{2m_e} (-i\hbar\nabla + e\mathbf{A})^2 \psi(\mathbf{r}) = \varepsilon\psi(\mathbf{r}) \quad (2.1.2)$$

ここでは、 $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$ とランダウゲージを採用して計算する。すると \mathcal{H} は、

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m_e} \left[p_x^2 + (p_y + eBx)^2 + p_z^2 \right] \quad (2.1.3)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial}{\partial y} + i\frac{eB}{\hbar}x \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (2.1.4)$$

となる。今回はランダウゲージ $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$ を採用していることから、任意の並行移動に対して y と z 方向の運動量成分は保存する。つまり、

$$\dot{p}_y = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, p_y] = 0, \quad \dot{p}_z = \frac{i}{\hbar} [\mathcal{H}, p_z] = 0 \quad (2.1.5)$$

を満たす。このとき、波動関数は

$$\psi(x, y, z) = u(x)e^{ik_y y} e^{ik_z z} \quad (2.1.6)$$

のように変数分離形でかける。これを (2.1.2) 式に挿入すると、 $u(x)$ は次の方程式を満たす。

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2 u(x)}{dx^2} + \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(k_y + \frac{eB}{\hbar}x \right)^2 u(x) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e} u(x) = \varepsilon u(x) \quad (2.1.7)$$

$\omega_c = \frac{eB}{m_e}$ は自由電子のサイクロトロン振動数である。これと

$$x_0 = -\frac{\hbar}{eB}k_y = -\frac{\hbar}{m_e\omega_c}k_y \quad (2.1.8)$$

を導入すると, $u(x)$ の方程式は,

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2u(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m_e\omega_c^2 (x-x_0)^2 u(x) = \left(\varepsilon - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e}\right) u(x) \quad (2.1.9)$$

となる。これは, x_0 を振動中心とした調和振動子のシュレーディンガー方程式である。よって, この固有関数はエルミート多項式 H_n でかける。

ここで, 1次元の調和振動子について復習する [83]。調和振動子とは固定点にばねで結ばれて, 釣り合いの点からの変位に比例した力で引き戻される質点である。その質点の釣り合い点からの変位を x , 運動量を $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ とすると, この質点のハミルトニアンは \hat{H} は,

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (2.1.10)$$

である。これは, 次のように因数分解とお釣りで書ける。

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \hat{p} \right) \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \hat{p} \right) + \frac{1}{2}\hbar\omega \quad (2.1.11)$$

さらにこれは,

$$a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} - i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \hat{p} \quad (2.1.12)$$

$$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{x} + i\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \hat{p} \quad (2.1.13)$$

で定められる, $[a, a^\dagger] = 1$ の交換関係が成り立つ生成消滅演算子 a^\dagger と a によって,

$$\hat{H} = \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad (2.1.14)$$

とかける。この固有方程式は

$$\hat{H}\phi(x) = E\phi(x) \quad (2.1.15)$$

であるが,

$$a^\dagger a \phi(x) = \lambda \phi(x) \quad (2.1.16)$$

というように, $a^\dagger a$ の固有値 λ が分かれば, \hat{H} の固有値 E は,

$$E = \left(\lambda + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad (2.1.17)$$

である。 a^\dagger と a はその名の通り, それを状態 $\phi(x)$ に作用させると, $a^\dagger a$ の固有値が次のように一つ大きくなる, もしくは一つ小さくなる。

$$(a^\dagger a) a^\dagger \phi(x) = (\lambda + 1) a^\dagger \phi(x) \quad (2.1.18)$$

$$(a^\dagger a) a \phi(x) = (\lambda - 1) a \phi(x) \quad (2.1.19)$$

ここで、 $a^\dagger a$ の固有値 λ に下限が存在することに注意する。なぜなら、(2.1.16) 式の両辺と $\phi(x)$ の内積を取ると、 $\langle a\phi(x), a\phi(x) \rangle = \lambda \langle \phi(x), \phi(x) \rangle$ となる。自己内積は 0 以上であるので、 $\lambda \geq 0$ である。この下限 0 を固有値 λ_0 として、この固有値に属する固有関数を $\phi_0(x)$ と定める。まず、この $\phi_0(x)$ を求める。 $\phi_0(x)$ は、

$$a\phi_0(x) = 0 \quad (2.1.20)$$

であるので、これを展開すると、 $\frac{\partial}{\partial x}\phi_0(x) = -\frac{m\omega}{\hbar}x\phi_0(x)$ となる。これは変数分離で簡単に $\phi_0(x)$ について求められて、 $\phi_0(x)$ の規格化因子を N_0 とすると、

$$\phi_0(x) = N_0 \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \quad (2.1.21)$$

とかける。 N_0 は $\int_{-\infty}^{\infty} |\phi_0(x)|^2 dx = 1$ をガウス積分を用いて解いて、 $N_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}$ となる。結果的に、最低準位 $n = 0$ の場合の固有値と固有関数は、

$$\lambda_0 = 0 \quad (2.1.22)$$

$$\phi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2\right) \quad (2.1.23)$$

である。当然、 $a^\dagger a\phi_0(x) = \lambda_0\phi_0(x)$ である。次に固有値 $\lambda_n = n$ に属する固有関数 $\phi_n(x)$ を求める。 a^\dagger は $\phi(x)$ の固有値を一つ大きくするので、 $\phi_n(x)$ は $\phi_0(x)$ から固有値を n 回大きくした固有値 n に属する固有関数である。よって、 $\phi_n(x)$ の規格化因子 N_n を用いて、 $\phi_n(x)$ は次のように書ける。

$$\phi_n(x) = N_n (a^\dagger)^n \phi_0(x) \quad (2.1.24)$$

N_0 を求める。まず、 $\langle \phi_n(x), \phi_n(x) \rangle$ を考える。 $\phi_n(x) = N_n (a^\dagger)^n \phi_0(x) = \frac{N_n}{N_{n-1}} a^\dagger \phi_{n-1}(x)$ であるので、

$$\langle \phi_n(x), \phi_n(x) \rangle = \left| \frac{N_n}{N_{n-1}} \right|^2 n \langle \phi_{n-1}, \phi_{n-1} \rangle \quad (2.1.25)$$

ここで、任意の n で $\langle \phi_n(x), \phi_n(x) \rangle = 1$ であるので、 $n \left| \frac{N_n}{N_{n-1}} \right|^2 = 1$ となる。さらに $N_0 = 1$ が成り立つので、 $N_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}$ となる。結果的に、最低 n の場合の固有値と固有関数は、

$$\lambda_n = n \quad (2.1.26)$$

$$\phi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n \phi_0(x) \quad (2.1.27)$$

である。当然、 $a^\dagger a\phi_n(x) = \lambda_n\phi_n(x)$ である。以上より、ハミルトニアンは \hat{H} について、

$$\hat{H}\phi_n(x) = E_n\phi_n(x) \quad (2.1.28)$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad (2.1.29)$$

と求まった。 $\phi_n(x)$ はエルミート多項式で書ける。 α を $\alpha = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ とおく。この逆数は磁気長 l_0 である。さらに $\alpha x = \xi$ とする。このとき、任意の関数 $f(\xi)$ について、 $e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{\partial}{\partial \xi} e^{-\frac{\xi^2}{2}} f(\xi) =$

$-\left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi}\right) f(\xi)$ が成り立つので、生成演算子 a^\dagger は次のように変形できる。

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \quad (2.1.30)$$

$$= \frac{-1}{\sqrt{2}} e^{\frac{\xi^2}{2}} \frac{\partial}{\partial \xi} e^{-\frac{\xi^2}{2}} \quad (2.1.31)$$

よって、 $\phi_0(x)$ と $\phi_n(x)$ は、

$$\phi_0(x) = \alpha^{\frac{1}{2}} \pi^{-1/4} \exp\left(-\frac{1}{2}\xi^2\right) \quad (2.1.32)$$

$$\phi_n(x) = \frac{\alpha^{\frac{1}{2}} \pi^{-1/4}}{\sqrt{n!2^n}} e^{-\frac{\xi^2}{2}} e^{\xi^2} \left(-\frac{\partial}{\partial \xi}\right)^n e^{-\xi^2} \quad (2.1.33)$$

$$= \sqrt{\frac{\alpha}{n!2^n}} \pi^{-1/4} e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi) \quad (2.1.34)$$

と書ける。ただし、 $H_n(\xi) = e^{\xi^2} \left(-\frac{\partial}{\partial \xi}\right)^n e^{-\xi^2}$ とおいた。これがエルミート多項式である。 $H_n(\xi)$ は次の関係式が成り立つことが知られている。

$$H_n''(\xi) - 2\xi H_n'(\xi) + 2nH_n(\xi) = 0 \quad (2.1.35)$$

この関係式と (2.1.9) 式の対応から $\phi_n(x)$ に当たる $u_n(x)$ を求めることも可能である [84]。

以上より、(2.1.34) 式に $\alpha = \sqrt{\frac{m_e \omega_c}{\hbar}} = l_0^{-1}$ 、 $\xi = \alpha(x - x_0)$ を代入すると、

$$u_n(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} l_0^{1/2} \sqrt{2^n n!}} H_n\left(\frac{x - x_0}{l_0}\right) e^{-(x-x_0)^2/2l_0^2} \quad (2.1.36)$$

となることが分かる。磁気長 l_0 は半古典的には、エネルギー $\frac{\hbar \omega_c}{2}$ の電子が実空間で円運動するときの軌道半径に対応する。磁場換算すると、 $l_0 = \frac{25.66 \text{ nm}}{\sqrt{B[\text{T}]}}$ であり、原子距離よりはるかに大きな値になる。 $u_n(x)$ の属する固有値は (2.1.29) 式より、次のようになる。

$$\left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega = \varepsilon - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e} \quad (2.1.37)$$

ゆえに \mathcal{H} のエネルギー固有値 ε は

$$\varepsilon = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_e} \quad (2.1.38)$$

と求まった。磁場に並行な成分は磁場に依存せず、磁場に垂直な成分は磁場に依存することを示している。また、磁場によって \mathcal{H} のエネルギー準位が離散化していることを表している。これがランダウ量子化である。このエネルギーの量子化を2次元の調和振動子として解く別の方法もある [82]。

2.2 ランダウ縮重度

ランダウ縮重度とは、磁場に垂直な平面内で運動する粒子の状態の縮退数をいう。ランダウ縮重度 N_p は結論から言うと次のように書ける。

$$N_p = \frac{eB}{2\pi\hbar} L_x L_y = \frac{L_x L_y}{2\pi l_0^2} = \frac{B}{\Phi_0^*} L_x L_y \quad (2.2.1)$$

ここで Φ_0^* は $\Phi_0^* = 2\pi\hbar/e = h/e$ を満たす磁束量子である。つまり、ランダウ縮重度 N_p は、磁気長で l_0 で表現すると試料 $L_x L_y$ 中で軌道半径が l_0 である軌道の数であり、磁束で言うと試料 $L_x L_y$ の磁束 $B L_x L_y$ 中の磁束量子 Φ_0^* の数である。波動関数 (2.1.6) 式を見ると状態は n , k_y , k_z で特徴付けられる可能性があることが分かるが、 \mathcal{H} のエネルギー固有値は n と k_z のみしか依存していない。つまり k_y について縮退していることが分かる。よって、ランダウ縮重度 N_p は次のように波動関数 (2.1.6) 式の量子数 k_y の取り得る状態数を数えることで求めることができる。(2.1.8) 式より

$$x_0 = -\frac{\hbar}{m_e \omega_c} k_y = -l_0^2 k_y \quad (2.2.2)$$

である。(2.1.9) 式で表現される座標 x の振動中心 x_0 は試料に入っている必要があるため、次が満たされるべきである。

$$0 < x_0 < L_x \quad (2.2.3)$$

よって、 k_y については次の制限が成り立つ。

$$-\frac{m_e \omega_c}{\hbar} L_x < k_y < 0 \quad (2.2.4)$$

周期境界条件がある場合は、 k_y は $2\pi/L_y$ 毎に量子化されるので、(2.2.4) 式の範囲で可能な k_y の数が求める N_p になる。

$$N_p = \frac{m_e \omega_c}{\hbar} L_x \left(\frac{2\pi}{L_y} \right)^{-1} \quad (2.2.5)$$

よって、(2.2.1) 式が求められた。

2.3 ランダウ反磁性

ここではパイエルスによって示された LP 公式 [30] の前身であるランダウ反磁性 [29] について導出する [82]。古典的には電子の軌道運動による磁化率は出ない。これはボーア=ファン・リューエンの定理として知られる [85]。量子力学を使用することで初めて電子系の自由エネルギーが磁場に依存することになり電子系の磁化が計算できる。まず、磁場存在下における電子の基底状態のエネルギーを考える。このとき、電子系のエネルギー E は、

$$E = V \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon \rho(\varepsilon) d\varepsilon \quad (2.3.1)$$

磁場存在下における電子系の状態密度 $f(\varepsilon)$ は、

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\hbar\omega_c}{2} \sum_{n=0}^{n_{max}} \left[\varepsilon - \left(a + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c \right]^{-1/2} \quad (2.3.2)$$

となる。よって電子系のエネルギー E は次の様に変形できる。

$$E = V \int_0^{\varepsilon_F} \varepsilon A \sum_{n=0}^{n_{max}} \left[\varepsilon - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \right]^{-1/2} d\varepsilon \quad (2.3.3)$$

$$= VA \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \sum_{n=0}^{n_{max}} \varepsilon \left[\varepsilon - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \right]^{-1/2} \quad (2.3.4)$$

$$= VA \sum_{n=0}^{n_{max}} \int_0^{\varepsilon_F} d\varepsilon \varepsilon \left[\varepsilon - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \right]^{-1/2} \quad (2.3.5)$$

$$= VA \sum_{n=0}^{n_{max}} \int_{(n+1/2)\hbar\omega_c}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \varepsilon \left[\varepsilon - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \right]^{-1/2} \quad (2.3.6)$$

絶対零度における、系の単位体積あたりの電子数 n_e は、有限磁場の場合とゼロ磁場の場合で等しいことから次の関係が成り立つ。

$$n_e = \int_0^{\mu(B)} \rho(\varepsilon) d\varepsilon \quad (2.3.7)$$

$$= \int_0^{\varepsilon_F} \rho_0(\varepsilon) d\varepsilon \quad (2.3.8)$$

ここで、 $\rho_0(\varepsilon)$ はゼロ磁場での自由電子ガスの状態密度であり、 $\rho(\varepsilon)$ は有限磁場での自由電子ガスの状態密度である。これらはそれぞれ次の形をしている。

$$\rho_0(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\varepsilon} \quad (2.3.9)$$

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\hbar \omega_c}{2} \sum_{n=0}^{n_{max}} \left[\varepsilon - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \right]^{-1/2} \quad (2.3.10)$$

ここで、

$$A = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\hbar \omega_c}{2} \quad (2.3.11)$$

とおく、また次の様に $N_{e\varepsilon_F}$ を計算しておく。

$$N_{e\varepsilon_F} = V n_{e\varepsilon_F} \quad (2.3.12)$$

$$= V \varepsilon_F \int_0^{\mu(B)} d\varepsilon A \sum_{n=0}^{n_{max}} \left[\varepsilon - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \right]^{-1/2} \quad (2.3.13)$$

$$= VA \sum_{n=0}^{n_{max}} \int_0^{\mu(B)} d\varepsilon \frac{\varepsilon_F}{\left[\varepsilon - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c \right]^{\frac{1}{2}}} \quad (2.3.14)$$

したがって、電子系のエネルギー E は次の様に変形できる。

$$E = VA \sum_{n=0}^{n_{max}} \int_{(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_c}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \varepsilon \left[\varepsilon - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c \right]^{-1/2} \quad (2.3.15)$$

$$= N_e \varepsilon_F - N_e \varepsilon_F + VA \sum_{n=0}^{n_{max}} \int_{(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_c}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \varepsilon \left[\varepsilon - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c \right]^{-1/2} \quad (2.3.16)$$

$$= N_e \varepsilon_F - VA \sum_{n=0}^{n_{max}} \int_0^{\mu(B)} d\varepsilon \frac{\varepsilon_F}{\left[\varepsilon - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c \right]^{1/2}} \\ + VA \sum_{n=0}^{n_{max}} \int_{(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_c}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \varepsilon \left[\varepsilon - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c \right]^{-1/2} \quad (2.3.17)$$

$$= N_e \varepsilon_F - VA \sum_{n=0}^{n_{max}} \int_{(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_c}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \frac{\varepsilon_F}{\left[\varepsilon - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c \right]^{1/2}} \\ + VA \sum_{n=0}^{n_{max}} \int_{(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_c}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \varepsilon \left[\varepsilon - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c \right]^{-1/2} \quad (2.3.18)$$

$$= N_e \varepsilon_F + VA \sum_{n=0}^{n_{max}} \int_{(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_c}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{\left[\varepsilon - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c \right]^{1/2}} \quad (2.3.19)$$

簡単な計算により、

$$\int_{(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_c}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{\left[\varepsilon - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c \right]^{1/2}} = -\frac{4}{3} \left(\varepsilon_F - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c \right)^{\frac{3}{2}} \quad (2.3.20)$$

であるので、次のように計算できる。

$$E = N_e \varepsilon_F + VA \sum_{n=0}^{n_{max}} \int_{(n+\frac{1}{2})\hbar\omega_c}^{\varepsilon_F} d\varepsilon \frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{\left[\varepsilon - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c \right]^{1/2}} \quad (2.3.21)$$

$$= N_e \varepsilon_F + VA \sum_{n=0}^{n_{max}} \left(\frac{-4}{3} \left(\varepsilon_F - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c \right)^{\frac{3}{2}} \right) \quad (2.3.22)$$

$$= N_e \varepsilon_F - \frac{4}{3} VA \sum_{n=0}^{n_{max}} \left[\varepsilon_F - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c \right]^{3/2} \quad (2.3.23)$$

また、占有された準位が多数のときは、和 \sum を積分 \int に近似できる。次のオイラーマクローリンの公式を使う。

$$\sum_{n=0}^{n_n} f\left(n + \frac{1}{2}\right) = \int_0^{n_0+1} f(x) dx - \frac{1}{24} [f'(n_0+1) - f'(0)] \quad (2.3.24)$$

したがって、次のように変形できる.

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{n_{max}} \left[\varepsilon_F - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c \right]^{3/2} &= \int_0^{n_{max}+1} [\varepsilon_F - x\hbar\omega_c]^{3/2} dx \\ &\quad - \frac{1}{24} \left[-\frac{3}{2} [\varepsilon_F - (n_{max}+1)\hbar\omega_c]^{1/2} \hbar\omega_c + \frac{3}{2} \varepsilon_F^{1/2} \hbar\omega_c \right] \end{aligned} \quad (2.3.25)$$

$$= \int_0^{n_{max}+1} [\varepsilon_F - x\hbar\omega_c]^{3/2} dx - \frac{1}{24} \frac{3}{2} \varepsilon_F^{1/2} \hbar\omega_c \quad (2.3.26)$$

$(n_{max}+1)\hbar\omega_c = \varepsilon_F$ に注意して変形した. よって, 系のエネルギー E は,

$$E = N_e \varepsilon_F - \frac{4}{3} V A \sum_{n=0}^{n_{max}} \left[\varepsilon_F - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c \right]^{3/2} \quad (2.3.27)$$

$$= \left(1 - \frac{2}{5} \right) N_e \varepsilon_F + \frac{V}{24\pi^2} (eB)^2 \frac{k_F}{m_e} \quad (2.3.28)$$

ここで, $\omega_c = \frac{eB}{m_e}$, $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e}$ を使用した. 前項は, 0 磁場における自由電子ガスの基底状態のエネルギーであり, 二項はマクローリン展開の $f'(0)$ から出てくる項である. エネルギーの磁場の2階微分から磁化率が求まるので, 磁化率は第二項から計算される. したがって,

$$\chi = -\frac{\mu_0}{V} \frac{\partial^2 E}{\partial \beta^2} = -\frac{\mu_0 e^2 k_F}{12\pi^2 m_e} \quad (2.3.29)$$

ボーア磁子 $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ と $\rho(\varepsilon_F)$ で括り出すことにすると, 結果的に次のように変形できる,

$$\chi = -\frac{1}{3} \mu_0 \mu_B^2 \rho(\varepsilon_F) \quad (2.3.30)$$

これがランダウ反磁性磁化率の公式である. これに磁場 B を掛け, 無次元化し磁化の表式に書き下しておく. まず, E を ε と書き直しす.

$$\varepsilon = \left(1 - \frac{2}{5} \right) N_e \varepsilon_F + \frac{V}{24\pi^2} (eB)^2 \frac{k_F}{m_e} \quad (2.3.31)$$

さらに次を用いて無次元化する.

$$E = \beta\varepsilon, \quad E_F = \beta\varepsilon_F, \quad \eta = \beta\mu, \quad \Omega_c = \beta\hbar\omega_c,$$

すると,

$$E = \beta\varepsilon = \left(1 - \frac{2}{5} \right) N_e \beta\varepsilon_F + \frac{V}{24\pi^2} \beta (eB)^2 \frac{k_F}{m_e} \quad (2.3.32)$$

$$= \left(1 - \frac{2}{5} \right) N_e E_F + \frac{1}{16} \frac{N_e}{E_F} \Omega_c^2 \quad (2.3.33)$$

であるので,

$$M = -\frac{1}{V} \frac{\partial \varepsilon}{\partial B} = -\frac{1}{V} \frac{\partial \left(\frac{E}{B} \right)}{\partial \left(\frac{m}{\beta \hbar e} \Omega_c \right)} \quad (2.3.34)$$

$$= -\frac{1}{V} \frac{\hbar e}{m} \frac{\partial E}{\partial \Omega_c} \quad (2.3.35)$$

$$= -\frac{1}{V} \frac{\hbar e}{m} \frac{1}{8} \frac{N_e}{E_F} \Omega_c \quad (2.3.36)$$

である. よって, 結果的に次を得る.

$$M/M_0 = -\frac{\sqrt{2}}{12} \frac{1}{\pi^2} \sqrt{E_F} \Omega_c \quad (2.3.37)$$

$$\cong -\frac{\sqrt{2}}{12\pi^2} \sqrt{\eta} \Omega_c \quad (2.3.38)$$

ただし, $M_0 = \frac{e}{\hbar^2} \sqrt{\frac{m}{\beta^3}}$ と定めた.

2.4 磁場中粒子の半古典論

ビスマスにおいて線形磁気抵抗効果 [43] を発見した Kapitza の弟子である Shoenberg は様々な金属において dHvA 効果が観察されることを実験的に示した [49]. この章ではその彼の教科書 [86] を参考にして半古典論を用いた強磁場領域における磁化の理論について説明する. 最終的に Lifshitz-Kosevich の公式を導出する.

2.4.1 磁場中の電子の動き

磁場中の電子の運動方程式は,

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = \frac{-e}{c} (\mathbf{v} \times \mathbf{H}) \quad (2.4.1)$$

ここで, \mathbf{k} は電子の波動ベクトル, \mathbf{v} は電子の速度ベクトル, e はの電気素量である. \mathbf{v} は, 電子のエネルギー ϵ と次のような関係を持つ.

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon \quad (2.4.2)$$

ローレンツ力は \mathbf{v} に垂直であるため, 電子に仕事をしない. そのため ϵ は \mathbf{k} が時間とともに変化しても一定である. これは式 (2.4.2) から明らかである. \mathbf{v} が ϵ 一定の面に垂直であることを意味する. そのため, \mathbf{v} に垂直である $\dot{\mathbf{k}}$ は, ϵ 一定の面に接する必要がある. また, $\dot{\mathbf{k}}$ は \mathbf{H} に垂直であるため, \mathbf{k} の端点は, ϵ 一定の面と \mathbf{H} に垂直な面の交差部分をなす軌道を描く. (2.4.1) 式を時間で積分すると,

$$\hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0) = \frac{-e}{c} (\mathbf{R} - \mathbf{R}_0) \times \mathbf{H} \quad (2.4.3)$$

\mathbf{R}_0 と \mathbf{k}_0 は初期時間におけるベクトル量を表す. \mathbf{R} と \mathbf{R}_0 を \mathbf{H} に垂直な平面に射影したベクトルをそれぞれ \mathbf{R}' と \mathbf{R}'_0 とする. このとき, $\mathbf{R} - \mathbf{R}_0$ を \mathbf{R} 軌道, $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ を \mathbf{k} 軌道,

$\mathbf{R}' - \mathbf{R}'_0$ を \mathbf{R}' 軌道と呼ぶことにする．明らかに \mathbf{R}' 軌道は \mathbf{R} 軌道を H に垂直な平面に射影した軌道である． \mathbf{R}' 軌道は \mathbf{k} 軌道を 90 度回転して $\eta = \frac{c\hbar}{eH}$ でスケーリングしたものであることが次の様にして分かる．式 (2.4.3) より

$$|\hbar(\mathbf{k} - \mathbf{k}_0)| = \left| \frac{-e}{c}(\mathbf{R} - \mathbf{R}_0) \times \mathbf{H} \right| \quad (2.4.4)$$

$$\Leftrightarrow \hbar|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0| = \frac{e}{c}H|\mathbf{R} - \mathbf{R}_0| \sin \theta' \quad (2.4.5)$$

$$\Leftrightarrow \hbar|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0| = \frac{e}{c}H|\mathbf{R}' - \mathbf{R}'_0| \quad (2.4.6)$$

$$\Leftrightarrow |\mathbf{R}' - \mathbf{R}'_0| = \eta|\mathbf{k} - \mathbf{k}_0| \quad (2.4.7)$$

η は \mathbf{R}' 軌道と \mathbf{k} 軌道のスケーリング因子である．また，式 (2.4.3) より， \mathbf{R}' 軌道は \mathbf{k} 軌道を 90 度回転した軌道であるとわかる．

\mathbf{R} 軌道は \mathbf{R}' 軌道に比べ複雑である． \mathbf{R} 軌道は H に並行な速度成分を持っており，螺旋運動をする．この速度成分は \mathbf{R}' が軌道上を変化するに伴い変化するが， \mathbf{R}' が同じ値に戻る周期で周期的に変化する． \mathbf{R}' の軌道運動の角周波数がサイクロトロン周波数 ω_c である．次の計算では，サイクロトロン周波数 ω_c と \mathbf{R} の螺旋運動のピッチ P を計算する．以降では， \mathbf{k} 軌道に並行な微小変化を d で，垂直な方向での微小変化を Δ で表す．式 (2.4.1)，式 (2.4.2) より，

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} = \frac{-e}{c\hbar}(\nabla_{\mathbf{k}}\epsilon \times \mathbf{H}) \quad (2.4.8)$$

であり，この両辺のノルムを考えると，次のようになる．

$$\hbar \frac{dk}{dt} = \frac{e}{c\hbar}|\nabla_{\mathbf{k}}\epsilon \times \mathbf{H}| \quad (2.4.9)$$

したがって， dt について解くと $d\mathbf{k}$ を動く時間 dt は，

$$dt = \frac{c\hbar^2}{e} \frac{dk}{|\nabla_{\mathbf{k}}\epsilon \times \mathbf{H}|} \quad (2.4.10)$$

$$= \frac{c\hbar^2}{e} dk \frac{1}{H} \frac{\Delta k'_n}{\Delta\epsilon} \quad (2.4.11)$$

$$= \frac{c\hbar^2}{e} dk \frac{1}{H} \frac{1}{\Delta\epsilon} \frac{d(\Delta a)}{dk} \quad (2.4.12)$$

$$= \frac{c\hbar^2}{eH} \frac{\Delta(da)}{\Delta\epsilon} \quad (2.4.13)$$

$$= \frac{c\hbar^2}{eH} \left[\frac{\partial(da)}{\partial\epsilon} \right]_{\kappa} \quad (2.4.14)$$

となる． \mathbf{k} の H に垂直な平面成分を \mathbf{k}' ， H に並行な成分を κ とする ($k^2 = k'^2 + \kappa^2$)． \mathbf{k}' の \mathbf{k} 軌道に垂直な成分を k'_n とする．エネルギーが ϵ から $\epsilon + \Delta\epsilon$ に変化するときの k'_n の変化を $\Delta k'_n$ とする． $\nabla_{\mathbf{k}}\epsilon(\mathbf{k})$ は $\epsilon(\mathbf{k})$ 一定面に垂直なベクトルであるので， H に垂直な面へ射影すると， \mathbf{k} 軌道に垂直な方向でのエネルギー変化率になる． \mathbf{k} を同様に H に垂直な面へ射影した \mathbf{k}' の \mathbf{k} 軌道に垂直な方向成分の変化 $\Delta k'_n$ が $\Delta\epsilon$ の変化を起こすので，求める変化率 $|\nabla_{\mathbf{k}}\epsilon(\mathbf{k})| \sin \theta'$ は， $\frac{\Delta\epsilon}{\Delta k'_n}$ となる． \mathbf{k}' が 1 周期で掃く面積，つまり \mathbf{k}' 軌道の内部の面積を a

とする． \mathbf{k}' が dt で掃く扇形の面積 ($d\mathbf{k}$ だけ異なる \mathbf{k}' 軌道の 2 点と軌道内の任意の点からなる扇形の面積) da のエネルギーが ϵ から $\epsilon + \Delta\epsilon$ に変化するときの変化量は $\Delta(da)$ である．エネルギーが ϵ から $\epsilon + \Delta\epsilon$ に変化するときの \mathbf{k}' 軌道の内部の面積の増分を Δa とする．この内 \mathbf{k}' が dt で掃く部分は $d(\Delta a)$ と表せる． $\Delta(da) = d(\Delta a)$ が成り立つ．微小時間 dt では $dk\Delta k'_n$ と $d(\Delta a)$ が表す面積が一致する．(2.4.14) 式の両辺を軌道で積分すると，

$$\int_{orbit} dt = \int_{orbit} \frac{c\hbar^2}{eH} \left[\frac{\partial(da)}{\partial\epsilon} \right]_{\kappa} \quad (2.4.15)$$

$$\Leftrightarrow T = \frac{c\hbar^2}{eH} \left[\frac{\partial(\int_{orbit} da)}{\partial\epsilon} \right]_{\kappa} \quad (2.4.16)$$

$$\Leftrightarrow \frac{2\pi}{\omega_c} = \frac{c\hbar^2}{eH} \left[\frac{\partial a}{\partial\epsilon} \right]_{\kappa} \quad (2.4.17)$$

$$\Leftrightarrow \omega_c = \frac{2\pi eH}{c\hbar^2} \frac{1}{\left[\frac{\partial a}{\partial\epsilon} \right]_{\kappa}} \quad (2.4.18)$$

変形できる．ここで，サイクロトロン質量 m は次の様に定義される．

$$m = \frac{\hbar^2}{2\pi} \left(\frac{\partial a}{\partial\epsilon} \right)_{\kappa} \quad (2.4.19)$$

これを用いると，サイクロトロン振動数 ω_c は次のように表すことができる．

$$\omega_c = \frac{eH}{mc} \quad (2.4.20)$$

次に実空間の螺旋運動について考える． dt 間に \mathbf{H} 方向の電子の変位 dR_H は，

$$dR_H = v_H dt \quad (2.4.21)$$

$$= \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial\epsilon}{\partial\kappa} \right)_{\mathbf{k}'} dt \quad (2.4.22)$$

$$= \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial\epsilon}{\partial\kappa} \right)_{da} dt \quad (2.4.23)$$

よって，(2.4.14) 式より，

$$dR_H = v_H dt \quad (2.4.24)$$

$$= \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial\epsilon}{\partial\kappa} \right)_{da} \frac{c\hbar^2}{eH} \left[\frac{\partial(da)}{\partial\epsilon} \right]_{\kappa} \quad (2.4.25)$$

$$= \frac{c\hbar}{eH} \left(\frac{\partial\epsilon}{\partial\kappa} \right)_{da} \left[\frac{\partial(da)}{\partial\epsilon} \right]_{\kappa} \quad (2.4.26)$$

と dR_H を変形できる．またここで， $\epsilon(\kappa, a)$ と $a(\epsilon, \kappa)$ の全微分は，

$$d\epsilon = \left(\frac{\partial\epsilon}{\partial\kappa} \right)_a d\kappa + \left(\frac{\partial\epsilon}{\partial a} \right)_{\kappa} da \quad (2.4.27)$$

$$da = \left(\frac{\partial a}{\partial\epsilon} \right)_{\kappa} d\epsilon + \left(\frac{\partial a}{\partial\kappa} \right)_{\epsilon} d\kappa \quad (2.4.28)$$

であるので，

$$\left(\frac{\partial a}{\partial\kappa} \right)_{\epsilon} d\kappa = da - \left(\frac{\partial a}{\partial\epsilon} \right)_{\kappa} \left(\left(\frac{\partial\epsilon}{\partial\kappa} \right)_a d\kappa + \left(\frac{\partial\epsilon}{\partial a} \right)_{\kappa} da \right) \quad (2.4.29)$$

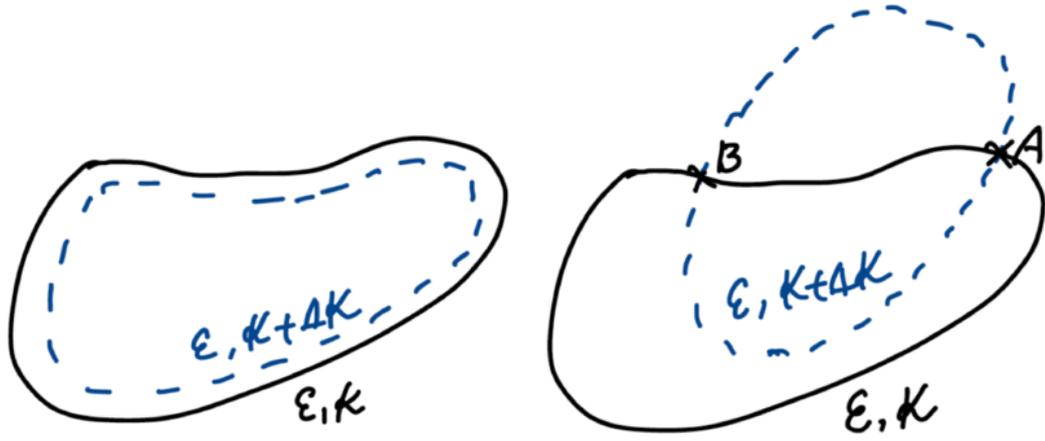
(a) 2つの \mathbf{k}' 軌道が重ならないとき(b) 2つの \mathbf{k}' 軌道が2つの交点を持つとき

図 2.4.1: \mathbf{k}' 軌道の重なりからみる R_H の変化. κ の値が異なる 2 つの \mathbf{k}' 軌道が交点を持つ場合と持たない場合で R_H の変化の仕方が異なる. 交点を持たない場合は R_H は単調増加する. 交点を持つ場合はその交点の数は必ず偶数であり, R_H は単調増加せずに振動する.

という関係式が得られる. $da = 0$ とすることで次の関係式を得る.

$$\left(\frac{\partial a}{\partial \kappa}\right)_\epsilon = -\left(\frac{\partial a}{\partial \epsilon}\right)_\kappa \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial \kappa}\right)_a \quad (2.4.30)$$

したがって, これを用いて (2.4.14) 式をさらに変形でき, 次の様になる.

$$dR_H = -\frac{c\hbar}{eH} \left(\frac{\partial(da)}{\partial \kappa}\right)_\epsilon \quad (2.4.31)$$

さらに, 両辺を軌道で積分すると, \mathbf{k}' が 1 周する間に \mathbf{H} に沿って実空間で進む R_H の正味の距離であるピッチ P は次の様にして求めることができる.

$$\int_{orbit} dR_H = -\frac{c\hbar}{eH} \int_{orbit} \left(\frac{\partial(da)}{\partial \kappa}\right)_\epsilon \quad (2.4.32)$$

$$\Leftrightarrow P = -\frac{c\hbar}{eH} \left(\frac{\partial a}{\partial \kappa}\right)_\epsilon \quad (2.4.33)$$

一方で, \mathbf{k}' 軌道の部分的なサイクルで積分して ΔR_H を得ることもできる. ϵ 一定の面の κ での切断面と $\kappa + d\kappa$ での切断面を共有の \mathbf{H} に垂直な平面に射影して, 2 つの \mathbf{k}' 軌道が重ならないとき, dR_H は軌道上で同じ符号をもち, 図 2.1(a) の場合は R_H は単調に増加する. しかし, 一般には ϵ 一定の面の \mathbf{H} に垂直な切断面の高さを κ から $\kappa + d\kappa$ で変化させると, その切断面を同じ平面に射影した軌道は偶数個の交点を持つ (図 2.1(b)). この場合は $R_H(t)$ の振動はその偶数個の交点の数だけ増減をする. dHvA 効果では特に $\left(\frac{\partial a}{\partial \kappa}\right)_\epsilon = 0$ となる k 空間の極値軌道つまり, ピッチ P が 0 になる軌道が重要である. ピッチ P が 0 であっても R_H は振動する.

ここまでのまとめを記すと次の様になる. \mathbf{H} に垂直な面での k 空間上の軌道 \mathbf{k}' または, \mathbf{k} 軌道と実空間上の \mathbf{R} 軌道は, 互いに η のスケールと 90 度の回転で結びつく. k 空間

では、 $d\mathbf{k}$ は \mathbf{H} に垂直であるため、 \mathbf{k} は ϵ 一定の面と \mathbf{H} に垂直な面による交線を運動して、 \mathbf{H} に並行な方向には運動しない。つまり、 κ は変化しない。それに対して、実空間上の運動は、 \mathbf{H} に垂直な面では \mathbf{k}' 軌道を 90 度回転と η だけスケールした軌道運動になり、 \mathbf{H} に並行な方向にも運動する。これは、 \mathbf{k} 軌道の内部の面積 a の \mathbf{k} の \mathbf{H} 方向成分 κ を変えるときの変化量で決まる。 \mathbf{k} 軌道が ϵ 一定面の \mathbf{H} に垂直な面で切った極値軌道のときはピッチ P は 0 になる。この際、 κ から $\kappa + \Delta\kappa$ と \mathbf{k} 軌道の高さを変えると、内部面積 a が増減する (\mathbf{k} 軌道 (κ) と \mathbf{k} 軌道 ($\kappa + \Delta\kappa$) の交点があり、各交点から交点までの軌道内面積が正味ゼロで増減する) ときは、ピッチ P は 0 であっても $R_H(t)$ は振動する。

自由電子を例にとって磁場中の動きを計算してみる。 m_0 を自由電子の質量とすると、自由電子のエネルギーは

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (2.4.34)$$

となる。

$$k^2 = k'^2 + \kappa^2 \quad (2.4.35)$$

κ 一定の平面と ϵ 一定面の交線は、半径 k' の円である。よって、 \mathbf{k}' 軌道内の面積 a は、

$$a = \pi k'^2 \quad (2.4.36)$$

実空間での \mathbf{R}' の軌跡もこの場合は円となる。 \mathbf{R}' 軌道の半径 R' は、スケール因子 η を使用して次の様に計算できる。

$$R' = \eta k' \quad (2.4.37)$$

$$= \frac{c\hbar}{eH} k' \quad (2.4.38)$$

$$= \frac{cm_0 v'}{eH} \quad (2.4.39)$$

自由電子の場合、 \mathbf{H} に垂直な速度成分 v' は、 $v' = \frac{\hbar k'}{m_0}$ (式 (2.4.32) と式 (2.4.2) から明らか) であることを使った。この結果は、ローレンツ力を向心力とした運動方程式からでも直ちに求めることができる。

次に自由電子の \mathbf{R} 軌道についてである。自由電子の場合のサイクロトロン振動数 ω_c とピッチ P を求める。(2.4.34) 式, (2.4.35) 式, (2.4.36) 式より、

$$\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \quad (2.4.40)$$

$$= \frac{\hbar^2 (k'^2 + \kappa^2)}{2m_0} \quad (2.4.41)$$

$$= \frac{\hbar^2 (\frac{a}{\pi} + \kappa^2)}{2m_0} \quad (2.4.42)$$

a について解いて、

$$a = \pi \left(\frac{2m_0}{\hbar^2} \epsilon - k^2 \right) \quad (2.4.43)$$

となる。よって、サイクロトロン振動数 ω_c は次の様になる。

$$\omega_c = \frac{2\pi eH}{c\hbar^2} \frac{1}{\left(\frac{\partial a}{\partial \epsilon}\right)_\kappa} \quad (2.4.44)$$

$$= \frac{2\pi eH}{c\hbar^2} \frac{\hbar^2}{2\pi m_0} \quad (2.4.45)$$

$$= \frac{eH}{m_0 c} \quad (2.4.46)$$

また、この結果は、自由電子の場合は軌道は円になり、 $v' = R'\omega_c$ となることから明らかである。式 (2.4.20) と式 (2.4.44) から自由電子のサイクロトロン質量は m_0 と分かる。これは次のようにサイクロトロン質量の定義と式 (2.4.43) からもすぐ理解できる。

$$m = \frac{\hbar^2}{2\pi} \left(\frac{\partial a}{\partial \epsilon}\right)_\kappa \quad (2.4.47)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2\pi} \frac{2\pi m_0}{\hbar^2} \quad (2.4.48)$$

$$= m_0 \quad (2.4.49)$$

自由電子の場合の実空間における運動 (\mathbf{R} 軌道) は通常の螺旋運動になる。式 (2.4.43) から $\frac{\partial a}{\partial \kappa} = -2\pi\kappa$ であるので、ピッチ P は、式 (2.4.32) より、

$$P = -\frac{c\hbar}{eH}(-2\pi\kappa) \quad (2.4.50)$$

$$= 2\pi\hbar\kappa \frac{R'}{m_0 v'} \quad (2.4.51)$$

$$= 2\pi\hbar\kappa \frac{R'}{m_0 R'\omega_c} \quad (2.4.52)$$

$$= v_H \frac{2\pi}{\omega_c} \quad (2.4.53)$$

と計算できる。ただし式変形の途中では、式 (2.4.37), $v' = R'\omega_c$, $v_H = \frac{\hbar\kappa}{m_0}$ (式 (2.4.32) と式 (2.4.2) から明らか) を使用した。

2.4.2 電子運動の量子化

電子の運動の量子化を考える。これにより、許容される状態が制限される。磁場中の状態の量子化が dHvA 振動が発生する原因の一つとなる。周期的な運動に対する Bohr-Sommerfeld 量子化条件は次のように表される。

$$\oint \mathbf{p} d\mathbf{q} = (r + \gamma)2\pi\hbar \quad (2.4.54)$$

ここで、 \mathbf{p} と \mathbf{q} は正準共役な運動量と位置の変数であり、 r は整数で、積分経路は完全なサイクルとする。位相 γ については後述する。磁場中の電子の場合、 \mathbf{p} と \mathbf{q} はの適切な表現は次のようになる。

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} - \frac{e}{c}\mathbf{A} \quad (2.4.55)$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{R}' \quad (2.4.56)$$

ここで、 \mathbf{A} は \mathbf{H} のベクトルポテンシャルであり、 $-e$ は電子の電荷を表す。よって、式 (2.4.54) より、磁場中の周期的な運動に対する Bohr-Sommerfeld 量子化条件は次のように表される。

$$\oint (\hbar \mathbf{k} - \frac{e}{c} \mathbf{A}) d\mathbf{R}' = (r + \gamma) 2\pi \hbar \quad (2.4.57)$$

これをさらに変形すると、

$$\oint (\hbar \mathbf{k} - \frac{e}{c} \mathbf{A}) d\mathbf{R}' = (r + \gamma) 2\pi \hbar \quad (2.4.58)$$

$$\Leftrightarrow \oint (\frac{-e}{c} \mathbf{R} \times \mathbf{H}) d\mathbf{R}' - \frac{e}{c} \int_S (\nabla \times \mathbf{A}) d\mathbf{S} = (r + \gamma) 2\pi \hbar \quad (2.4.59)$$

$$\Leftrightarrow \oint (-\mathbf{R} \times \mathbf{H}) d\mathbf{R}' - \int_S \mathbf{H} d\mathbf{S} = (r + \gamma) 2\pi \hbar \frac{c}{e} \quad (2.4.60)$$

$$\Leftrightarrow \mathbf{H} \cdot \oint (\mathbf{R} \times d\mathbf{R}') - \int_S \mathbf{H} d\mathbf{S} = (r + \gamma) 2\pi \hbar \frac{c}{e} \quad (2.4.61)$$

となる。ここで、式 (2.4.3) とストークスの定理と次の変形変形を使用した。 S は実空間における軌道の面積積分を示し、 $d\mathbf{S}$ は \mathbf{R}' 軌道を周辺とする任意の面の面積ベクトル要素である。

$$d\mathbf{R}' \cdot (\mathbf{R} \times \mathbf{H}) = \mathbf{H} \cdot (d\mathbf{R}' \times \mathbf{R}) \quad (2.4.62)$$

$$= -\mathbf{H} \cdot (\mathbf{R} \times d\mathbf{R}') \quad (2.4.63)$$

式 (2.4.61) の左辺第一項を A、左辺第二項を B とすると、それぞれ次の様に変形できる。

$$A = \mathbf{H} \cdot \oint ((\mathbf{R}_H + \mathbf{R}') \times d\mathbf{R}') \quad (2.4.64)$$

$$= \oint (\mathbf{H} \cdot (\mathbf{R}_H \times d\mathbf{R}')) + \mathbf{H} \cdot \oint \mathbf{R}' \times d\mathbf{R}' \quad (2.4.65)$$

$$= \oint \mathbf{H} \cdot (\mathbf{R}' \times d\mathbf{R}') \quad (2.4.66)$$

$$= \oint H |\mathbf{R}' \times d\mathbf{R}'| \quad (2.4.67)$$

$$= 2H\alpha \quad (2.4.68)$$

$$B = - \int_S \mathbf{H} d\mathbf{S} \quad (2.4.69)$$

$$= - \int_S \mathbf{H} \cdot \mathbf{n} dS \quad (2.4.70)$$

$$= -H\alpha \quad (2.4.71)$$

ここで、A の式変形については、 \mathbf{H} と $\mathbf{R}' \times d\mathbf{R}'$ は並行であることと、 $\frac{1}{2} |\mathbf{R}' \times d\mathbf{R}'|$ は、時間 dt で \mathbf{R}' が掃く扇形の面積であることに注意した。B の式変形については、 \mathbf{R}' 軌道を周辺とする面として、 \mathbf{R}' 軌道を含む \mathbf{H} に垂直な平面上の \mathbf{R}' 軌道内の面を選択した。 \mathbf{n} はその平面内の法線ベクトルであり、当然 \mathbf{H} に並行である。式 (2.4.61), A, B より、

$$H\alpha = (r + \gamma) 2\pi \hbar \frac{c}{e} \equiv \Phi \quad (2.4.72)$$

この式は、 \mathbf{R}' 軌道の量子化を表している。 \mathbf{H} が一定のとき、量子数 $r + \gamma$ による α になるように \mathbf{R}' 軌道が決まる。 \mathbf{k} 軌道の量子化については、次の様にスケール因子 η を使用して、式 (2.4.72) から次の様に求める。

実空間における \mathbf{R}' 軌道の面積 α と \mathbf{k} 空間における \mathbf{k}' 軌道の面積 a の関係は、(2.4.7) 式から

$$\alpha = \eta^2 a \quad (2.4.73)$$

よって、

$$a = \frac{1}{\eta^2} (r + \gamma) 2\pi \hbar \frac{c}{eH} \quad (2.4.74)$$

$$= \frac{2\pi}{\eta} (r + \gamma) \quad (2.4.75)$$

これは Onsager の関係と呼ばれる [87]。ここで、 a は κ に依存するので $(r + \gamma)$ は κ に依存することに注意する。 a と α を η で表現すると、

$$a = \frac{2\pi}{\eta} (r + \gamma) \quad (2.4.76)$$

$$\alpha = 2\pi\eta(r + \gamma) \quad (2.4.77)$$

である。

放物線バンド (特に自由電子) の場合、位相定数 γ は正確に $\frac{1}{2}$ である。しかし、一般的に、 γ はエネルギーや \mathbf{H} に依存して $\frac{1}{2}$ からわずかにずれる [37]。これらのわずかなずれは、dHvA 振動にとっては重要ではないが、定常反磁性磁化率の計算には非常に関連している。議論を複雑にすることを避けるため、以降は $\gamma = \frac{1}{2}$ とする。

与えられた r と H に対して、式 (2.4.75) によって a の値が指定され、与えられた κ に対してエネルギー ϵ とこの特定の一定エネルギーの表面の κ での平面断面である曲線が指定される。ここである \mathbf{H} に対して κ を変化させると、平面曲線は量子数 r と Onsager の関係式 (2.4.75)[87] によって指定された一定の面積 $a(r)$ を持つチューブ族 (Landau チューブ) を生成する。Onsager の関係式の意味は、 \mathbf{k} 空間で許容される状態は Landau チューブ上にあるように制限するということである。

自由電子において Landau チューブの方程式を求めてみる。式 (2.4.40) に Onsager の関係を適用すると、次式が得られる。

$$\epsilon = \left(r + \frac{1}{2} \right) \beta_0 H + \frac{\hbar^2 \kappa^2}{2m_0} \quad (2.4.78)$$

ここで、 β_0 はボーア磁子の2倍であり、次の様に表せられる。

$$\beta_0 = \frac{e\hbar}{m_0 c} \quad (2.4.79)$$

である。式 (2.4.40) を代入することにより、式 (2.4.78) から Landau チューブの方程式を次のように得る。

$$\frac{\hbar^2}{2m_0} (k_x^2 + k_y^2) = \left(r + \frac{1}{2} \right) \beta_0 H \quad (2.4.80)$$

ここで、 k_x , k_y は \mathbf{H} に垂直な平面内の座標として導入された。

2.4.3 熱力学ポテンシャルと磁化

熱力学ポテンシャル Ω と自由エネルギー F は以下のように定義される.

$$\Omega = F - \mu N \quad (2.4.81)$$

$$F = E - TS \quad (2.4.82)$$

ここで, E は内部エネルギー, S は エントロピーを表す. 磁気モーメントベクトルは次の式で与えられる.

$$\mathbf{M} = -(\nabla_{\mathbf{H}} \cdot \Omega)_{\zeta} \quad (2.4.83)$$

\mathbf{M} の \mathbf{H} に平行な成分と垂直な成分は次のようになる.

$$M_{\parallel} = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial H}\right)_{\zeta} \quad (2.4.84)$$

$$M_{\perp} = -\frac{1}{H} \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \theta}\right)_{\zeta, H} \quad (2.4.85)$$

θ は, \mathbf{H} の方向に関して Ω が最も急速に変化する平面内における \mathbf{H} の方向を指定する角度である. フェルミ分布統計に従うエネルギー状態 ϵ を持つ系の Ω は,

$$\Omega = -kT \sum \ln(1 + e^{(\zeta - \epsilon)/kT}) \quad (2.4.86)$$

と表される [88]. よって,

$$\Omega = -kT \sum \ln(1 + e^{(\zeta - \epsilon)/kT}) \quad (2.4.87)$$

$$= -kT \sum_{r, \sigma, \kappa} \ln(1 + e^{(\zeta - \epsilon)/kT}) \frac{eH}{2\pi\hbar} L_x L_y \quad (2.4.88)$$

$$= -kT \sum_{r, \sigma} \frac{L_z}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \ln(1 + e^{(\zeta - \epsilon)/kT}) \frac{eH}{2\pi\hbar} L_x L_y \quad (2.4.89)$$

$$= -kT \sum_{r, \sigma} \frac{eHV}{(2\pi)^2 \hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \ln(1 + e^{(\zeta - \epsilon)/kT}) \quad (2.4.90)$$

$$= -kT \sum_r \frac{eHV}{2\pi^2 c\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \ln(1 + e^{(\zeta - \epsilon)/kT}) \quad (2.4.91)$$

$$(2.4.92)$$

これを最初に $T=0$ の場合において, κ と $\kappa + \delta\kappa$ の間のランダウ管からの Ω の寄与のみについての計算を行う. 次に, κ にわたる積分を実行し, 最終的に, 適切な畳み込みによって, 有限温度, 電子スピン, 電子散乱, 試料の非均質性の影響を考慮する.

2.4.4 2次元系, $T=0$ における熱力学ポテンシャル

ここからは, $T = 0$, $[\kappa, \kappa + \delta\kappa]$ の Slab(2次元系) を考える. この時の熱力学的ポテンシャルの寄与を $\delta\Omega$ とする. $T = 0$ のとき熱力学ポテンシャル Ω は,

$$\Omega = E - N\zeta \quad (2.4.93)$$

$$= -kT \sum_r \frac{eHV}{2\pi^2 c\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \ln(1 + e^{(\zeta - \epsilon)/kT}) \quad (2.4.94)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa - kT \sum_r \frac{eHV}{2\pi^2 c\hbar} \ln(1 + e^{(\zeta - \epsilon)/kT}) \quad (2.4.95)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} d\kappa \delta\Omega \quad (2.4.96)$$

ここで, $[\kappa, \kappa + \delta\kappa]$ の slab(2次元系) の熱力学ポテンシャルを次の様に $\delta\Omega$ と定義する.

$$\delta\Omega = \lim_{T \rightarrow 0} (-kT) \sum_r \frac{eHV}{2\pi^2 c\hbar} \ln(1 + e^{(\zeta - \epsilon)/kT}) \delta\kappa \quad (2.4.97)$$

$$= \lim_{T \rightarrow 0} (-kT) \sum_r \frac{eHV}{2\pi^2 c\hbar} \delta\kappa \lim_{T \rightarrow 0} \ln(1 + e^{(\zeta - \epsilon)/kT}) \quad (2.4.98)$$

$$= \lim_{T \rightarrow 0} (-kT) \sum_r \frac{eHV}{2\pi^2 c\hbar} \delta\kappa \lim_{T \rightarrow 0} \begin{cases} \ln(e^{(\zeta - \epsilon)/kT}) & (\zeta > \epsilon) \\ \ln(1) & (\zeta < \epsilon) \end{cases} \quad (2.4.99)$$

$$= \lim_{T \rightarrow 0} (-kT) \sum_r \frac{eHV}{2\pi^2 c\hbar} \delta\kappa \lim_{T \rightarrow 0} \begin{cases} (\zeta - \epsilon)/kT & (\zeta > \epsilon) \\ 0 & (\zeta < \epsilon) \end{cases} \quad (2.4.100)$$

$$= \begin{cases} \frac{eHV}{2\pi^2 c\hbar} \delta\kappa \sum_r (\epsilon - \zeta) & (\zeta > \epsilon) \\ 0 & (\zeta < \epsilon) \end{cases} \quad (2.4.101)$$

$$= \frac{eHV}{2\pi^2 c\hbar} \delta\kappa \sum_r^n (\epsilon - \zeta) \quad (2.4.102)$$

$$= D \sum_r^n (\epsilon - \zeta) \quad (2.4.103)$$

ここで, n は $\zeta > \epsilon$ を満たす r の最大値である. また, $D = \frac{eHV}{2\pi^2 c\hbar} \delta\kappa$ であることに注意する. この計算はポアソンの公式かオイラーマクローリンの公式のいずれかで計算できるが, 後者の方がどの項がどこからくるのか分かるので後者で展開する. オイラーマクローリンの公式は次である.

$$\sum_{r=0}^n f(r) = \int_0^n f(r) dr + \frac{1}{2}[f(n) + f(0)] + \frac{1}{12}[f'(n) - f'(0)] \quad (2.4.104)$$

より良い近似式では $\frac{d^3 f}{dr^3}$ の項が含まれるが, 今はこの項は今残している一番小さい項よりも n^2 倍小さいオーダーであるので省略しても良い.

$$\delta\Omega = D \left(\int_0^n (\epsilon_r - \zeta) dr + \frac{1}{2}[\epsilon(n) - \zeta + \epsilon(0) - \zeta] + \frac{1}{12}[\epsilon'(n) - \epsilon'(0)] \right) \quad (2.4.105)$$

ここで、離散変数 $r + \frac{1}{2}$ の代わりに、連続変数 x を導入する。つまり、オンサーガーの関係 [87] である、

$$a(\epsilon_r, \kappa) = \left(r + \frac{1}{2}\right) \frac{2\pi eH}{c\hbar} \quad (2.4.106)$$

に対して、

$$a(\epsilon, \kappa) = x \frac{2\pi eH}{c\hbar} \quad (2.4.107)$$

を満たす x を定義した。また、 $\epsilon = \zeta$ となる時の x を X とする。このとき、 X は次の関係を満たす。

$$a(\zeta, \kappa) = X \frac{2\pi eH}{c\hbar} \equiv \mathcal{A}(\kappa) \quad (2.4.108)$$

ここで、 $r + \frac{1}{2} < X$ を満たす。これは次の様にして分かる。 $a(\epsilon, \kappa)$ は ϵ について単調であることに注意する。 $\epsilon_r < \zeta$ の両辺に $a(\cdot, \kappa)$ を施すと、

$$a(\epsilon_r, \kappa) < a(\zeta, \kappa) \quad (2.4.109)$$

$$\Leftrightarrow \left(r + \frac{1}{2}\right) \frac{2\pi eH}{c\hbar} < X \frac{2\pi eH}{c\hbar} \quad (2.4.110)$$

$$\Leftrightarrow \left(r + \frac{1}{2}\right) < X \quad (2.4.111)$$

と分かる。また、次の関係式が成り立つ。

$$\left(\frac{\partial \epsilon}{\partial x}\right)_\kappa = \left(\frac{\partial a}{\partial x}\right)_\kappa \frac{1}{\left(\frac{\partial a}{\partial \epsilon}\right)_\kappa} \quad (2.4.112)$$

$$= \beta H \quad (2.4.113)$$

m と β は x の関数であることに注意する。 m は式 (2.4.47) で、 β は式 (2.4.79) で定義される β_0 の m_0 を m で置き換えたものである。式 (2.4.105) の r を x と変数変換すると次の様に変形できる。

$$\delta\Omega = D \left(\int_{\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} \left(\epsilon(x - \frac{1}{2}) - \zeta \right) dx + \frac{1}{2} [\epsilon(n) - \zeta + \epsilon(0) - \zeta] + \frac{1}{12} [\epsilon'(n) - \epsilon'(0)] \right) \quad (2.4.114)$$

$$= D \left(\int_{\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} (\epsilon(x) - \zeta) dx + \frac{1}{2} [\epsilon(n + \frac{1}{2}) - \zeta + \epsilon(\frac{1}{2}) - \zeta] + \frac{1}{12} [\epsilon'(n + \frac{1}{2}) - \epsilon'(\frac{1}{2})] \right) \quad (2.4.115)$$

$$= D \left(\int_{\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} (\epsilon(x) - \zeta) dx + \frac{1}{2} [\epsilon(n + \frac{1}{2}) - \zeta + \epsilon(\frac{1}{2}) - \zeta] + \frac{1}{12} [\beta(n + \frac{1}{2}) - \beta(\frac{1}{2})] H \right) \quad (2.4.116)$$

式 (2.4.116) を積分範囲 $\int_{\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}}$ を \int_0^X に拡張して補正する変形をする。結果的に次の様に変形される。

$$\delta\Omega = \delta\kappa \left(\frac{eHV}{2\pi^2 c\hbar} \right) \left[\int_0^X (\epsilon(x) - \zeta) dx + \frac{1}{24} \beta(0)H + \frac{1}{2} \beta(X)H \left(\delta^2 - \delta + \frac{1}{6} \right) \right] \quad (2.4.117)$$

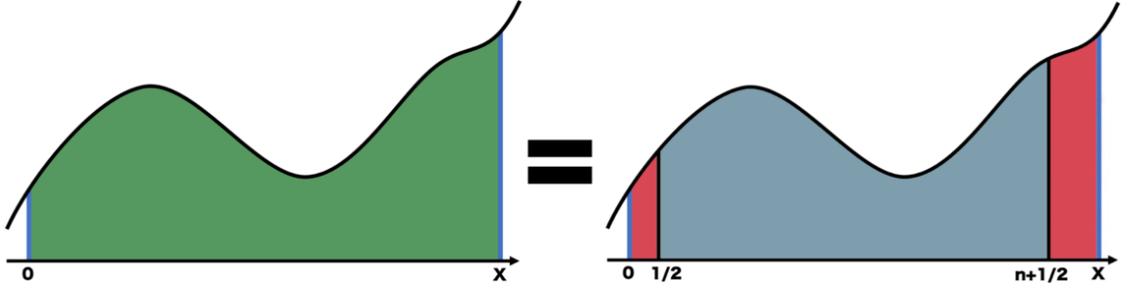


図 2.4.2: (2.4.117) 式の導出における積分領域の拡張のイメージ. 拡張した領域を緑色, 補正項を赤色, 式 (2.4.116) の元の積分領域を青色で示した.

ここで, β は $\beta(X)$ を表し, δ は次で定義される.

$$\delta = X - \left(n + \frac{1}{2}\right) \quad (2.4.118)$$

以下, これに至る過程を記述する. (図 2.4.2) の様に式 (2.4.116) を表す (青色) を積分範囲を広げることで (緑色) にする. その補正項が (赤色) である. つまり

$$\text{式 (2.4.116)(青色)} = \text{拡張した領域 (緑色)} - \text{補正項 (赤色)} \quad (2.4.119)$$

である. まず, 拡張した領域 (緑色) について計算する.

$$\text{緑色領域} = \sum_0^X (\epsilon(x) - \zeta) \quad (2.4.120)$$

$$= \int_0^X (\epsilon(x) - \zeta) dx + \frac{1}{2} [\epsilon(X) - \zeta + \epsilon(0) - \zeta] + \frac{1}{12} [\epsilon'(X) - \epsilon'(0)] \quad (2.4.121)$$

$$= \int_0^X (\epsilon(x) - \zeta) dx + \frac{1}{2} (\epsilon(0) - \zeta) + \frac{1}{2} (\epsilon(X) - \zeta) + \frac{1}{12} [\beta(X) - \beta(0)] H \quad (2.4.122)$$

よって, 補正項 (赤色) は次で求められる.

$$\text{赤色} = \text{緑色領域} - \text{青色領域} \quad (2.4.123)$$

$$\begin{aligned} &= \int_0^X (\epsilon(x) - \zeta) dx + \frac{1}{2} (\epsilon(0) - \zeta) + \frac{1}{2} (\epsilon(X) - \zeta) + \frac{1}{12} [\beta(X) - \beta(0)] H \\ &\quad - \left(\int_{\frac{1}{2}}^{n+\frac{1}{2}} (\epsilon(x) - \zeta) dx + \frac{1}{2} \left[\epsilon\left(n + \frac{1}{2}\right) - \zeta + \epsilon\left(\frac{1}{2}\right) - \zeta \right] + \frac{1}{12} \left[\beta\left(n + \frac{1}{2}\right) - \beta\left(\frac{1}{2}\right) \right] H \right) \end{aligned} \quad (2.4.124)$$

$$\begin{aligned} &= \int_0^{\frac{1}{2}} (\epsilon(x) - \zeta) dx + \int_{n+\frac{1}{2}}^X (\epsilon(x) - \zeta) dx \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(\epsilon(0) - \epsilon\left(\frac{1}{2}\right) \right) + \frac{1}{2} \left(\epsilon(X) - \epsilon\left(n + \frac{1}{2}\right) \right) \\ &\quad + \frac{1}{12} \left[\beta\left(\frac{1}{2}\right) - \beta(0) \right] H + \frac{1}{12} \left[\beta(X) - \beta\left(n + \frac{1}{2}\right) \right] H \end{aligned} \quad (2.4.125)$$

$[0, \frac{1}{2}]$ では $\epsilon(x)$ は線形と見做せるので次のような変形ができる。

$$\text{第一項} = \int_0^{\frac{1}{2}} (\epsilon(x) - \zeta) dx \quad (2.4.126)$$

$$= - \int_0^{\frac{1}{2}} (\zeta - \epsilon(x)) dx \quad (2.4.127)$$

$$= -\frac{1}{2} \frac{1}{2} [(\zeta - \epsilon(0)) + (\zeta - \epsilon(\frac{1}{2}))] \quad (2.4.128)$$

$$= -\frac{1}{4} (2\zeta - \epsilon(0) - \epsilon(\frac{1}{2})) \quad (2.4.129)$$

$$= -\frac{1}{2} (\zeta - \epsilon(0) - \frac{1}{4} \beta(0) H) \quad (2.4.130)$$

ここで、次の変形を使用した。

$$\epsilon(\frac{1}{2}) = \epsilon(0 + \frac{1}{2}) \quad (2.4.131)$$

$$\simeq \epsilon(0) + \epsilon'(x)|_{x=0} \frac{1}{2} \quad (2.4.132)$$

$$= \epsilon(0) + \beta(0) H \frac{1}{2} \quad (2.4.133)$$

同様にして、第二項から第六項を計算する。

$$\text{第二項} = \int_{n+\frac{1}{2}}^X (\epsilon(x) - \zeta) dx \quad (2.4.134)$$

$$= -\frac{1}{2} \delta \beta(X) H \delta \quad (2.4.135)$$

$$\text{第三項} = \frac{1}{2} \left(\epsilon(0) - \epsilon(\frac{1}{2}) \right) \quad (2.4.136)$$

$$= \frac{1}{2} \left(\epsilon(0) - \epsilon(0) - \beta(0) H \frac{1}{2} \right) \quad (2.4.137)$$

$$= -\frac{1}{4} \beta(0) H \quad (2.4.138)$$

$$\text{第四項} = \frac{1}{2} \left(\epsilon(X) - \epsilon(n + \frac{1}{2}) \right) \quad (2.4.139)$$

$$= \frac{1}{2} (\epsilon(X) - \epsilon(X) + \beta(X) H \delta) \quad (2.4.140)$$

$$= \frac{1}{2} \beta(X) H \delta \quad (2.4.141)$$

$$\text{第五項} = \frac{1}{12} \left[\beta(\frac{1}{2}) - \beta(0) \right] H \quad (2.4.142)$$

$$= \frac{1}{12} H \left[\beta(0) + \frac{1}{2} \frac{\partial \beta(x)}{\partial x} \Big|_{x=0} - \beta(0) \right] \quad (2.4.143)$$

$$= \frac{1}{12} \frac{1}{2} H \frac{\partial \beta(x)}{\partial x} \Big|_{x=0} \quad (2.4.144)$$

$$\simeq 0 \quad (2.4.145)$$

$$\text{第六項} = \frac{1}{12} \left[\beta(X) - \beta\left(n + \frac{1}{2}\right) \right] H \quad (2.4.146)$$

$$= \frac{1}{12} \delta H \left. \frac{\partial \beta(x)}{\partial x} \right|_{x=X} \quad (2.4.147)$$

$$\simeq 0 \quad (2.4.148)$$

ここで、第五項と第六項、 $H \frac{\partial \beta(x)}{\partial x}$ は βH に比べて無視できることに注意する。結局、補正項 (赤色) は次の形にまとめることができる。

$$\text{補正項 (赤色)} = -\frac{1}{2} \left(\zeta - \epsilon(0) - \frac{1}{4} \beta(0) H \right) - \frac{1}{2} \delta \beta(X) H \delta - \frac{1}{4} \beta(0) H + \frac{1}{2} \beta(X) H \delta \quad (2.4.149)$$

したがって、

$$\text{青色領域} = \text{緑色領域} - \text{赤色領域} \quad (2.4.150)$$

$$\begin{aligned} &= \int_0^X (\epsilon(x) - \zeta) dx + \frac{1}{2} (\epsilon(0) - \zeta) + \frac{1}{2} (\epsilon(X) - \zeta) + \frac{1}{12} [\beta(X) - \beta(0)] H \\ &\quad - \left(-\frac{1}{2} \left(\zeta - \epsilon(0) - \frac{1}{4} \beta(0) H \right) - \frac{1}{2} \delta \beta(X) H \delta - \frac{1}{4} \beta(0) H + \frac{1}{2} \beta(X) H \delta \right) \end{aligned} \quad (2.4.151)$$

よって、

$$\begin{aligned} \frac{\delta \Omega}{D} &= \int_0^X (\epsilon(x) - \zeta) dx + \frac{1}{2} (\epsilon(0) - \zeta) + \frac{1}{12} [\beta(X) - \beta(0)] H \\ &\quad + \frac{1}{2} \left(\zeta - \epsilon(0) - \frac{1}{4} \beta(0) H \right) + \frac{1}{2} \delta \beta(X) H \delta \\ &\quad + \frac{1}{4} \beta(0) H - \frac{1}{2} \beta(X) H \delta \end{aligned} \quad (2.4.152)$$

$$= \int_0^X (\epsilon(x) - \zeta) dx + \frac{1}{24} \beta(0) H + \frac{1}{2} \beta(X) H \left(\delta^2 - \delta + \frac{1}{6} \right) \quad (2.4.153)$$

となる。さらに書き換えると次の (2.4.117) 式が求まる。

$$\delta \Omega = \delta \kappa \left(\frac{eHV}{2\pi^2 c \hbar} \right) \left[\int_0^X (\epsilon(x) - \zeta) dx + \frac{1}{24} \beta(0) H + \frac{1}{2} \beta(X) H \left(\delta^2 - \delta + \frac{1}{6} \right) \right]$$

ここでこの式の磁場依存性について考える。第一項の積分項は $\frac{1}{H}$ に比例するので、第一項は磁場に依存しない項になる。つまりこの項の磁化の寄与はない。第二項は H^2 に比例するので、この項は定常反磁性磁化率に寄与する。そして最後の項が磁化の振動項になる。磁化の振動を議論する限りでは第三項のみ考慮すれば良い。ここで第三項を $\delta \tilde{\Omega}$ とおく。つまり、

$$\delta \tilde{\Omega} = \delta \kappa \left(\frac{eHV}{2\pi^2 c \hbar} \right) \frac{1}{2} \beta(X) H \left(\delta^2 - \delta + \frac{1}{6} \right) \quad (2.4.154)$$

$$= \delta \kappa \left(\frac{e\beta(X)H^2V}{4\pi^2 c \hbar} \right) \left(\left[X - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^2 - \left[X - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right] + \frac{1}{6} \right) \quad (2.4.155)$$

とおく。ただし、この式は $(n + \frac{1}{2}) \leq X \leq (n + \frac{3}{2})$ で正しい。 X がこの範囲を超えるとときは、式の n を 1 つ増減させる必要がある。(2.4.155) 式をフーリエ変換すると、

$$\delta\tilde{\Omega} = \frac{\delta\kappa e\beta(X)H^2V}{4\pi^2c\hbar} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi^2p^2} \cos\left(2\pi p\left(X - \frac{1}{2}\right)\right) \quad (2.4.156)$$

となる。ここで、 $H = 0$ で FS を κ で切断したときの断面積 $\mathcal{A}(\kappa)$ 、厚さ $\delta\kappa$ の slab 中の粒子数を次の様な δN_0 と表す。つまり、

$$\delta N_0 = XD = \delta\kappa\mathcal{A}(\kappa)\frac{V}{4\pi^3} \quad (2.4.157)$$

と表す。このとき、(2.4.156) 式の係数は、

$$\frac{\delta\kappa e\beta(X)H^2V}{4\pi^2c\hbar} = \frac{1}{2}D\beta H = \frac{\frac{1}{2}(\delta N_0)\beta H}{X} \quad (2.4.158)$$

とかける。

磁化と電子数

H に並行な slab の磁化 $\delta\tilde{M}$ は次のようにして計算できる。

$$\delta\tilde{M} = -\left(\frac{\partial(\delta\tilde{\Omega})}{\partial H}\right)_{\zeta} \quad (2.4.159)$$

$\delta\tilde{\Omega}$ の係数には H^2 の因子があるが、 $\delta\tilde{\Omega}$ を H で微分することで、この依存性は次のように消える。合成微分を考えるので、次の 2 式を計算しておく。まず、 $\left[\frac{\partial(\delta\tilde{\Omega})}{\partial X}\right]_{\zeta}$ は、

$$\left[\frac{\partial(\delta\tilde{\Omega})}{\partial X}\right]_{\zeta} = \frac{d}{dX} \left[\delta\kappa \left(\frac{e\beta(X)H^2V}{4\pi^2c\hbar} \right) \left(\left[X - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^2 - \left[X - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right] + \frac{1}{6} \right) \right] \quad (2.4.160)$$

$$= \delta\kappa \left(\frac{e\beta(X)H^2V}{4\pi^2c\hbar} \right) \left(2 \left[X - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right] - 1 \right) \quad (2.4.161)$$

$$= \delta\kappa \left(\frac{e\beta(X)H^2V}{4\pi^2c\hbar} \right) (2[X - (n + 1)]) \quad (2.4.162)$$

となる。次に $\left[\frac{\partial X}{\partial H}\right]_{\zeta}$ は、

$$\left[\frac{\partial X}{\partial H}\right]_{\zeta} = \frac{c\hbar\mathcal{A}(\kappa)}{2\pi e} \left(-\frac{1}{H^2} \right) \quad (2.4.163)$$

であるので、 $\delta\tilde{M}$ は次の様に求められる。

$$\delta\tilde{M} = -\left(\frac{\partial(\delta\tilde{\Omega})}{\partial H}\right)_{\zeta} \quad (2.4.164)$$

$$= -\left[\frac{\partial(\delta\tilde{\Omega})}{\partial X}\right]_{\zeta} \left[\frac{\partial X}{\partial H}\right]_{\zeta} \quad (2.4.165)$$

$$= -\delta\kappa \frac{e\beta(X)H^2V}{4\pi^2c\hbar} 2[X - (n + 1)] \frac{c\hbar\mathcal{A}(k)}{2\pi e} \left(-\frac{1}{H^2} \right) \quad (2.4.166)$$

$$= \beta(X)\delta N_0[X - (n + 1)] \quad (2.4.167)$$

この式は $n + \frac{1}{2} \leq X \leq n + \frac{3}{2}$ の範囲で成立することに注意する．また，この結果は $\delta\tilde{M}$ が saw-tooth 型に変化することを示している．これは連続に配置する離散ランダウレベルがフェルミエネルギー ζ を通過するときの不連続性から形成される．(2.4.156) 式を微分，もしくは今算出した $\delta\tilde{M}$ のフーリエ変換をすることで次の形を得る．

$$\delta\tilde{M} = -\beta\delta N_0 \sum_{p=1}^{\infty} \frac{\sin 2\pi p (X - \frac{1}{2})}{\pi p} \quad (2.4.168)$$

ここで，slab 中の粒子数 δN は

$$\delta N = (n+1)D \quad (2.4.169)$$

$$= (n+1) \frac{\delta N_0}{X} \quad (2.4.170)$$

ただし， $n + \frac{1}{2} \leq X \leq n + \frac{3}{2}$ で成立する． H に対して ζ が一定の場合， H が減少するとき新しいランダウレベルは満たされる必要がある．このとき， δN は約 $\delta N_0/n$ の不連続性を持つ， δN_0 を中心とした saw-tooth 型の変化を示す．

δN の saw-tooth 型の振動は熱力学関数 $\delta\Omega$ から計算しても理解できる．

$$\delta N = - \left[\frac{\partial(\delta\Omega)}{\partial\zeta} \right]_H \quad (2.4.171)$$

$$= - \left[\frac{\partial(\delta\Omega)}{\partial X} \right]_H \left[\frac{\partial X}{\partial\zeta} \right]_H \quad (2.4.172)$$

$$= - [-DH\beta(X)X + DH\beta(X)(X - (n+1))] \frac{1}{\beta(X)H} \quad (2.4.173)$$

$$= -D(-X + (X - (n+1))) \quad (2.4.174)$$

これは $D(n+1)$ であり，先ほどの計算結果と同じである．ただ，この形は δN を次の2項に分解できると示唆を持つ．

$$\delta N = DX - D(X - (n+1)) \quad (2.4.175)$$

$$= \delta N_0 - \delta\tilde{N} \quad (2.4.176)$$

よって，

$$\delta\tilde{N} = \delta N - \delta N_0 \quad (2.4.177)$$

$$= -D[X - (n+1)] \quad (2.4.178)$$

$$= -\frac{\delta N_0}{X} [X - (n+1)] \quad (2.4.179)$$

$$= -\frac{\delta N_0}{X} \left[\delta - \frac{1}{2} \right] \quad (2.4.180)$$

$\delta\tilde{M} = \beta\delta N_0[X - (n+1)]$ より，

$$\delta\tilde{N} = -\frac{1}{X} \left[\delta - \frac{1}{2} \right] \frac{\delta\tilde{M}}{\beta(X)[X - (n+1)]} \quad (2.4.181)$$

$$= -\frac{\delta\tilde{M}}{\beta(X)H} \quad (2.4.182)$$

$$= -\frac{m(X)2\pi H}{\hbar^2 \mathcal{A}(\kappa)} \delta\tilde{M} \quad (2.4.183)$$

この結果より、 $\delta\tilde{M}$ は $\delta\tilde{N}$ に比例することが分かる。つまり、 $\delta\tilde{M}$ の saw-tooth 型の振動は $\delta\tilde{N}$ の saw-tooth 型の振動が原因である。

\tilde{M} への主な寄与は \mathcal{A} が極値 A に近いような κ の狭い範囲のみからくる。 $d\kappa$ で積分することで \tilde{M} と \tilde{N} の関係が得られる。そしてその形は、 \mathcal{A} を A に変えた $\tilde{N} = -\frac{m(X)2\pi H}{\hbar^2 A} \tilde{M}$ である。またこの関係の簡単な解釈は Pippard[89] によって次のように与えられた。FS 上を古典軌道で回る電子の磁気モーメント μ は次のように書ける。 α は実空間での軌道面積とする。

$$\mu = \frac{-e\alpha\omega_c}{2\pi c} \quad (2.4.184)$$

$$= \frac{-e}{2\pi c} \frac{eH}{mc} \left(\frac{c\hbar}{eH} \right)^2 \mathcal{A} \quad (2.4.185)$$

$$= \frac{-\hbar^2 \mathcal{A}}{2\pi m H} \quad (2.4.186)$$

$$= -X\beta \quad (2.4.187)$$

よって、次の関係を得る。

$$\delta\tilde{M} = \mu\delta\tilde{N} \quad (2.4.188)$$

つまり、 $\delta\tilde{M}$ の振動は次のように説明がつく。電子一つ一つが磁気モーメント μ を持っていて、slab 系の電子数 $\delta\tilde{N}$ が振動変化することで、slab 系の磁化 $\delta\tilde{M}$ が振動変化する。ここで、変化する電子数 $\delta\tilde{N}$ はフェルミエネルギー付近の電子であることに注意する。

3次元に拡大する前に2次元 slab 系の放物線分散への適用として次を考える。2次元系の結果をエネルギー分散が自由電子のように放物線である電子系に適用してみる。つまり、次を仮定することにする。

$$\beta = \beta(0) \quad (2.4.189)$$

$$\varepsilon(x) = x\beta H \quad (2.4.190)$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) \quad (2.4.191)$$

ただし、 $\varepsilon(x)$ 、 ζ はバンドの端点 $\varepsilon(0)$ から測るとする。 $\zeta = \text{一定}$ のときは次のようになる。

$$\zeta = X\beta H \quad (2.4.192)$$

$$XD = \delta N_0 \quad (2.4.193)$$

よって、 $n + \frac{1}{2} < X < n + \frac{3}{2}$ において次が成立する。

$$\delta\Omega = \delta\kappa \left(\frac{eHV}{2\pi^2 c\hbar} \right) \left\{ \int_0^X [\varepsilon(x) - \xi] dx + \frac{1}{24} \beta(0) H + \frac{1}{2} \beta H \left(\delta^2 - \delta + \frac{1}{6} \right) \right\} \quad (2.4.194)$$

$$= -\frac{1}{2} \zeta \delta N_0 + \frac{\beta^2 H^2 \delta N_0}{24\zeta} + \frac{1}{2} \frac{\beta^2 H^2 \delta N_0}{\zeta} \left\{ \left[X - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^2 - \left[X - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right] + \frac{1}{6} \right\} \quad (2.4.195)$$

$$= \beta H \delta N_0 \left\{ \frac{(n+1)^2}{2X} - (n+1) \right\} \quad (2.4.196)$$

最終式は簡単な式だが，最終式よりも2行目の方が多くの情報を含む．2行目の第一項は熱力学関数 $\delta\Omega$ の磁場に依存しない項，第二項は線形磁化の項，第三項は振動項 $\delta\tilde{\Omega}$ になる．したがって，次の磁化の表式を得る．

$$\delta M = -\frac{\beta^2 H \delta N_0}{12\zeta} + \beta \delta N_0 [X - (n+1)] - \frac{\beta^2 H \delta N_0}{\zeta} \left\{ \left[X - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^2 - \left[X - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right] + \frac{1}{6} \right\} \quad (2.4.197)$$

第一項は2次元ランダウ定常反磁性磁化であり，第二項は任意のエネルギー分散の結果と同じ形の振動項 $\delta\tilde{M}$ ，第三項は今までは保持していても意味なかったので近似で消えていた振動項である．ただし，自由電子の場合は第三項は第一項定常反磁性項に匹敵するため残しておく．電子数 δN は次のようになる．

$$\delta N = \delta N_0 - \frac{\delta N_0}{X} (X - (n+1)) \quad (2.4.198)$$

$$= \frac{(n+1)}{X} \delta N_0 \quad (2.4.199)$$

2.4.5 3次元系， $T=0$ における熱力学ポテンシャル

2次元のslab系を κ 積分することで3次元に拡張できる．また， $(-\infty, \infty)$ で κ 積分することで，実空間で L が小さい試料にも適用できる． $\zeta=$ 一定の場合に， $\delta\tilde{\Omega}$ は，(2.4.156) 式があるので， κ 積分すると次のようになる．

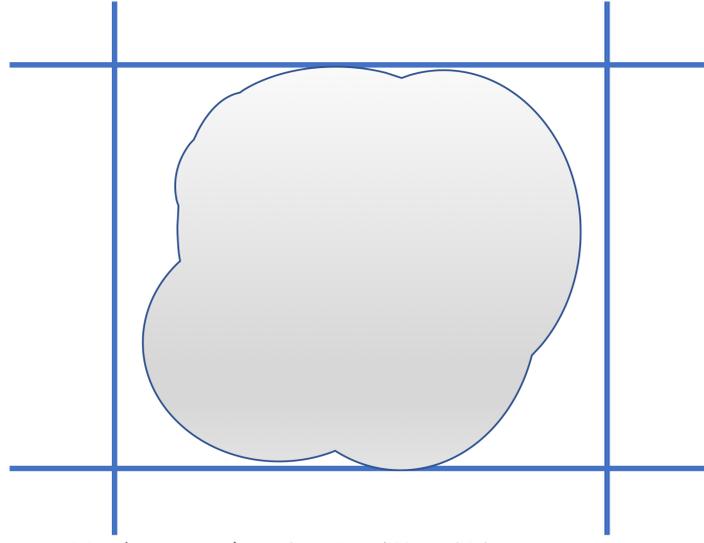
$$\tilde{\Omega} = \frac{eH^2 V}{4\pi^2 c \hbar} \int \beta d\kappa \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi^2 p^2} \cos \left\{ 2\pi p \left[X(\kappa) - \frac{1}{2} \right] \right\} \quad (2.4.200)$$

κ 積分の具体的な積分範囲の取り方は2つある．一つ目は $\kappa=$ 一定の平面がFSに接する κ の値である (図 2.3(a))．二つ目はブリルアンゾーン内でFSが閉じないときは，積分範囲を境界から境界に設定する方法である (図 2.3(b))．しかし，次のように積分範囲を設定すれば十分である． κ の原点を X (つまり，面積 \mathcal{A}) が極値 X_0 (つまり， \mathcal{A}_0) をとるような κ の値にし，積分範囲を $(-\infty, \infty)$ に設定すれば十分である．なぜなら， $X_0 \gg 1$ のとき， $(-\infty, \infty)$ の積分範囲の $\kappa=0$ 付近しか積分に寄与しないからである．同じ理由で $\beta(\kappa)$ は $\beta(0)$ として捉えて，積分の外に出すことができる．ここで， $X(\kappa)$ を偶関数と仮定して， $\kappa=0$ 周りでテーラー展開すると，

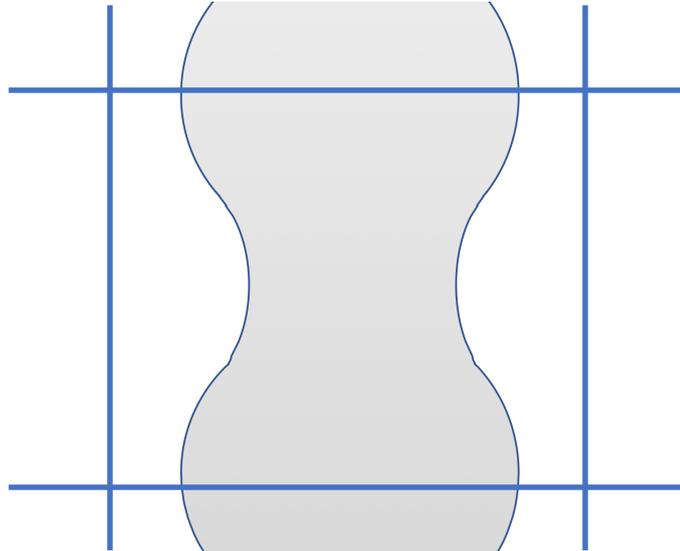
$$X(\kappa) = X(0) + \frac{1}{2!} X^{(2)}(0) \kappa^2 + \frac{1}{4!} X^{(4)}(0) \kappa^4 \pm \dots \quad (2.4.201)$$

$$= X_0 \pm \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 X}{\partial \kappa^2} \right|_{\kappa=0} \kappa^2 \pm \frac{1}{24} \left. \frac{\partial^4 X}{\partial \kappa^4} \right|_{\kappa=0} \kappa^4 \pm \dots \quad (2.4.202)$$

ただし，導関数の前の \pm の記号は， X_0 が最小のとき $+$ ， X_0 が最大のとき $-$ である． $X(\kappa=0) = X_0$ ， $X^{(2)}(0) = \pm \left. \frac{\partial^2 X}{\partial \kappa^2} \right|_{\kappa=0} = \pm X''$ ， $X^{(4)}(0) = \pm \left. \frac{\partial^4 X}{\partial \kappa^4} \right|_{\kappa=0} = \pm X^{IV}$ ($X^{(2)}(0)$ が正のときは $+$ ，負のとき $-$ とする． $X^{(4)}(0)$ も同様) であることに注意する．これらの符号の意味は (図 2.4.4) の通りである．また，通常 κ^2 項より高次の項は必要ない．



(a) ブリルアンゾーン内で FS が閉じる場合



(b) ブリルアンゾーン内で FS が閉じない場合

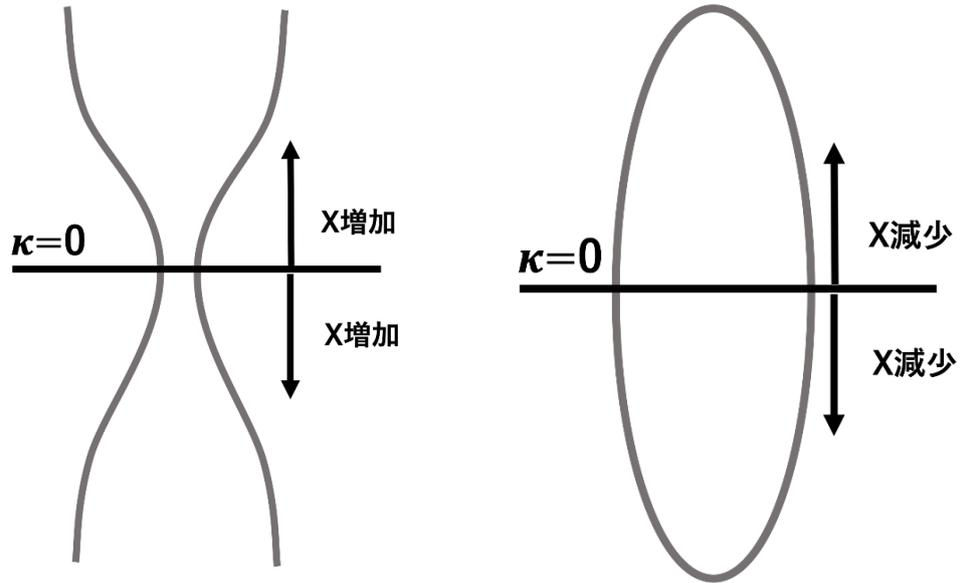
図 2.4.3: FS の形による κ の積分範囲. 図の横方向は磁場に垂直な方向であり, 縦方向は磁場に並行な方向 (κ 方向) である. FS が閉じている場合の κ の範囲の上限と下限はそれぞれ κ = 一定の平面が FS に接するときの κ になる. ブリルアンゾーン内で FS が閉じない場合は積分範囲をブリルアンゾーンの境界から境界に設定する.

FS を楕円型と仮定すると, $X(\kappa)$ のテーラ展開は $X(\kappa) = X_0 - \frac{1}{2}X''\kappa^2$ となる. $I_p = \int_0^\infty d\kappa \cos \left\{ 2\pi p \left[X(\kappa) - \frac{1}{2} \right] \right\}$ として, $\tilde{\Omega}$ の変形を続けると次のようになる.

$$\tilde{\Omega} = \frac{eH^2V}{4\pi^2c\hbar} \beta \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi^2 p^2} \int d\kappa \cos \left\{ 2\pi p \left[X(\kappa) - \frac{1}{2} \right] \right\} \quad (2.4.203)$$

$$= 2 \frac{eH^2V}{4\pi^2c\hbar} \beta \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi^2 p^2} I_p \quad (2.4.204)$$

ここで, 積分の上限を κ_0 としないで ∞ とできる理由は, FS が楕円型であり次を満たすか



(a) FSが開いた形の場合は X'' の符号が+。 $\kappa = 0$ からずれると X (FSの断面積 \mathcal{A}) の増加する
 (b) FSが閉じ形の場合は X'' の符号が-。 $\kappa = 0$ からずれると X (FSの断面積 \mathcal{A}) の減少する

図 2.4.4: FS の形による X'' の符号の違い。

らである。

$$\frac{1}{2}X''\kappa_0^2 \gg 1 \quad (2.4.205)$$

つまり、 $X(\kappa_0) = X_0 - \frac{1}{2}X''\kappa_0^2$ であるので、 $X_0 - X(\kappa_0) \gg 1$ が成り立つ。よって、積分は $\kappa = 0$ 近傍のみが寄与することになる。 I_p の計算に戻る。 $u^2 = 2pX''\kappa^2$ とおくと次のように変形できる。

$$I_p = \int_0^\infty d\kappa \cos \left\{ 2\pi p \left[X_0 - \frac{1}{2}X''\kappa^2 - \frac{1}{2} \right] \right\} \quad (2.4.206)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2pX''}} \int_0^\infty du \cos \left\{ 2\pi p \left[X_0 - \frac{1}{2} - \frac{u^2}{4p} \right] \right\} \quad (2.4.207)$$

cos 部分だけ計算を進めると、

$$\cos \left\{ 2\pi p \left[X_0 - \frac{1}{2} - \frac{u^2}{4p} \right] \right\} = \cos \left\{ 2\pi p X_0 - \pi p - \frac{\pi u^2}{2} \right\} \quad (2.4.208)$$

$$= (-1)^p \cos \left\{ 2\pi p X_0 - \frac{\pi u^2}{2} \right\} \quad (2.4.209)$$

$$= (-1)^p \left\{ \cos(2\pi p X_0) \cos\left(\frac{\pi u^2}{2}\right) + \sin(2\pi p X_0) \sin\left(\frac{\pi u^2}{2}\right) \right\} \quad (2.4.210)$$

となる。よって、

$$I_p = \frac{1}{\sqrt{2pX''}} \int_0^\infty du (-1)^p \left\{ \cos(2\pi p X_0) \cos\left(\frac{\pi u^2}{2}\right) + \sin(2\pi p X_0) \sin\left(\frac{\pi u^2}{2}\right) \right\} \quad (2.4.211)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2pX''}} (-1)^p \left\{ \cos(2\pi p X_0) \int_0^\infty \cos\left(\frac{\pi u^2}{2}\right) du + \sin(2\pi p X_0) \int_0^\infty \sin\left(\frac{\pi u^2}{2}\right) du \right\} \quad (2.4.212)$$

$$= \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{2pX''}} (-1)^p \{ \cos(2\pi p X_0) + \sin(2\pi p X_0) \} \quad (2.4.213)$$

$$= \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{1}{\sqrt{2pX''}} (-1)^p \sin\left(2\pi p X_0 + \frac{\pi}{4}\right) \quad (2.4.214)$$

と変形できる。ここでは、 $\int_0^\infty \cos\left(\frac{\pi u^2}{2}\right) du = \int_0^\infty \sin\left(\frac{\pi u^2}{2}\right) du = \frac{1}{2}$ であることを用いた。これは、クロソイド曲線に現れる積分である [90]。もし、 I_p の積分範囲を $[0, \kappa_0]$ としていたら、この積分は κ_0 に対応する u_0 を用いて、 $x(u_0) = \int_0^{u_0} \cos\left(\frac{\pi u^2}{2}\right) du$ 、 $y(u_0) = \int_0^{u_0} \sin\left(\frac{\pi u^2}{2}\right) du$ (フレネル積分) となっていた。 (x, y) は u_0 を媒介変数としてクロソイド曲線を描く。 u_0 は曲線長と呼ばれ、クロソイド曲線の原点からの曲線の長さである。一般に特別な場合を除いては、 $x(u_0)$ と $y(u_0)$ の積分は初等関数を使って閉形式で評価することができない。ただし、 $u_0 \rightarrow \infty$ のときの積分の極限值は定数になることが知られている。このように、 I_p の積分が実行できる理由はその積分範囲を $[0, \infty]$ にすることによる恩恵を受けているからである。なお、 $u_0 \rightarrow \infty$ のとき、位相角は $\frac{\pi}{4}$ に近づく (図 2.4.5)。 $X = \frac{\mathcal{A}(\kappa)c\hbar}{2\pi eH}$ であり、 κ の原点は $X(\kappa)$ が極値 X_0 をとる値または、 $\mathcal{A}(\kappa)$ が極値 $\mathcal{A}(0) \equiv A$ をとる値であるから、 X_0 は次のように表される。

$$X_0 = X(\kappa = 0) = \frac{\mathcal{A}(0)c\hbar}{2\pi eH} = \frac{A c \hbar}{2\pi e H} \quad (2.4.215)$$

よって、de Haas-van Alphen frequency F を次のように定義できる。

$$X_0 H = \frac{A c \hbar}{2\pi e} \equiv F \quad (2.4.216)$$

これを用いてさらに計算を進めると次のようになる。

$$I_p = \frac{\sqrt{2}}{2} \frac{1}{\sqrt{2pX''}} (-1)^p \sin\left(2\pi p X_0 + \frac{\pi}{4}\right) \quad (2.4.217)$$

$$= \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{pX''}} \sin\left\{2\pi p \left(X_0 - \frac{1}{2}\right) + \frac{\pi}{4}\right\} \quad (2.4.218)$$

$$= \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{pX''}} \cos\left\{2\pi p \left(X_0 - \frac{1}{2}\right) - \frac{\pi}{4}\right\} \quad (2.4.219)$$

$$= \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{pX''}} \cos\left\{2\pi p \left(\frac{F}{H} - \frac{1}{2}\right) - \frac{\pi}{4}\right\} \quad (2.4.220)$$

よって、求める $\tilde{\Omega}$ は、

$$\tilde{\Omega} = \frac{eH^2 V}{4\pi^2 c \hbar} \beta \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{\pi^2} \frac{1}{p^{5/2}} X''^{-1/2} \cos\left\{2\pi p \left(\frac{F}{H} - \frac{1}{2}\right) - \frac{\pi}{4}\right\} \quad (2.4.221)$$

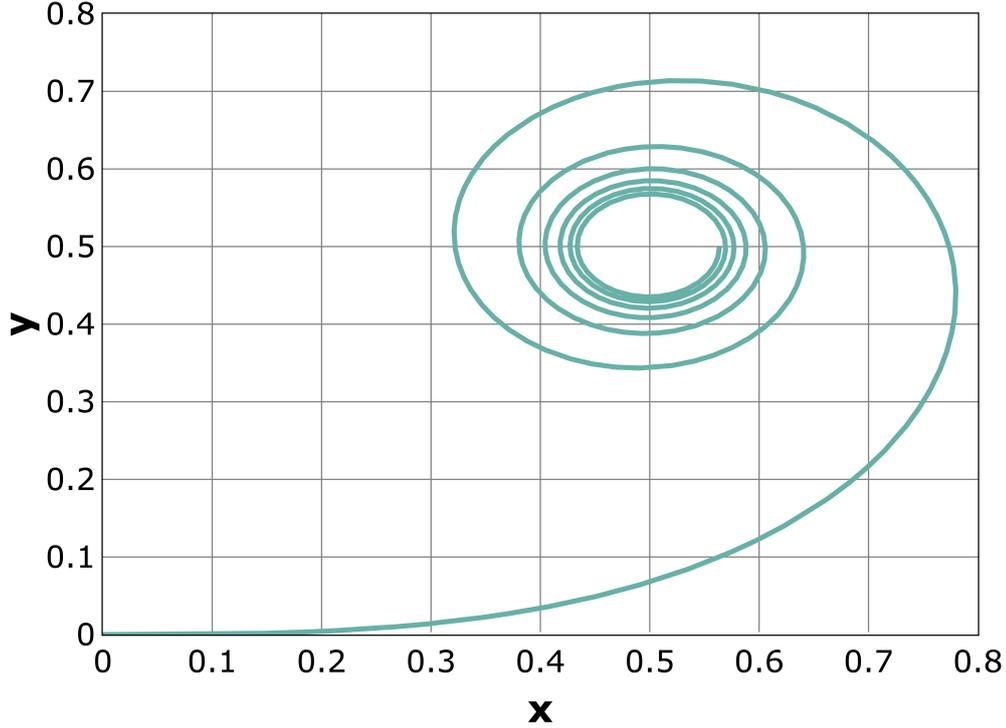


図 2.4.5: 曲線長 u_0 を 0 から 5 で変化させた場合のクロソイド曲線. 曲線長 u_0 が大きくなることに伴って, 点 $(x(u_0), y(u_0))$ が一点 $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ に収束していく様子が分かる. つまり, $u_0 \rightarrow \infty$ のときフレネル積分 $x(u_0), y(u_0)$ は $\frac{1}{2}$ に収束する. またこのとき, 点 $(x(u_0), y(u_0))$ の位相角は $\frac{\pi}{4}$ に近づく.

となる. ここで, $A'' = \left| \frac{\partial^2 \mathcal{A}}{\partial \kappa^2} \right|_{\kappa=0}$ とすると,

$$A'' = \frac{2\pi e H}{c \hbar} X'' \quad (2.4.222)$$

である. これを用いて変形すると最終的に, 次の式を得る.

$$\tilde{\Omega} = \left(\frac{e}{2\pi c \hbar} \right)^{3/2} \frac{\beta H^{5/2} V}{\pi^2 (A'')^{1/2}} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p^{5/2}} \cos \left[2\pi p \left(\frac{F}{H} - \frac{1}{2} \right) - \frac{\pi}{4} \right] \quad (2.4.223)$$

2.4.6 位相スミアリング

前章で求めた $\tilde{\Omega}$ は, 理想的な状況を仮定している. つまり, 温度は絶対零度であり, 電子の緩和時間や不純物の効果を仮定していない. 実際は, 系の温度 T , 電子の緩和時間 τ , 資料や場の不均一性を考慮する必要がある. これらの効果を取り入れる方法として位相スミアリングがある. つまり, これらの効果は全て振動の位相, および振幅を変える効果だけを与えるのである. つまり, 効果を表す分布関数と振動項の畳み込みによって, 効果を考慮した振動を考える. まず簡単のため振動項の位相を

$$\Psi = \left[2\pi p \left(\frac{F}{H} - \frac{1}{2} \right) - \frac{\pi}{4} \right] \quad (2.4.224)$$

とおく．ここで， ψ からの位相のずれを ϕ ，効果のスケーリングパラメーターを λ ，位相スミアリングの分布関数を $D(\phi/\lambda)$ と定義する．このとき，振動項 $\cos \psi$ は効果を考慮した振動項 I になる．

$$I = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \cos(\psi + \phi) D(\phi/\lambda) d\phi}{\int_{-\infty}^{\infty} D(\phi/\lambda) d\phi} \quad (2.4.225)$$

$$= \mathcal{R} \frac{e^{i\psi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\phi} D(\phi/\lambda) d\phi}{\int_{-\infty}^{\infty} D(\phi/\lambda) d\phi} \quad (2.4.226)$$

$$= \mathcal{R} \frac{e^{i\psi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\lambda z} D(z) dz}{\int_{-\infty}^{\infty} D(z) dz} \quad (2.4.227)$$

ここで， $\phi/\lambda = z$ と定義した．また，

$$f(\lambda) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\lambda z} D(z) dz \quad (2.4.228)$$

と， $D(Z)$ の λ に関するフーリエ成分 $f(\lambda)$ を定義すると I はさらに次のように変形できる．

$$I = \mathcal{R} \left\{ \frac{e^{i\psi} f(\lambda)}{f(0)} \right\} \quad (2.4.229)$$

ここで， I の効果を考えるために $\left\{ \frac{e^{i\psi} f(\lambda)}{f(0)} \right\}$ に注目する． $\left\{ \frac{e^{i\psi} f(\lambda)}{f(0)} \right\}$ は複素数であり，その構成因子の $f(\lambda)$ も複素数である． $\tan(\xi) = \frac{\mathcal{I}f(\lambda)}{\mathcal{R}f(\lambda)}$ を満たす ξ によって， $f(\lambda)$ の極座標表示を $qe^{i\xi}$ とすると，

$$\left\{ \frac{e^{i\psi} f(\lambda)}{f(0)} \right\} = \frac{q}{f(0)} e^{i(\psi + \xi)} \quad (2.4.230)$$

となる．したがって，

$$I = \mathcal{R} \left\{ \frac{e^{i\psi} f(\lambda)}{f(0)} \right\} \quad (2.4.231)$$

$$= \left\| \frac{e^{i\psi} f(\lambda)}{f(0)} \right\| \cos(\psi + \xi) \quad (2.4.232)$$

$$= \frac{\|f(\lambda)\|}{f(0)} \cos(\psi + \xi) \quad (2.4.233)$$

このように，位相スミアリングは振動項に低減係数 $\frac{\|f(\lambda)\|}{f(0)}$ を乗じ，位相を ξ だけずらす効果をもたらす．ただ，位相スミアリングの分布関数 $D(\phi/\lambda)$ が偶関数の場合は $\xi = 0$ としてよく，効果は低減係数をかけるだけでよくなる．なぜなら， $D(\phi/\lambda)$ が偶関数のとき，そのフーリエ成分 $f(\lambda)$ は実部のみを持つ．つまり， $\mathcal{I}f(\lambda) = 0$ である．よって， $\tan(\xi) = 0$ となり，満たす ξ は $\mathcal{Z}\pi$ に属する．ただし， \mathcal{Z} は整数集合とする．ここからは，各効果の位相スミアリングの分布関数は偶関数を考えて，各効果の低減係数 $R \equiv \frac{\|f(\lambda)\|}{f(0)}$ を導く．そして種々の位相スミアリング効果を理想的な状況を仮定している $\tilde{\Omega}$ に乗じることで，Lifshitz-Kosevich

の公式を導く。

考慮する効果	$D(z)$	$f(\lambda)/f(0)$
有限温度	$1/(1 + \cosh z)$	$\pi\lambda/\sinh(\pi\lambda)$
緩和時間	$1/(1 + z^2)$	$e^{-\lambda}$
スピン	$D(z) = \frac{1}{2}$ for $-1 < z < 1$ $D(z) = 0$ elsewhere	$\sin \lambda/\lambda$

(2.4.234)

各効果の低減係数 R を導く一般的な方法をまず記載する。確率密度関数 D の値は引数 μ の ζ 周りの値によって変化する。この μ の ζ からのエネルギー差が ψ からの位相ずれ ϕ を生む。 F は ζ の関数であるので、 ψ も ζ の関数である。 ψ を μ 周りでテーラー展開すると次の様になる。

$$\psi(\zeta) = \psi(\mu) + \left. \frac{d\psi(\zeta)}{d\zeta} \right|_{\zeta=\mu} \Delta\zeta \quad (2.4.235)$$

$$= \psi(\mu) + \frac{2\pi p}{H} \left. \frac{dF(\zeta)}{d\zeta} \right|_{\zeta=\mu} (\zeta - \mu) \quad (2.4.236)$$

よって、 μ の ζ からのエネルギー差による ψ からの位相ずれ ϕ は、

$$\phi = \frac{2\pi p}{H} \left. \frac{dF(\zeta)}{d\zeta} \right|_{\zeta=\mu} (\mu - \zeta) \quad (2.4.237)$$

$$= \frac{2\pi p}{H} \frac{c\hbar}{2\pi e} \left. \frac{dA(\zeta)}{d\zeta} \right|_{\zeta=\mu} (\mu - \zeta) \quad (2.4.238)$$

$$= \frac{2\pi p}{\beta H} (\mu - \zeta) \quad (2.4.239)$$

である。これと、確率密度関数 $D(z)$, $z = \phi/\lambda$ によって、考えている効果の λ が分かる。さらに (表 2.4.234) によってその効果の低減係数 R を求められる。

有限温度の効果

有限温度 T においては、エネルギー ε の状態の占有確率はフェルミ分布 $f(\varepsilon)$

$$f(\varepsilon) = 1 / \left(1 + e^{(\varepsilon - \zeta)/kT} \right) \quad (2.4.240)$$

と表される。これは、

$$\int_{\varepsilon}^{\infty} -\frac{df(\mu)}{d\mu} d\mu = f(\varepsilon) \quad (2.4.241)$$

と変形できる。つまり温度効果は、確率密度関数 $-\frac{df(\mu)}{d\mu}$ の温度による概形の変化で表される。 $T = 0$ のとき、 $-\frac{df(\mu)}{d\mu}$ はデルタ関数になり、 $[\varepsilon, \infty]$ での積分値は、 ε と ζ の大小関係が変わるところで 1 から 0 になる。しかし、 T が有限温度のとき、 $-\frac{df(\mu)}{d\mu}$ はデルタ関数ではなく、 $\mu = \zeta$ の軸を中心に左右に広がった概形になる。そのため、 $[\varepsilon, \infty]$ での積分値は、 ε が ζ に近い値の範囲で緩やかに 1 から 0 に変化する。温度効果の場合の $D(z)$ は、

$$-\frac{df(\mu)}{d\mu} = \frac{1}{2kT[1 + \cosh(\mu - \zeta)/kT]} \quad (2.4.242)$$

であるので,

$$\frac{\phi}{\lambda} = \frac{\mu - \zeta}{kT} \quad (2.4.243)$$

よって,

$$\lambda = \frac{kT}{\mu - \zeta} \frac{2\pi p}{\beta H} (\mu - \zeta) \quad (2.4.244)$$

$$= 2\pi p \frac{kT}{\beta H} \quad (2.4.245)$$

(表 2.4.234) により, $D(z)$ に本効果の低減係数 R は

$$R_T = \frac{\pi\lambda}{\sinh \pi\lambda} = \frac{2\pi^2 p k T / \beta H}{\sinh (2\pi^2 p k T / \beta H)} \quad (2.4.246)$$

となる.

緩和時間の効果

電子が散乱によって有限の緩和時間 τ を持つとき, エネルギー準位 ε_r が不確定性原理によって広がるとき, 振動の減衰がもたらされる. この場合の粒子の存在確率の広がり具合は次の様に Lorentzian で記述される.

$$\frac{d\varepsilon}{(\varepsilon - \varepsilon_r)^2 + (\hbar/2\tau)^2} \quad (2.4.247)$$

ここで, τ を ε から独立しているとみなせる場合, この広がり効果は真の値 ζ の周りのフェルミエネルギー μ の広がりと同じである. このとき, 粒子の μ が μ から $\mu + d\mu$ の間にある確率は次の量に比例する.

$$\frac{d\mu}{(\mu - \zeta)^2 + (\hbar/2\tau)^2} = \frac{d\mu}{\left(\frac{\hbar}{2\tau}\right)^2 \left(1 + \left(\frac{(\mu - \zeta)2\tau}{\hbar}\right)^2\right)} \quad (2.4.248)$$

(表 2.4.234) より, 確率密度関数が Lorentzian の場合の $D(z)$ は $1/1 + z^2$ であるので次の様になる.

$$z = \phi/\lambda = \frac{2\tau(\mu - \zeta)}{\hbar} \quad (2.4.249)$$

λ で書き換えると,

$$\lambda = \frac{\hbar}{2\tau(\mu - \zeta)} \frac{2\pi p}{\beta H} (\mu - \zeta) = \frac{\pi p \hbar}{\beta H \tau} \quad (2.4.250)$$

となる. よって, 準位の広がりによる低減係数 R_D は,

$$R_D = e^{-\pi p \hbar / \beta H \tau} = e^{-\pi p / \omega_c \tau} \quad (2.4.251)$$

となる. この結果は, 散乱による効果が温度の効果と似ていることを表している. 実際,

$$x = \hbar/2\pi k \tau \quad (2.4.252)$$

この様に Dingle 温度 x を定義すれば, R_D は次の様に变形され, 温度効果の低減係数 R_T と形が似ていることが分かる.

$$R_D = \exp(-2\pi^2 p k x / \beta H) \quad (2.4.253)$$

電子スピンの効果

一般に、磁場 H をかけると各エネルギー準位はスピン縮退が解けて 2 つに分割される (ゼーマン分裂)。エネルギー準位の分裂を次の様に表現する。

$$\varepsilon \pm \frac{1}{2}\Delta\varepsilon \quad (2.4.254)$$

$$\Delta\varepsilon = \frac{1}{2}g\beta_0H \quad (2.4.255)$$

ここで $\beta_0 = eh/m_0c$ はボーア磁子の 2 倍を表し、 g は g 因子を表す。2 つの分裂エネルギー $\varepsilon \pm \frac{1}{2}\Delta\varepsilon$ がフェルミエネルギー ζ を通過するとは、分裂していないエネルギー準位 ε が 2 つのフェルミエネルギー $\zeta \pm \frac{1}{2}\Delta\varepsilon$ を通過すると仮想的に解釈できる。つまり、ゼーマン分裂によって分かれた up スピン電子、down スピン電子それぞれにとってのフェルミエネルギーがそれぞれ $\zeta \pm \frac{1}{2}\Delta\varepsilon$ となったと解釈する。よって、 $\cos\psi$ は次の様に 2 つ振動の重ね合わせからなる。

$$\frac{1}{2} \left\{ \cos \left(\psi + \frac{1}{2}\Delta\varepsilon \frac{d\psi}{d\zeta} \right) + \cos \left(\psi - \frac{1}{2}\Delta\varepsilon \frac{d\psi}{d\zeta} \right) \right\} = \cos \left[\frac{1}{2}\Delta\varepsilon \frac{d\psi}{d\zeta} \right] \cos \psi \quad (2.4.256)$$

$$= \cos \left[\frac{1}{2}\Delta\varepsilon \frac{2\pi p}{\beta H} \right] \cos \psi \quad (2.4.257)$$

$$= \cos \left[\frac{1}{2}p\pi g \frac{m}{m_0} \right] \cos \psi \quad (2.4.258)$$

よって、電子スピンの効果による低減係数 R_S は、

$$R_S = \cos \left[\frac{1}{2}p\pi g \frac{m}{m_0} \right] \quad (2.4.259)$$

$g = 2$, $m = m_0$ の場合にはこの低減係数 R_S は $(-1)^p$ に等しい。これはスピン分裂の幅がちょうどランダウ分裂の幅に等しくなることに対応する [91]。これまでの計算でも見たように $(-1)^p$ は p 次の位相シフト $p\pi$ に等しい。

2.4.7 Lifshitz-Kosevich の公式

ここまで求めた、低減係数 R_T , R_D , R_S を理想的な熱力学ポテンシャルの式 $\tilde{\Omega}$ に乗じて、次の Lifshitz-Kosevich の公式を得る。

$$\tilde{\Omega} = \left(\frac{e}{2\pi ch} \right)^{3/2} \frac{2kTH^{3/2}V}{(A'')^{1/2}} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{\exp(-2\pi^2 pkx/\beta H) \cos \left[\frac{1}{2}p\pi g (m/m_0) \right]}{p^{3/2} \sinh(2\pi^2 pkT/\beta H)} \cos \left[2\pi p \left(\frac{F}{H} - \frac{1}{2} \right) \pm \frac{\pi}{4} \right] \quad (2.4.260)$$

この式は、 R_D を除いて Lifshitz と Kosevich により導かれた [92]。一般にフェルミ面は複雑であり、任意の磁場方向に対して複数の極値断面がある。それに対応しての F , β (または m), g , x が存在する。したがって、総量は多数の寄与の合計であり、それぞれの寄与はパラメーターの異なる LK 形式を持つ。

ただし、Lifshitz-Kosevich の公式は (2.4.104) 式のオイラーマクローリンの公式を利用しており、量子極限の様な強磁場を扱うには適さない。本研究では強磁場でも有効な理論とするために、ランダウ準位の状態和を計算するためにオイラーマクローリンの公式を使用しないこととする。

2.5 Fukuyama 公式と弱磁場におけるディラック電子の磁化率

2.5.1 3次元ディラック電子の模型

ビスマスの L 点に実現されるとされるディラック電子のモデルについて説明する。本研究では3次元ディラック電子として 4×4 のハミルトニアン [39] を採用した。強 SOC をもつ周期ポテンシャル中の電子を表すハミルトニアンから出発する。 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論 [93, 94] を2バンドに適用して [95]、適切にユニタリー変換をすると Wolff が示した 4×4 行列 (2つはバンドから、2つはスピンから) で表される有効ハミルトニアンになる [39]。さらに速度ベクトルの成分 γ を等方的にとることで、等方的 Wolff ハミルトニアンが導出される。これはディラック方程式 [96] から導出されるハミルトニアンとユニタリー変換で繋がっていることから、固体中のディラックハミルトニアンと呼ばれる。 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論のおかげで、磁場の効果は単純な置き換え ($\hbar\mathbf{k} \rightarrow \boldsymbol{\pi} = -i\hbar\nabla + e\mathbf{A}$) により取り入れられる [28, 39, 94]。 \mathbf{A} はベクトルポテンシャルであり、磁束密度 \mathbf{B} と $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ の関係がある。結果的に次のような磁場中の等方的 Wolff ハミルトニアン \mathcal{H} が得られる。

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} \Delta & i\gamma\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ -i\gamma\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\sigma} & -\Delta \end{bmatrix}, \quad (2.5.1)$$

ここで、 γ は速度を表し、エネルギーの原点はバンドギャップの中心で考えられる。 $\boldsymbol{\sigma}$ は Pauli スピン行列である。実際の固体は一般に異方性があるが、この等方的モデルは様々な物理的性質の本質を表現するのに十分である [28]。上記のハミルトニアンの固有エネルギーは以下のように与えられる。

$$\epsilon_{n,\sigma}(k_h) = \pm \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta \left(j\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_h^2}{2m_h} \right)}, \quad (2.5.2)$$

ここで、 m_h は磁場方向に沿った有効質量である。 $(m_h = m_c$ は等方的な Wolff ハミルトニアンの場合に成立する) $j = n + 1/2 + \sigma/2 = 0, 1, 2, \dots$ はディラック電子の良い量子数となる。式 (2.5.2) の符号の前の $+$ ($-$) は、導電帯 (価電子帯) に対応する。式 (2.5.2) はゲージ不変式であり、これを用いて計算した自由エネルギー、磁化などの結果はゲージ不変である。ここからは磁場中の等方的 Wolff ハミルトニアンの導出を説明する。

Luttinger-Kohn による $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論

まず磁場中の理論に展開するときに重要となる $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論を主に文献 [28, 94] を参考に説明する。まず、強 SOC をもつ周期ポテンシャル中の電子を表すハミルトニアン \mathcal{H} は次の形

で表される.

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{soc} \quad (2.5.3)$$

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (2.5.4)$$

$$\mathcal{H}_{soc} = \frac{\hbar}{4m^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p} \quad (2.5.5)$$

これに対して $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論を適用する. まず \mathcal{H}_0 の固有値 $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ に属する固有方程式は $\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ をブロッホ関数として

$$\mathcal{H}_0 \phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_n(\mathbf{k}) \phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.5.6)$$

$$\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (2.5.7)$$

と表される. $\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ の系列は完全系をなす. つまり,

$$\langle \phi_{n\mathbf{k}}, \phi_{n'\mathbf{k}'} \rangle = \int_{\text{試料全体}} \phi_{n\mathbf{k}}^* \phi_{n'\mathbf{k}'} d\mathbf{r} = \delta_{nn'} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \quad (2.5.8)$$

を満たす. まず, \mathcal{H} から考えるのではなく SOC がない \mathcal{H}_0 を考える. Luttinger-Kohn に倣って議論を進める. 電子系に不純物がある場合のハミルトニアンは $\mathcal{H}_0 + U$ である. このハミルトニアンの固有関数を $\Psi(\mathbf{r})$ とするとこれはブロッホ波動関数 $\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ の線型結合で表される. つまり,

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_n \int d\mathbf{k} \bar{A}_n(\mathbf{k}) \phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.5.9)$$

である. ここで, エネルギー分散の極値をとる波数ベクトルを \mathbf{k}_0 として次の関数 $\chi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ を定義する.

$$\chi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (2.5.10)$$

ここが $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論の味噌である. この系列 $\chi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ のおかげで n と \mathbf{k} が変数分離できる. また, $\chi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ の系列は完全系をなし, 次の正規直交性を持つ.

$$\langle \chi_{n\mathbf{k}}, \chi_{n'\mathbf{k}'} \rangle = \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \delta_{nn'} \quad (2.5.11)$$

これは次のように示すことができる. (2.5.8) 式の正規直交性に対応して,

$$\langle \chi_{n\mathbf{k}}, \chi_{n'\mathbf{k}'} \rangle = \int e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}_0}^* u_{n'\mathbf{k}_0} d\mathbf{r} \quad (2.5.12)$$

ここで, $u_{n\mathbf{k}_0}^*$ と $u_{n'\mathbf{k}_0}$ は結晶の周期性を持つ周期関数であるので,

$$u_{n\mathbf{k}_0}^* u_{n'\mathbf{k}_0} = \sum_m B_m^{nn'} e^{-i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}} \quad (2.5.13)$$

とフーリエ級数で書ける. \mathbf{K}_m は逆格子ベクトルである. よって, (2.5.12) 式は,

$$\langle \chi_{n\mathbf{k}}, \chi_{n'\mathbf{k}'} \rangle = \int e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} \sum_m B_m^{nn'} e^{-i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} \quad (2.5.14)$$

$$= \int d\mathbf{r} \sum_m B_m^{nn'} e^{i(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{K}_m) \cdot \mathbf{r}} \quad (2.5.15)$$

$$= (2\pi)^3 \sum_m B_m^{nn'} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{K}_m) \quad (2.5.16)$$

ここで、 \sum_m をとって有限に残る項は $\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{K}_m = 0$ を満たす項である。しかし、この関係を満たすことができる m は $m = 0$ 以外にない。なぜなら \mathbf{k}' と \mathbf{k} は第一 BZ に存在するからである。 $\mathbf{K}_0 = \mathbf{0}$ に注意して、

$$\langle \chi_{n\mathbf{k}}, \chi_{n'\mathbf{k}'} \rangle = (2\pi)^3 B_0^{nn'} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \quad (2.5.17)$$

また、(2.5.13) 式の逆フーリエ変換は

$$B_m^{nn'} = \frac{1}{\Omega} \int_{\text{cell}} e^{i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}_0}^* u_{n'\mathbf{k}_0} d\mathbf{r} \quad (2.5.18)$$

したがって、 $u_{n\mathbf{k}}$ は、 n と \mathbf{k} について正規直交系をなすことに注意すると

$$B_0^{nn'} = \frac{1}{\Omega} \int_{\text{cell}} u_{n\mathbf{k}_0}^* u_{n'\mathbf{k}_0} d\mathbf{r} = \frac{1}{(2\pi)^3} \delta_{nn'} \quad (2.5.19)$$

となる。したがって、(2.5.11) 式が示された。

次に任意の関数 $f(\mathbf{r})$ に対する $\{\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\}$ から $\{\chi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\}$ への基底変換を考える。 $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ を系列 $\{u_{n\mathbf{k}_0}\}_n$ の線型和で展開することができる。つまり、

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{n'} b_{nn'}(\mathbf{k}) u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \quad (2.5.20)$$

である。これによって、もともとブロッホ関数の平面波に対する周期変調関数 $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ はこの系列のそれぞれのバンド端 \mathbf{k}_0 での情報で表現された。任意の周期関数はバンド端のブロッホ関数で表現できる。系列 $\{u_{n\mathbf{k}_0}\}_n$ は周期関数に関して完全系をなす。 $\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ の系列は完全系なので任意の関数 $f(\mathbf{r})$ は次のように展開できる。

$$f(\mathbf{r}) = \sum_n \int d\mathbf{k} g_n(\mathbf{k}) \phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.5.21)$$

$$= \sum_n \int d\mathbf{k} g_n(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}} \quad (2.5.22)$$

$$= \sum_{n,n'} \int d\mathbf{k} g_n(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} b_{nn'}(\mathbf{k}) u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \quad (2.5.23)$$

$$= \sum_{n,n'} \int d\mathbf{k} g_n(\mathbf{k}) b_{nn'}(\mathbf{k}) \chi_{n'\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.5.24)$$

$$= \sum_{n'} \int d\mathbf{k} \bar{g}_{n'}(\mathbf{k}) \chi_{n'\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.5.25)$$

となる。ここでの変形は (2.5.7) 式、(2.5.20) 式、(2.5.10) 式を利用した。さらに、

$$\bar{g}_n(\mathbf{k}) = \sum_{n'} g_{n'}(\mathbf{k}) b_{n'n}(\mathbf{k}) \quad (2.5.26)$$

と定義した。このように任意の関数 $f(\mathbf{r})$ は $\{\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\}$ から $\{\chi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\}$ へ基底変換できる。

これをハミルトニアン $\mathcal{H}_0 + U$ の固有関数 $\Psi(\mathbf{r})$ に適用する。(2.5.9) 式は次のように完全系 $\{\chi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\}$ で表現できる。

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_n \int d\mathbf{k} A_n(\mathbf{k}) \chi_{n\mathbf{k}} \quad (2.5.27)$$

このとき、ハミルトニアン $\mathcal{H}_0 + U$ の固有方程式は

$$\sum_{n'} \int d\mathbf{k}' \langle \chi_{n\mathbf{k}} | \mathcal{H}_0 + U | \chi_{n'\mathbf{k}'} \rangle A_{n'}(\mathbf{k}') = \epsilon A_n(\mathbf{k}) \quad (2.5.28)$$

と表すことができる。

この行列成分 $\langle \chi_{n\mathbf{k}} | \mathcal{H}_0 + U | \chi_{n'\mathbf{k}'} \rangle$ を求めることになるのだが、我々は今は U に興味はない。 $U = 0$ として $\langle \chi_{n\mathbf{k}} | \mathcal{H}_0 | \chi_{n'\mathbf{k}'} \rangle$ を求めることにする。 U が有限の場合は以下の計算を同様に進めれば導出できる。まず、 $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ として、 $\mathbf{p}\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ と $\mathbf{p}^2\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ を求めておく [97]。 ∇ が作用するのは $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ と $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ であることに注意して、

$$\mathbf{p}\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = -i\hbar\nabla (u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}) \quad (2.5.29)$$

$$= \hbar\mathbf{k}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathbf{p}u_{n\mathbf{k}} \quad (2.5.30)$$

また、

$$\mathbf{p}^2\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = (-i\hbar\nabla)(\hbar\mathbf{k}u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathbf{p}u_{n\mathbf{k}}) \quad (2.5.31)$$

$$= \hbar^2k^2u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + 2\hbar\mathbf{k}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathbf{p}u_{n\mathbf{k}} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathbf{p}^2u_{n\mathbf{k}} \quad (2.5.32)$$

$$= (\hbar\mathbf{k})^2u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}(2\hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{p})u_{n\mathbf{k}} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathbf{p}^2u_{n\mathbf{k}} \quad (2.5.33)$$

ここで、 $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ はスカラーであることに注意した。この変形は $\chi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ についても同様なので次の関係式を得る。

$$\mathbf{p}^2\chi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = (\hbar\mathbf{k})^2u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}(2\hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{p})u_{n\mathbf{k}_0} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathbf{p}^2u_{n\mathbf{k}_0} \quad (2.5.34)$$

を得る。次に $\mathcal{H}_0\chi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ を求めておく。

$$\mathcal{H}_0\chi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \left(\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right) \chi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.5.35)$$

$$= \frac{1}{2m} [(\hbar\mathbf{k})^2u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}(2\hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{p})u_{n\mathbf{k}_0} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathbf{p}^2u_{n\mathbf{k}_0}] + V(\mathbf{r})\chi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.5.36)$$

$$= \frac{\hbar^2k^2}{2m}u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\frac{\hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}{m}u_{n\mathbf{k}_0} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\frac{\mathbf{p}^2}{2m}u_{n\mathbf{k}_0} + V(\mathbf{r})\chi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (2.5.37)$$

$$= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\frac{\hbar^2k^2}{2m}u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\frac{\hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}{m}u_{n\mathbf{k}_0} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\frac{\mathbf{p}^2}{2m}u_{n\mathbf{k}_0} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}V(\mathbf{r})u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \quad (2.5.38)$$

$$= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \left(\frac{\hbar^2k^2}{2m} + \frac{\hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}{m} \right) u_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathcal{H}_0u_{n\mathbf{k}_0} \quad (2.5.39)$$

したがって、次の交換関係が成り立つ。

$$[\mathcal{H}_0, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}] = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \left(\frac{\hbar^2k^2}{2m} + \frac{\hbar\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}}{m} \right) \quad (2.5.40)$$

したがって、 $\langle \chi_{n\mathbf{k}} | \mathcal{H}_0 | \chi_{n'\mathbf{k}'} \rangle$ は、

$$\langle \chi_{n\mathbf{k}} | \mathcal{H}_0 | \chi_{n'\mathbf{k}'} \rangle = \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) \mathcal{H}_0 e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \quad (2.5.41)$$

$$= \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) \left[e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \left(\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + \frac{\hbar \mathbf{k}' \cdot \mathbf{p}}{m} \right) + e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} \mathcal{H}_0 \right] u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \quad (2.5.42)$$

$$= \int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) \left[\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + \frac{\hbar \mathbf{k}' \cdot \mathbf{p}}{m} + \mathcal{H}_0 \right] u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \quad (2.5.43)$$

$$= \int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) \left[\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + \frac{\hbar \mathbf{k}' \cdot \mathbf{p}}{m} + \varepsilon_{n'}(\mathbf{0}) \right] u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \quad (2.5.44)$$

ここで、(2.5.6) 式より、 $\mathcal{H}_0 u_{n\mathbf{k}_0} = \varepsilon_n(\mathbf{0}) u_{n\mathbf{k}_0}$ であることを使った。 $\phi_{n\mathbf{0}} = u_{n\mathbf{k}_0}$ に注意する。以降 $\varepsilon_{n'}(\mathbf{0}) = \varepsilon_{n'}$ とおく。また、次の式の左辺が結晶の周期性を持つ周期関数であるので、それをフーリエ級数で表す。

$$u_{n\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) \left[\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + \frac{\hbar \mathbf{k}' \cdot \mathbf{p}}{m} + \varepsilon_{n'} \right] u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = \sum_m C_m^{nn'} e^{-i\mathbf{Q}_m \cdot \mathbf{r}} \quad (2.5.45)$$

よって、

$$\langle \chi_{n\mathbf{k}} | \mathcal{H}_0 | \chi_{n'\mathbf{k}'} \rangle = \sum_m C_m^{nn'} \int d\mathbf{r} e^{i(\mathbf{k}'-\mathbf{k}-\mathbf{Q}_m)\cdot\mathbf{r}} \quad (2.5.46)$$

$$= (2\pi)^3 \sum_m C_m^{nn'} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} - \mathbf{Q}_m) \quad (2.5.47)$$

$$= (2\pi)^3 C_0^{nn'} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \quad (2.5.48)$$

(2.5.45) 式より

$$C_m^{nn'} = \frac{1}{\Omega} \int_{\text{cell}} e^{i\mathbf{Q}_m \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}_0}^* \left[\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + \frac{\hbar \mathbf{k}' \cdot \mathbf{p}}{m} + \varepsilon_{n'} \right] u_{n'\mathbf{k}_0} d\mathbf{r} \quad (2.5.49)$$

$$C_0^{nn'} = \frac{1}{\Omega} \int_{\text{cell}} u_{n\mathbf{k}_0}^* \left[\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + \frac{\hbar \mathbf{k}' \cdot \mathbf{p}}{m} + \varepsilon_{n'} \right] u_{n'\mathbf{k}_0} d\mathbf{r} \quad (2.5.50)$$

である。したがって、

$$\langle \chi_{n\mathbf{k}} | \mathcal{H}_0 | \chi_{n'\mathbf{k}'} \rangle = \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \int u_{n\mathbf{k}_0}^* \left[\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + \frac{\hbar \mathbf{k}' \cdot \mathbf{p}}{m} + \varepsilon_{n'} \right] u_{n'\mathbf{k}_0} d\mathbf{r} \quad (2.5.51)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \int d\mathbf{r} u_{n\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) \left[\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + \varepsilon_{n'} \right] u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \\ &\quad + \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \int d\mathbf{r} u_{n\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) \left[\frac{\hbar \mathbf{k}' \cdot \mathbf{p}}{m} \right] u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.5.52)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \left[\frac{\hbar^2 k'^2}{2m} + \varepsilon_{n'} \right] \int d\mathbf{r} u_{n\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \\ &\quad + \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \int d\mathbf{r} u_{n\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) \left[\frac{\hbar k'_\alpha p^\alpha}{m} \right] u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.5.53)$$

$$= \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \left[\varepsilon_{n'} + \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} \right] \delta_{nn'} + \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \frac{\hbar k'_\alpha p_{nn'}^\alpha}{m} \quad (2.5.54)$$

$$= \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \left[\left(\varepsilon_{n'} + \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} \right) \delta_{nn'} + \frac{\hbar k'_\alpha p_{nn'}^\alpha}{m} \right] \quad (2.5.55)$$

ただし、

$$p_{nn'}^\alpha = \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \int d\mathbf{r} u_{n\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) p^\alpha u_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) \quad (2.5.56)$$

とおいた。これは $p_{nn}^\alpha = 0$, $p_{nn'}^\alpha = p_{n'n}^\alpha = (p_{nn'}^\alpha)^*$ を満たす。前者は $p_{nn}^\alpha(\mathbf{k}) = m \partial \varepsilon_n(\mathbf{k}) / \partial k_\alpha$ がバンド端で0になるからである。また、後者は系が空間反転対称性を持つことに由来する。整理すると結果的に、

$$\langle \chi_{n\mathbf{k}} | \mathcal{H}_0 | \chi_{n'\mathbf{k}'} \rangle = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \left[\left(\varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) \delta_{nn'} + \frac{\hbar k_\alpha p_{nn'}^\alpha}{m} \right] \quad (2.5.57)$$

となる。

さて、 \mathcal{H}_0 ではなく、SOC 項を含んだ \mathcal{H} の場合を求めたい。この場合には $\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, $\chi_{n\mathbf{k}}$ に対応する $\bar{\phi}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, $\bar{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, $\bar{\chi}_{n\mathbf{k}}$ を定義して、 $p_{nn'}^\alpha$ を次の $\pi_{nn'}^\alpha$ で置き換えればよい [94]。

$$\pi_{nn'}^\alpha = \frac{(2\pi)^3}{\Omega} \int \bar{u}_{n\mathbf{k}_0}(\mathbf{r})^* \left(p^\alpha + \frac{\hbar}{4m} (\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V)_\alpha \right) \bar{u}_{n'\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.5.58)$$

議論の流れも同様に $\mathcal{H} + U$ なるハミルトニアンを同様に考えて、最後に $U = 0$ とすればよい。以降は \mathcal{H} の量として $\bar{\phi}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, $\bar{u}_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, $\bar{\chi}_{n\mathbf{k}}$ を $\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, $\chi_{n\mathbf{k}}$ と書き、 $\pi_{nn'}^\alpha$ を $p_{nn'}^\alpha$ で書くことにする。これらの関係式を用いるとハミルトニアン \mathcal{H} の固有方程式は

$$\sum_{n'} \left[\delta_{nn'} \left(\varepsilon_{n\mathbf{k}_0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right) + \frac{\hbar}{m} \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{nn'} \right] A_{n'}(\mathbf{k}) = \varepsilon A_n(\mathbf{k}) \quad (2.5.59)$$

と変形できる。

Wolff ハミルトニアン

ここでは主に文献 [28] を参考に説明する. (2.5.59) 式を 2 バンドモデルに対して適用する [95]. ただし, バンド端近傍において $\hbar^2 k^2/2m$ が十分に小さいと仮定し, 固有値 ϵ の代わりに E を考える. 伝導帯と価電子帯についてスピンを考慮した基底を A_1, A_2, A_3, A_4 とすると 2 バンドモデルに対して適応したハミルトニアンの固有方程式は次の様に変形できる.

$$\begin{pmatrix} \Delta & 0 & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{t} & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{u} \\ 0 & \Delta & -\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}^* & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{t}^* \\ \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{t}^* & -\hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{u} & -\Delta & 0 \\ \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{u}^* & \hbar\mathbf{k} \cdot \mathbf{t} & 0 & -\Delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} A_1 \\ A_2 \\ A_3 \\ A_4 \end{pmatrix} \quad (2.5.60)$$

ただし, $\epsilon_{1\mathbf{k}_0} = \epsilon_{2\mathbf{k}_0} = \Delta$, $\epsilon_{3\mathbf{k}_0} = \epsilon_{4\mathbf{k}_0} = -\Delta$ を用いた. したがってエネルギーギャップ 2Δ である. 速度演算子 $\mathbf{v}_{nn'}$ を

$$\mathbf{v}_{nn'} = \mathbf{p}_{nn'}/m \quad (2.5.61)$$

とすると反転中心を持つ結晶の波動関数の対称性によって \mathbf{v}_{11} と \mathbf{v}_{22} は 0 であり, $\mathbf{v}_{12,21} = \mathbf{v}_{34,43} = 0$ となる [98]. さらに時間反転対称性と空間反転対称性から,

$$\mathbf{v}_{13} = \mathbf{v}_{42} \equiv \mathbf{t} \quad (2.5.62)$$

$$\mathbf{v}_{14} = -\mathbf{v}_{32} \equiv \mathbf{u} \quad (2.5.63)$$

が成り立ち, 速度演算子の行列表示 \mathbf{t} , \mathbf{u} を定める. (2.5.60) 式は SOC がない場合も含んでいるが, 以降は ($|\mathbf{u}| \simeq |\mathbf{t}|$) とし SOC が大きいことを仮定する. $\text{Re}(\mathbf{t}), \text{Im}(\mathbf{t}), \text{Re}(\mathbf{u}), \text{Im}(\mathbf{u})$ の 4 つの変数を決定することで 2 バンドモデルを指定できる. Wolff は $\text{Re}(\mathbf{t}) = 0$ とする基底を使用することで, 変数を 3 に減らした. この基底に変換することで 2 バンドモデルの固有方程式は次の様に変形される.

$$\mathcal{H} = \Delta\beta + i\hbar\mathbf{k} \cdot \left[\sum_{\mu=1}^3 \mathbf{W}(\mu)\beta\alpha_{\mu} \right] \quad (2.5.64)$$

ただし,

$$\mathbf{W}(1) = \text{Im}(\mathbf{u}) \quad (2.5.65)$$

$$\mathbf{W}(2) = \text{Re}(\mathbf{u}) \quad (2.5.66)$$

$$\mathbf{W}(3) = \text{Im}(\mathbf{t}) \quad (2.5.67)$$

とし, α と β は以下のように定義されるディラック方程式に登場する量である. σ_{μ} はパウリのスピン行列とする.

$$\alpha_{\mu} = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_{\mu} \\ \sigma_{\mu} & 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \quad (2.5.68)$$

\mathcal{H} は Wolff ハミルトニアンと呼ばれる. このハミルトニアンは, 他のバンドからエネルギー的に孤立している伝導帯と価電子帯の 2 バンドで書け, 時間反転対称性と空間反転対称性がある, SOC が強い電子系のハミルトニアンとして有効である. (2.5.64) 式の Wolff ハミ

ルトニアン \mathcal{H} のエネルギー固有値は,

$$E = \pm \sqrt{\Delta^2 + \sum_{\mu=1}^3 [\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{W}(\mu)]^2} \quad (2.5.69)$$

と求められる. このハミルトニアンに次の様な等方的な速度

$$\mathbf{W}(1) = (\gamma, 0, 0) \quad (2.5.70)$$

$$\mathbf{W}(2) = (0, \gamma, 0) \quad (2.5.71)$$

$$\mathbf{W}(3) = (0, 0, \gamma) \quad (2.5.72)$$

を導入すると, 次のような等方的 Wolff ハミルトニアン \mathcal{H}_{iso} が得られる.

$$\mathcal{H}_{\text{iso}} = \begin{pmatrix} \Delta & i\hbar\gamma \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ -i\hbar\gamma \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} & -\Delta \end{pmatrix} \quad (2.5.73)$$

\mathcal{H}_{iso} とディラック方程式 [96] から導出されるハミルトニアンの間にはあるユニタリー変換が存在する. このことから等方的 Wolff ハミルトニアン \mathcal{H}_{iso} は固体中のディラックハミルトニアンと呼ばれる [28].

次に, 磁場中の Wolff 模型について述べる. $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ 理論のおかげで, 磁場の効果は単純な置き換え ($\hbar \mathbf{k} \rightarrow \boldsymbol{\pi} = -i\hbar \nabla + e\mathbf{A}$) により取り入れられる [28, 94]. \mathbf{A} はベクトルポテンシャルであり, 磁束密度 \mathbf{B} と $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ の関係がある. これは基底をブロッホ関数の系列 $\{\phi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\}$ から $\{\chi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\}$ の系列に変換 (または $\{u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})\}$ の系列から $\{u_{n'\mathbf{k}_0}\}$ の系列への変換) したことによる恩恵である. 結果的に次のような磁場中の Wolff ハミルトニアン \mathcal{H} が得られる.

$$\mathcal{H} = \Delta\beta + i\boldsymbol{\pi} \cdot \left[\sum_{\mu=1}^3 \mathbf{W}(\mu)\beta\alpha_{\mu} \right] \quad (2.5.74)$$

$$= \begin{pmatrix} \Delta & i\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\Lambda} \\ -i\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\Lambda} & -\Delta \end{pmatrix} \quad (2.5.75)$$

ただし, $\boldsymbol{\Lambda} = \sum_{\mu=1}^3 \mathbf{W}(\mu)\sigma_{\mu}$ である. このハミルトニアンの固有方程式は \mathcal{H}^2 の固有方程式を考えることで求めることができる.

$$\mathcal{H}^2 \psi = \begin{pmatrix} \Delta^2 + (\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\Lambda})^2 & 0 \\ 0 & \Delta^2 + (\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\Lambda})^2 \end{pmatrix} \psi = E^2 \psi \quad (2.5.76)$$

$(\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\Lambda})^2$ の変形は次のようになる.

$$(\boldsymbol{\pi} \cdot \boldsymbol{\Lambda})^2 = \sum_{ij} (\pi_i \Lambda_i) (\pi_j \Lambda_j) \quad (2.5.77)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{ij} \{ \pi_i (\Lambda_i \Lambda_j + \Lambda_j \Lambda_i) \pi_j + \Lambda_i \Lambda_j [\pi_i, \pi_j] \} \quad (2.5.78)$$

$$= 2\Delta \frac{\boldsymbol{\pi} \cdot \hat{\alpha} \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} - 2\Delta \left(\frac{\hbar e \Omega}{2\Delta} \sum_k \sum_i \sigma_i Q_k(i) B_k \right) \quad (2.5.79)$$

ただし,

$$\mathbf{Q}(i) = \frac{[\mathbf{W}(j) \times \mathbf{W}(k)]}{\Omega} \quad (i, k, j : \text{cyclic}) \quad (2.5.80)$$

$$\Omega = \mathbf{W}(1) \times \mathbf{W}(2) \cdot \mathbf{W}(3) \quad (2.5.81)$$

を用いた. さらに

$$\boldsymbol{\mu}^* = \frac{\hbar e \Omega}{2\Delta} \sum_{\mu} \sigma_{\mu} \mathbf{Q}(\mu) \quad (2.5.82)$$

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{\Delta} \sum_{\mu} W_i(\mu) W_j(\mu) \quad (2.5.83)$$

を定める. $\boldsymbol{\mu}^*$ はバンドの極値付近のスピン磁気モーメントであり, $\hat{\alpha}$ は逆有効質量テンソルである. ハミルトニアンは次の様に変形できる.

$$\mathcal{H}^2 \psi = \begin{pmatrix} \Delta^2 + 2\Delta \mathcal{H}^* & 0 \\ 0 & \Delta^2 + 2\Delta \mathcal{H}^* \end{pmatrix} \psi = E^2 \psi \quad (2.5.84)$$

$$\mathcal{H}^* = \frac{\boldsymbol{\pi} \cdot \hat{\alpha} \cdot \boldsymbol{\pi}}{2} + \boldsymbol{\mu}^* \cdot \mathbf{B} \quad (2.5.85)$$

\mathcal{H}^* は一般的な磁場中電子のハミルトニアンと形が等しい. 第一項はランダウ準位であり, 第二項はゼーマン項である. ただし, 裸の電子に対するゼーマン項ではなく, SOC による電子の軌道運動から生じる有効ゼーマン項である. よって, (2.5.85) 式の第 1 項は,

$$\hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_h^2}{2m_h} \quad (2.5.86)$$

となる [99]. k_h は磁場に並行な波数成分である. また $\omega_c = \frac{eB}{m_c}$ はサイクロトロン振動数である. サイクロトロン有効質量 m_c は

$$m_c = \sqrt{\frac{\det \hat{m}}{m_h}} \quad (2.5.87)$$

である. ここで, $\hat{m} = \hat{\alpha}^{-1}$ は質量テンソルであり, \mathbf{h} を磁場に並行な単位ベクトルとすると, $m_h = \mathbf{h} \cdot \hat{m} \cdot \mathbf{h}$ は磁場方向の有効質量である. (2.5.85) 式の第 2 項であるゼーマン項について変形をすると次のようになる.

$$(\boldsymbol{\mu}^* \cdot \mathbf{B})^2 = \left(\frac{\hbar e \Omega}{2\Delta} \right) \mathbf{B} \cdot \hat{\mathbf{A}} \cdot \mathbf{B} \quad (2.5.88)$$

$$A_{ij} = \sum_{\mu} Q_i(\mu) Q_j(\mu) = \frac{\Delta^2}{\Omega^2} \frac{\hat{m}_{ij}}{\det \hat{m}} \quad (2.5.89)$$

したがって,

$$\boldsymbol{\mu}^* \cdot \mathbf{B} = \pm \frac{\hbar e B}{2} \sqrt{\frac{m_h}{\det \hat{m}}} = \pm \frac{1}{2} \hbar \omega_c \quad (2.5.90)$$

となる. よって, \mathcal{H}^* のエネルギー固有値 E^* は,

$$E^* = \hbar \omega_c \left(n + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_h^2}{2m_h} \quad (2.5.91)$$

となって、 \mathcal{H} のエネルギー固有値 E は、

$$E_{n,\sigma} = \pm \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta \left\{ \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) + \frac{\hbar^2 k_h^2}{2m_h} \right\}} \quad (2.5.92)$$

と求まった。この式から分かる様に、 $E_{l,+}$ と $E_{l+1,-}$ のランダウ準位は縮退している。また、最低ランダウ準位 E_{0-} は磁場に依存しない。自由電子においてはランダウ準位の間隔とゼーマン分裂の間隔が同じあり、軌道とスピンの量子数が独立に状態を指定する。Wolff 電子においてもランダウ準位の間隔 $\hbar\omega_c$ と有効ゼーマン分裂の間隔 $g^* \mu_B B$ ($g^* = \frac{2m}{m_c}$) が同じありが、これらは独立に Wolff 電子の状態を指定しない。これは $E_{l,+}$ と $E_{l+1,-}$ のランダウ準位が縮退していることから分かる。つまり、次で定める j のみが Wolff 電子におけるよい量子数となる。

$$j = n + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \quad (2.5.93)$$

このようになる原因は強いスピン軌道相互作用によって、軌道運動量とスピン角運動量が完全に混ざるためである。

2.5.2 バンド間磁場効果

バンド間磁場効果とは結晶の周期ポテンシャル中を運動する Bloch 電子が結晶の周期性を持たないベクトルポテンシャルの影響を受けてバンド間を行き来する効果のことである。ベクトルポテンシャル \mathbf{A} は Bloch バンド間の行列要素を持つので、単一の Bloch バンドのみに影響を与えるだけでなく、バンド全体に影響を与える。Bloch 表示では周期関数部分と平面波の両方で磁場 \mathbf{A} の効果を取り入れる必要があり計算が複雑になる。しかし、前項で説明したように $k \cdot p$ 理論を用いることにより簡単かつ厳密に磁場効果を取り入れることができる。磁場中の Wolff モデルでは、 $k \cdot p$ 理論を用いて 2 バンド模型に対して磁場の効果を厳密に取り入れたモデルになっている。したがってこのモデルはバンド間磁場効果が考慮されている。磁場 \mathbf{A} によって (2.5.1) 式の非対角項が大きくなり、伝導帯と価電子帯間の遷移確率が大きくなる。つまり、図 2.5.1 のように伝導帯と価電子帯の状態間で電子が飛び移ることになる。よって、フェルミエネルギー近傍の電子だけでなく、フェルミ海の深い所に詰まっている電子も軌道磁性に寄与する。

2.5.3 ディラック電子の磁化率

ビスマスはその合金の反磁性磁化率は通常用いられる次に示す Landau-Peierls(LP) の公式によっては求められない。

$$\chi_{\text{LP}} = \frac{e^2}{6\pi^3 c^2} \sum_{n,\mathbf{k}} \left\{ \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_x^2} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k_y^2} - \left(\frac{\partial^2 E_n}{\partial k_x \partial k_y} \right)^2 \right\} \frac{\partial f(E_n)}{\partial E_n} \quad (2.5.94)$$

それは、それらの電子系は一般にはバンド間磁場効果が大きいとされるディラック電子系であり、LP 公式は後にそれがバンド間磁場効果と関係があると分かるハミルトニアン

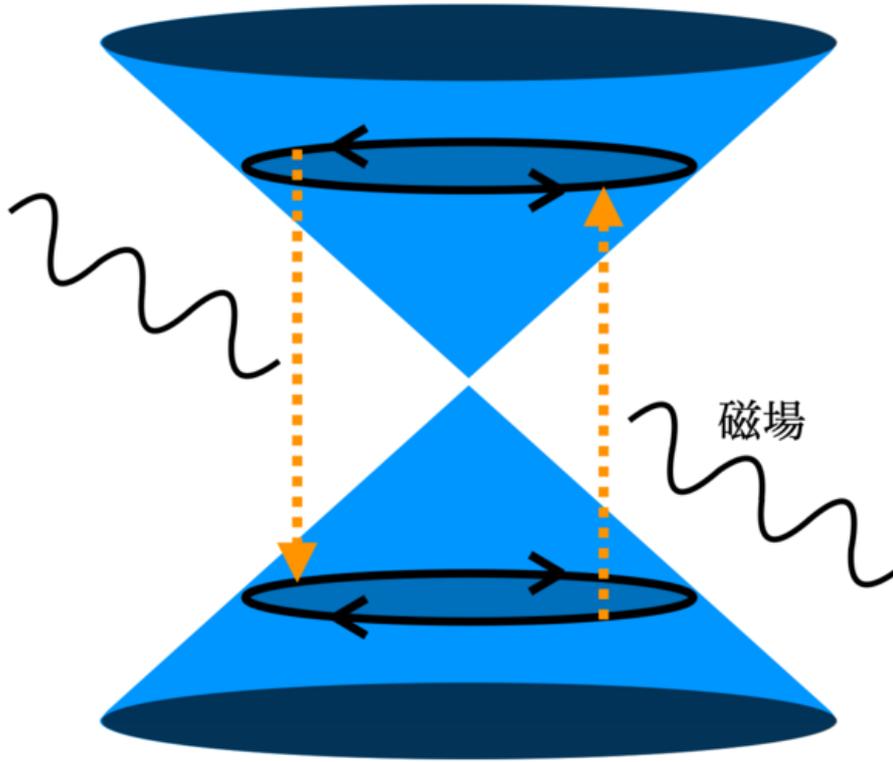


図 2.5.1: バンド間磁場効果の概念図. バンド間磁場効果とは結晶の周期ポテンシャル中で運動する Bloch 電子が結晶の周期性を持たないベクトルポテンシャルの影響を受けてバンド間を行き来する効果のこと. 磁場存在下では特定のバンド内の寄与のみを考えてはならない. 磁場によって伝導帯と価電子帯間の遷移確率が大きくなり伝導帯と価電子帯の状態間で電子が飛び移る様子を表している.

角項を無視するという近似をしていたことに起因する. ビスマスはバンド構造として L 点にディラック電子を持っており [31], バンド間磁場効果がとても大きい物質である. このため, ビスマスの反磁性を説明するには LP 公式は適さなかった. 1970 年に Fukuyama と Kubo によって, バンド間磁場効果も取り入れたビスマスの磁化率が初めて計算された [40]. しかしこの理論は厳密性は保っているものの計算が複雑であった. これを 1971 年に Fukuyama は Bloch 表示ではなく, Luttinger-Kohn 表示を採用することで障壁を乗り越え, バンド間磁場効果も取り入れた磁化率の公式が次の様に求められた [100].

$$\chi = \frac{e^2}{2c^2} T \sum_{n, \mathbf{k}} \text{Tr} [\mathcal{G} v_x \mathcal{G} v_y \mathcal{G} v_x \mathcal{G} v_y] \quad (2.5.95)$$

ここで, n は松原振動数のインデックスを表し, \mathcal{G} は行列形式の温度グリーン関数 $\mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n)$ であり, v_i は i 方向の速度演算子である. スピンの縮退数 2 がトレースに含まれている. これが Fukuyama 公式である. この式をディラック電子に適用することにより, ディラック電子の磁化率を得ることができる. 系がディラック電子の場合に対応する \mathcal{G} と v_i は次の様に

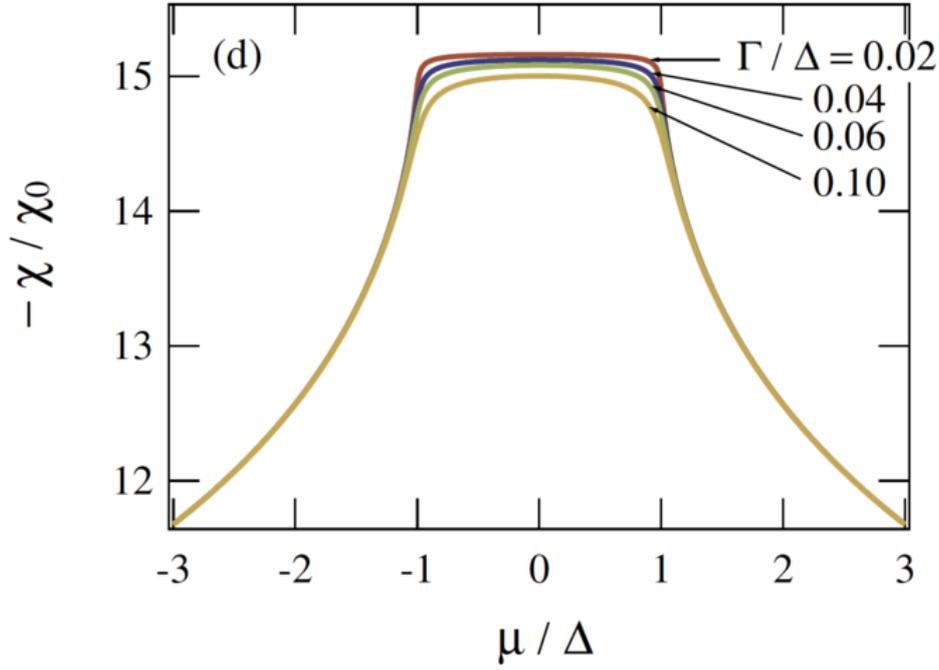


図 2.5.2: ディラック電子の磁化率 χ の化学ポテンシャル依存性 [28]. $|\frac{\mu}{\Delta}| \leq 1$ が絶縁体領域. それ以外が金属領域である. ディラック電子の磁化率は絶縁体領域で最大になる. これは磁化率が状態密度に比例する表式である LP 公式では導出できない結果である.

なる.

$$\mathcal{G}(\mathbf{k}, i\varepsilon_n) = \frac{1}{(i\tilde{\varepsilon}_n)^2 - E^2} \begin{pmatrix} i\tilde{\varepsilon}_n + \Delta & i\gamma \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ -i\gamma \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\sigma} & i\tilde{\varepsilon}_n - \Delta \end{pmatrix}, \quad (2.5.96)$$

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} 0 & i\gamma \boldsymbol{\sigma} \\ -i\gamma \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.5.97)$$

ここで, $E^2 = \Delta^2 + \gamma^2$ である. Γ は不純物散乱の影響を表し, $\tilde{\varepsilon}_n = \varepsilon_n + \Gamma \operatorname{sgn}(\varepsilon_n)$ として表される. Γ が一定であると仮定して計算を進めると次の結果が得られる.

$$\chi = \frac{e^2 |\gamma|}{12\pi^2 c^2} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) \left(\frac{1}{\sqrt{\varepsilon_+^2 - \Delta^2}} - \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_-^2 - \Delta^2}} \right) \quad (2.5.98)$$

ただし, $\varepsilon_{\pm} = \varepsilon \pm i\Gamma$ であり, 平方根のブランチカットは正の実軸に沿って取ることにする. 絶対零度かつ $\Gamma \rightarrow 0$ とするとき, 磁化率の化学ポテンシャル依存性は次の様になる.

$$\chi = \begin{cases} -2\chi_0 \ln \left(\frac{E_c}{|\mu| + \sqrt{\mu^2 - \Delta^2}} \right) & (|\mu| > \Delta) \\ -2\chi_0 \ln \left(\frac{2E_c}{\Delta} \right) & (|\mu| < \Delta) \end{cases} \quad (2.5.99)$$

ここで, $\chi_0 = \frac{e^2 |\gamma|}{12\pi^2 c^2}$ であり, E_c はカットオフエネルギーを表す. (2.5.98) 式を図示したものが図 2.5.2 である. χ は $|\mu| < \Delta$ の場合に最大値を取る. これはバンド間に渡る磁場の効果つまり, バンド間磁場効果に起因している. この様にディラック電子の磁化率は化学ポテンシャルがバンドギャップ中に入り, 状態密度が消失したところでの最大値を示す. LP 公

式によると反磁性磁化率は状態密度に比例するので、LP 公式ではディラック電子の磁化率は正しく導出できないことが分かる。(2.5.95) 式は上述した様に Luttinger-Kohn 表示に基づくものであるが、これを Bloch 表示したものが 2015 年に Ogata と Fukuyama によって示された [101]。これにより Bloch 電子の磁化率が解明された。もともこの Bloch 表示によるバンド間磁場効果を厳密に取り入れた磁化率は Hebborn らによって得られていたが、これらの結果は複雑であり、実際に使用するには非常に困難であった [33, 102, 103]。

ここで、(2.5.99) 式を本論文中の表式に変形しておく。

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = \mu_0 \frac{\partial M}{\partial B} = \mu_0 \frac{\beta \hbar e}{mM} \frac{\partial M}{\partial \Omega_c} \quad (2.5.100)$$

ここで、 $M/M_0 = Q$ (無次元量) とすると、

$$\chi = \mu_0 \frac{\beta \hbar e}{mM} M_0 \frac{\partial Q}{\partial \Omega_c} \quad (2.5.101)$$

$$= \frac{e^2}{\hbar} \frac{\mu_0}{\sqrt{\beta m}} \frac{1}{M} \frac{\partial Q}{\partial \Omega_c} \quad (2.5.102)$$

となる。(2.5.99) 式において等方的 Wolff 模型の場合、 $m_c^* = \frac{\Delta}{\gamma^2}$ であるのでこの場合 χ_0 は、

$$\chi_0 = \frac{e^2}{12\pi^2 c^2} \sqrt{\frac{\Delta}{m_c^*}} \quad (2.5.103)$$

となる。この量の次元を解析すると次の様になる (\cong については付録参照)。

$$\chi_0 \cong \frac{(A \cdot s)^2}{(ms^{-1})^2} \sqrt{\frac{m^2 \cdot \text{kg} \cdot s^{-2}}{kg}} \quad (2.5.104)$$

$$= A^2 \cdot s^2 m^{-1} s \quad (2.5.105)$$

したがって、

$$\chi_0 \mu_0 \frac{1}{\hbar} \cong TM (J \cdot s)^{-1} \quad (2.5.106)$$

$$= TM (m^2 \cdot \text{kg} \cdot s^{-2} \cdot s)^{-1} \quad (2.5.107)$$

$$= TM (L^2 MT^{-1})^{-1} \quad (2.5.108)$$

$$= TML^{-2} M^{-1} T \quad (2.5.109)$$

$$= T^2 L^{-2} \quad (2.5.110)$$

これは c^{-2} の次元と同じである。よって、 χ_0 に対して $c = 1$ とし、 $\frac{\mu_0}{\hbar}$ を乗ずることで、無次元の磁化率 $\bar{\chi}_0$ を得る。

$$\bar{\chi}_0 = \frac{1}{12\pi^2} \frac{e^2 \mu_0}{\hbar} \sqrt{\frac{\Delta}{m_c^*}} \quad (2.5.111)$$

χ_0 を $\bar{\chi}_0$ とし、表式を本論文の文字で書き換えると、

$$\chi = \begin{cases} -2\bar{\chi}_0 \ln \left(\frac{E_c^c}{|\eta| + \sqrt{\eta^2 - \delta^2}} \right) & (|\eta| > \delta) \\ -2\bar{\chi}_0 \ln \left(\frac{2E_c^c}{\delta} \right) & (|\eta| < \delta) \end{cases} \quad (2.5.112)$$

$$\bar{\chi}_0 = \frac{1}{12\pi^2} \frac{\sqrt{\delta}}{\sqrt{M}} \frac{e^2}{\hbar} \frac{\mu_0}{\sqrt{\beta m}} \quad (2.5.113)$$

したがって次の様になる.

$$\chi / \left(\frac{e^2}{\hbar} \frac{\mu_0}{\sqrt{\beta m}} \right) = \begin{cases} \frac{-1}{6\pi^2} \frac{\sqrt{\delta}}{\sqrt{M}} \ln \left(\frac{E_c^c}{|\eta| + \sqrt{\eta^2 - \delta^2}} \right) & (|\eta| > \delta) \\ \frac{-1}{6\pi^2} \frac{\sqrt{\delta}}{\sqrt{M}} \ln \left(\frac{2E_c^c}{\delta} \right) & (|\eta| < \delta) \end{cases} \quad (2.5.114)$$

(2.5.98) 式については

$$\chi = \chi_0 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon f(\varepsilon) \left(\frac{1}{\sqrt{(\varepsilon + i\Gamma)^2 - \Delta^2}} - \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon - i\Gamma)^2 - \Delta^2}} \right) \quad (2.5.115)$$

同様に, χ_0 を $\bar{\chi}_0$ として, 表式を本論文の文字で書き換えると,

$$\chi = \bar{\chi}_0 \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{1}{1 + \exp(E - \eta)} \left(\frac{1}{\sqrt{(E + ir)^2 - \delta^2}} - \frac{1}{\sqrt{(E - ir)^2 - \delta^2}} \right) \quad (2.5.116)$$

よって,

$$\begin{aligned} & \chi / \left(\frac{e^2}{\hbar} \frac{\mu_0}{\sqrt{\beta m}} \right) \\ &= \frac{1}{12\pi^2} \sqrt{\frac{\delta}{M}} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{1}{1 + \exp(E - \eta)} \left(\frac{1}{\sqrt{(E + ir)^2 - \delta^2}} - \frac{1}{\sqrt{(E - ir)^2 - \delta^2}} \right) \end{aligned} \quad (2.5.117)$$

2.5.4 ディラック電子の磁化の起源

弱磁場領域かつ絶対零度の条件下でディラック電子の伝導帯から常磁性寄与が出ることは Koshino と Ando によって最初に記述された [25]. ここでは弱磁場においてディラック電子の伝導帯寄与は常磁性, 自由電子の磁化は反磁性になることを説明する. これを通して弱磁場においてディラック電子の磁化の価電子帯の寄与は反磁性であることも説明する. 最初に, 自由電子とディラック電子の伝導帯寄与に焦点を当てる. 自由電子とディラック電子の伝導帯はどちらも下凸バンドであるが, 両者はエネルギー分散の形の違いに起因して, 弱磁場において自由電子の磁化は反磁性に, ディラック電子の磁化の伝導帯寄与は常磁性になる [28, 104]. $\hbar\omega_c n \leq E_{\perp} \leq \hbar\omega_c(n+1)$ で表現されるエネルギー区間を $I(n)$ とする. 自由電子の場合, 有限磁場でも磁場 0 でも各区間 $I(n)$ の平均エネルギーは変わらない. よって磁場を印加してもフェルミエネルギー以下の深いところの自由エネルギーは不変である. ただし, 最高ランダウ準位のみ自由エネルギーを正にシフトさせる. 磁化は自由エネルギーを磁場で微分し, 符号を変えたものである. よって自由電子の磁化は反磁性になる. $\hbar\omega_c j \leq E_{\perp} \leq \hbar\omega_c(j+1)$ で表現されるエネルギー区間を $I(j)$ とする. ディラック電子の場合は, 有限磁場と磁場 0 では各区間 $I(j)$ の平均エネルギーが異なる. そのためエネルギー全体でエネルギーの利得と損失が相殺されない. 伝導帯は各区間 $I(j)$ において有限磁場での平均エネルギーは磁場 0 での平均エネルギーより低い. よって, 磁場によって伝導帯の自由エネルギーは負にシフトする. 故にディラック電子の伝導帯から常磁性が出る.

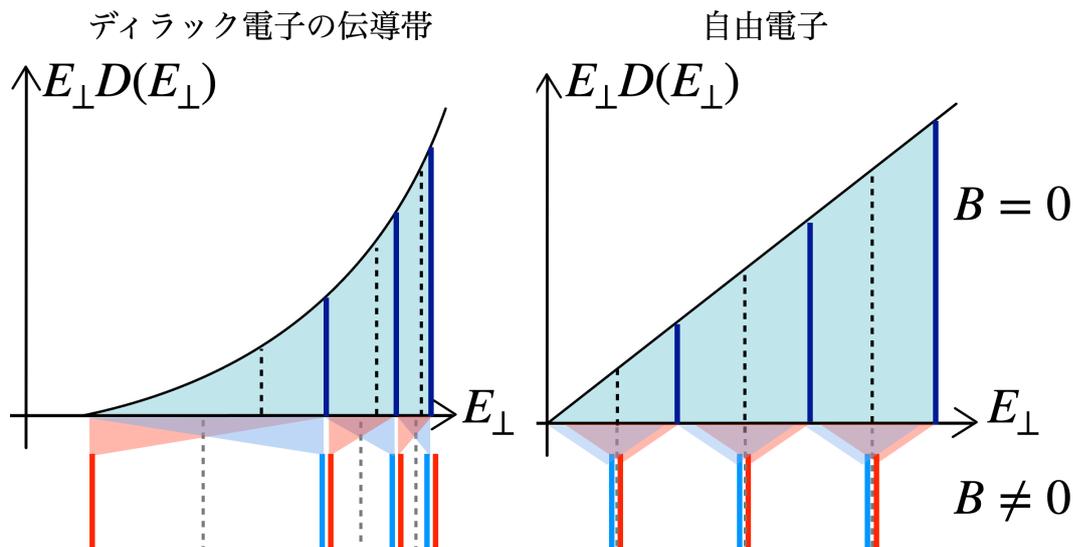


図 2.5.3: 弱磁場における磁化の微視的起源. 左がディラック電子の伝導帯, 右が自由電子に関する図である. 磁場に垂直な 2 次元平面を考える. E_{\perp} はその平面での電子の運動エネルギーであり, $D(E_{\perp})$ はその平面での $B = 0$ における電子の状態密度である. つまり, $E_{\perp}D(E_{\perp})$ は, エネルギー区間 $[E_{\perp}, E_{\perp} + \Delta E_{\perp}]$ におけるエネルギー密度を表す. あるエネルギー区間での積分がその区間でのエネルギーになる. $B \neq 0$ における上向きスピンおよび下向きスピンのランダウ準位は, それぞれ青線と赤線で示す. 2 次元ディラック電子の状態密度は $D(E_{\perp}) \propto E_{\perp}$ であるので, $E_{\perp}D(E_{\perp}) \propto E_{\perp}^2$ である. 2 次元自由電子の場合は $D(E_{\perp}) \propto \text{定数}$ であるので, $E_{\perp}D(E_{\perp}) \propto E_{\perp}$ である. 図の濃い青線は, ディラック電子であれば $\hbar\omega_c j \leq E_{\perp} \leq \hbar\omega_c(j+1)$ で表現されるエネルギー区間 $I(j)$, 自由電子であれば $\hbar\omega_c n \leq E_{\perp} \leq \hbar\omega_c(n+1)$ で表現されるエネルギー区間 $I(n)$ を区分する線である. $B = 0$ における各区間 I でのエネルギー (水色領域) の平均が黒破線で示されている. この水色領域のエネルギーを担う電子は $B \neq 0$ において各ランダウ準位に凝縮する. 各区間 I でのランダウ準位の平均エネルギーを灰色破線で表す. すると, 自由電子では各区間 $I(n)$ における $B = 0$ のエネルギー凝縮前の平均エネルギー (黒破線) と $B \neq 0$ のエネルギー凝縮後の平均エネルギー (灰色破線) が等しい. よって, 磁場を印加してもフェルミエネルギー以下の深いところのエネルギーは不変である. ただし, 最高ランダウ準位のみエネルギーを正にシフトさせる. よって自由電子の磁化は反磁性になる. ディラック電子の伝導帯寄与については各区間 $I(j)$ における $B = 0$ のエネルギー凝縮前の平均エネルギー (黒破線) よりも $B \neq 0$ のエネルギー凝縮後の平均エネルギー (灰色破線) の方が小さい. よって, 全ての区間 $I(j)$ において磁場によって伝導帯のエネルギーは負にシフトする. 故にディラック電子の伝導帯から常磁性が出る. 最後にディラック電子の価電子帯寄与は同様の議論により反磁性が出る.

第3章

自由電子

本研究では等温，等積，等密度の電子系を考える．次のように記述されるよく知られた方法に基づいて，磁化 M を計算した [86]．解析計算の流れは次の通りである．1) 電子系の状態密度を求め．2) キャリア数を求め，3) 数値計算により化学ポテンシャルの磁場依存性を求める．4) ヘルムホルツの自由エネルギーを求め，磁場で微分することで磁化を計算する．まず，電子系の状態密度 $\rho(\epsilon)$ は以下のように与えられる．

$$\rho(\epsilon) = \frac{1}{V} \sum_{n, k_h, \sigma} \delta(\epsilon - \xi_{n, k_h, \sigma}) \frac{eB}{2\pi\hbar} L_x L_y, \quad (3.0.1)$$

ここで， $V(= L_x L_y L_z)$ は系の体積， n はランダウ準位の指標， k_h は磁場に平行な波数， σ はスピン自由度を表し， ξ は状態 (n, k_h, σ) にある電子のエネルギー， e は素電荷， \hbar はディラック定数である． $eB/2\pi\hbar$ はランダウ縮重度に対応する．キャリア数 N は次のように求められる．

$$N = V \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon, \quad (3.0.2)$$

ここで， $f(\epsilon)$ はゼロ磁場におけるフェルミ分布関数を表す．ヘルムホルツ自由エネルギー F は以下のように表される．

$$F = \mu N - \beta^{-1} \sum_{n, k_h, \sigma} \ln(1 + e^{-\beta(\xi - \mu)}) \frac{eB}{2\pi\hbar} L_x L_y, \quad (3.0.3)$$

ここで， μ は化学ポテンシャル， $\beta = 1/k_B T$ ， k_B はボルツマン定数， T は温度である．系の磁化 M は， F を B で微分することで得られる．

$$M = -\frac{1}{V} \frac{\partial F}{\partial B}. \quad (3.0.4)$$

本研究では，ランダウ準位の状態和はオイラーマクローリン展開を用いずそのまま計算をする．オイラーマクローリン展開は弱磁場/高温極限でのみ有効であり [82]，自由エネルギーを磁場と温度の関数として求めることができないからである．なお，ランダウレベルの和の上限は十分大きな値をとるとする．

まず，自由電子の磁化を計算する．ここで化学ポテンシャル μ の磁場 B と温度 T 依存性が特に量子極限で磁化 M に重要な役割を果たすことを示し，しばしば見過ごされている

$\mu(B, T)$ の重要性を説明する．その後次章において本題であるディラック電子の磁化について説明する．

自由電子における化学ポテンシャルは，弱磁場領域においては，磁場に対してほぼ依存しない．しかし，磁場が十分に強く，系が QL に近づいた場合，キャリア数 N を保持するために化学ポテンシャル μ は B によって著しく変化する．この μ の磁場依存性は， M の磁場依存性を大きく変化させる可能性がある．Peierls[80] と Blackman[81] による強磁場における自由電子の軌道磁化に関する2つの先駆的な研究がある．しかし，これらの研究では μ の磁場依存性を考慮していないため QL では有効ではない結果を導いている．さらに，本研究では， μ の温度依存性も考慮した．ここでは， B と T に依存する化学ポテンシャルを $\mu(B, T)$ ， B と T に依存しない固定した化学ポテンシャルを μ_0 と記すことにする．

3.1 状態密度

状態密度は次の様に定義される．

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{V} \sum_{\text{state}} \delta(\varepsilon - \xi_{\text{state}}) \quad (3.1.1)$$

状態 state が n, σ, \mathbf{k} で特徴づけられる場合は次の様に書き下すことができる．

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{V} \sum_{(n, \sigma, \mathbf{k})} \delta(\varepsilon - \xi_{(n, \sigma, \mathbf{k})}) \quad (3.1.2)$$

$$= \frac{1}{V} \sum_{(n, \sigma)} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - \xi_{(n, \sigma, \mathbf{k})}) \quad (3.1.3)$$

$$= \frac{1}{V} \sum_{(n, \sigma)} N_p \sum_{k_z} \delta(\varepsilon - \xi_{(n, \sigma, k_z)}) \quad (3.1.4)$$

ここで $N_p = \frac{eB}{2\pi\hbar} L_x L_y$ とする． $\frac{eB}{2\pi\hbar}$ はランダウ縮重度であるので，これは資料の2次元面 $L_x L_y$ に含まれる状態数を表す．計算を進めると，

$$\rho(\varepsilon) = \frac{1}{V} \sum_{(n, \sigma)} \frac{eB}{2\pi\hbar} L_x L_y \sum_{k_z} \delta(\varepsilon - \xi_{(n, \sigma, k_z)}) \quad (3.1.5)$$

$$= \frac{1}{V} \sum_{(n, \sigma)} \frac{eB}{2\pi\hbar} L_x L_y \frac{L_z}{2\pi} \int dk_z \delta(\varepsilon - \xi_{(n, \sigma, k_z)}) \quad (3.1.6)$$

$$= \sum_{(n, \sigma)} \frac{eB}{2\pi\hbar} \frac{1}{2\pi} \int dk_z \delta(\varepsilon - \xi_{(n, \sigma, k_z)}) \quad (3.1.7)$$

となる．ここで， $\varepsilon - \xi_{(n,\sigma,k_z)} = f(k_z)$ とおき，その解を a_i とする．すると，次の様に書き換えることができる．

$$\rho(\varepsilon) = \frac{eB}{2\pi\hbar} \frac{1}{2\pi} \sum_{(n,\sigma)} \int dk_z \delta(f(k_z)) \quad (3.1.8)$$

$$= \frac{eB}{2\pi\hbar} \frac{1}{2\pi} \sum_{(n,\sigma)} \int dk_z \left(\sum_i \frac{1}{|f'(a_i)|} \delta(k_z - a_i) \right) \quad (3.1.9)$$

$$= \frac{eB}{2\pi\hbar} \frac{1}{2\pi} \sum_{(n,\sigma)} \left(\sum_i \frac{1}{|f'(a_i)|} \right) \quad (3.1.10)$$

自由電子の磁場中の分散は k_z の 2 次であり， $f(k_z)$ の解は ξ 軸に関して対称な 2 点 (これを a と $b = -a$) とする) であるので，次の様に書き換えられる．

$$\rho(\varepsilon) = \frac{eB}{2\pi^2\hbar} \sum_{(n,\sigma)} \frac{1}{|f'(a)|} \quad (3.1.11)$$

また，

$$\frac{1}{|f'(k_z)|} = \frac{1}{\left| \frac{d\xi}{dk_z} \right|} = \left| \frac{dk_z}{d\xi} \right| \quad (3.1.12)$$

に注意すると，

$$\rho(\varepsilon) = \frac{eB}{2\pi^2\hbar} \sum_{(n,\sigma)} \frac{1}{|f'(a)|} \quad (3.1.13)$$

$$= \frac{eB}{2\pi^2\hbar} \sum_{(n,\sigma)} \left| \frac{dk_z}{d\xi} \right|_{k_z=a} \quad (3.1.14)$$

$$= \frac{eB}{2\pi^2\hbar} \sum_{(n,\sigma)} \left| \frac{dk_z}{d\varepsilon} \right| \quad (3.1.15)$$

と変形できる．自由電子の磁場中の分散はランダウ量子化によって $\varepsilon = (n + \frac{1}{2}) \hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$ となるので，これを k_z について解くと，

$$k_z = \pm \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \sqrt{\varepsilon - \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c} \quad (3.1.16)$$

と変形できる．したがって，

$$\left| \frac{dk_z}{d\varepsilon} \right| = \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{1}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon - \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega_c}} \quad (3.1.17)$$

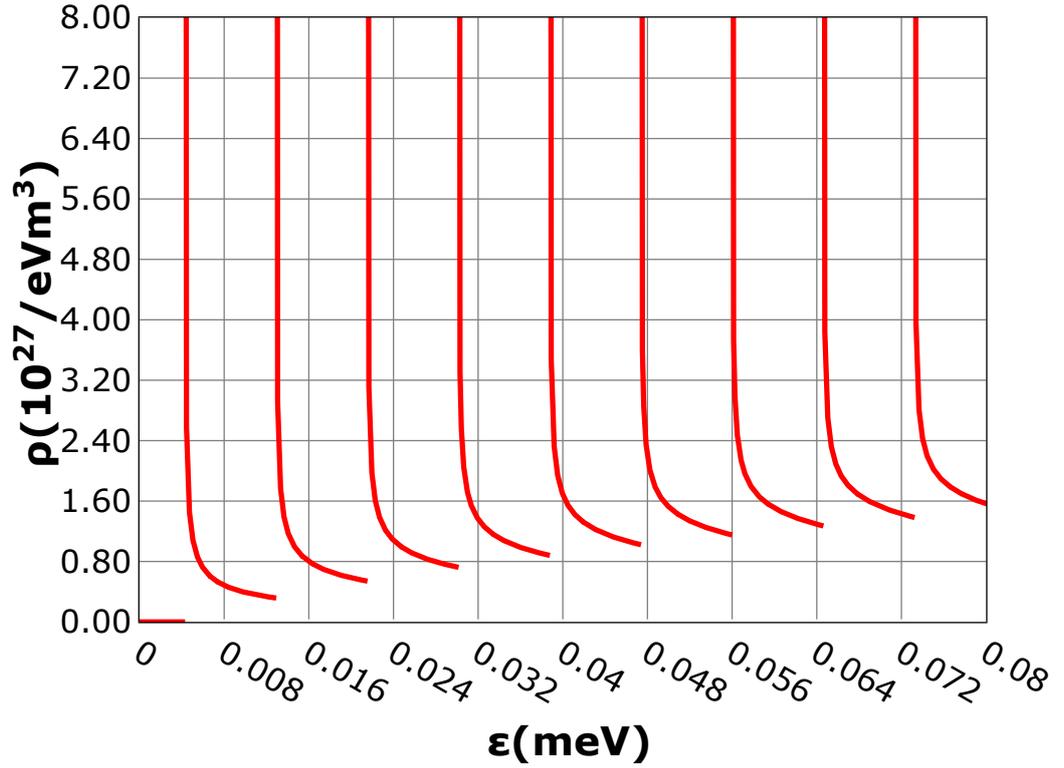


図 3.1.1: 自由電子の状態密度: (3.1.21) 式を用いて, $\Omega_c = 10$, $T = 10\text{K}$ の条件で計算した (磁場が約 74T). 各ランダウサブバンドの底のエネルギーにて状態密度が発散する.

であるので, 自由電子の状態密度は,

$$\rho(\varepsilon) = \frac{eB}{2\pi^2\hbar} \sum_{(n,\sigma)} \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{1}{\hbar} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon - (n + \frac{1}{2}) \hbar\omega_c}} \quad (3.1.18)$$

$$= \frac{eB}{2\pi^2\hbar^2} \sqrt{\frac{m}{2}} \sum_{(n,\sigma)} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon - (n + \frac{1}{2}) \hbar\omega_c}} \quad (3.1.19)$$

$$= \frac{eB}{\pi^2\hbar^2} \sqrt{\frac{m}{2}} \sum_n \frac{1}{\sqrt{\varepsilon - (n + \frac{1}{2}) \hbar\omega_c}} \quad (3.1.20)$$

無次元化すると次の様に整理することができる.

$$\rho(\varepsilon) / \left(\frac{1}{\hbar^3} \sqrt{\frac{m^3}{\beta}} \right) = \frac{1}{\sqrt{2}\pi^2} \Omega_c \sum_n \frac{1}{\sqrt{E - (n + \frac{1}{2}) \Omega_c}} \quad (3.1.21)$$

ただし, 自由電子では次を用いて無次元化する.

$$E = \beta\varepsilon, \quad \eta = \beta\mu, \quad \Omega_c = \beta\hbar\omega_c,$$

$(n + \frac{1}{2}) \Omega_c$ は, 第 n ランダウサブバンドの底のエネルギーを表す. (図 3.1.1) を見るとこのエネルギーで状態密度が発散していることが分かる.

3.2 キャリア密度

(3.0.2) 式と (3.1.20) 式を利用して自由電子のキャリア数を計算すると

$$N/V = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \quad (3.2.1)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{eB}{\pi^2 \hbar^2} \sum_n \frac{1}{\sqrt{\varepsilon - (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c}} \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu)}} d\varepsilon \quad (3.2.2)$$

$$= \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{eB}{\pi^2 \hbar^2} \sum_n \int_{(n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon - (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c}} \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu)}} d\varepsilon \quad (3.2.3)$$

$$= \frac{1}{\hbar^3} \sqrt{\frac{m^3}{\beta^3}} \frac{1}{\sqrt{2\pi^2}} \Omega_c \sum_n \int_{(n + \frac{1}{2}) \Omega_c}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{E - (n + \frac{1}{2}) \Omega_c}} \frac{1}{1 + e^{(E - \eta)}} dE \quad (3.2.4)$$

となる。これを無次元化すると次の様になる。

$$N/N_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi^2}} \Omega_c \sum_n \int_{(n + \frac{1}{2}) \Omega_c}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{E - (n + \frac{1}{2}) \Omega_c}} \frac{1}{1 + e^{(E - \eta)}} dE \quad (3.2.5)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi^2}} \Omega_c \sum_n \int_{(n + \frac{1}{2}) \Omega_c}^{\infty} \frac{\sqrt{E - (n + \frac{1}{2}) \Omega_c}}{\cosh(E - \eta) + 1} dE \quad (3.2.6)$$

ただし、 $N_0 = \frac{V}{\hbar^3} \sqrt{\frac{m^3}{\beta^3}}$ と定める。 $\mu(B, T)$ は N 一定条件下のカノニカルアンサンブル条件のもとで計算することができる (図 3.2.1)。自由電子中では、磁場が強くなるにつれ最低ランダウ準位が上昇するため、 N 一定を保つために $\mu(B)$ は磁場の増加とともに増加する。この様に、カノニカル条件下では、弱磁場領域では化学ポテンシャルは磁場に対して一定であるとみなせるものの、QL の様な強磁場領域ではもはや磁場に対して一定であるという仮定は有効ではなくなる。

3.3 自由エネルギー

自由電子系における自由エネルギーを求める。非相互作用フェルミオン系の熱力学ポテンシャル Ω は、次の様に与えられる。

$$\begin{cases} \Omega = -k_B T \sum_i \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu)} \right) \\ F = \Omega + \mu N \end{cases} \quad (3.3.1)$$

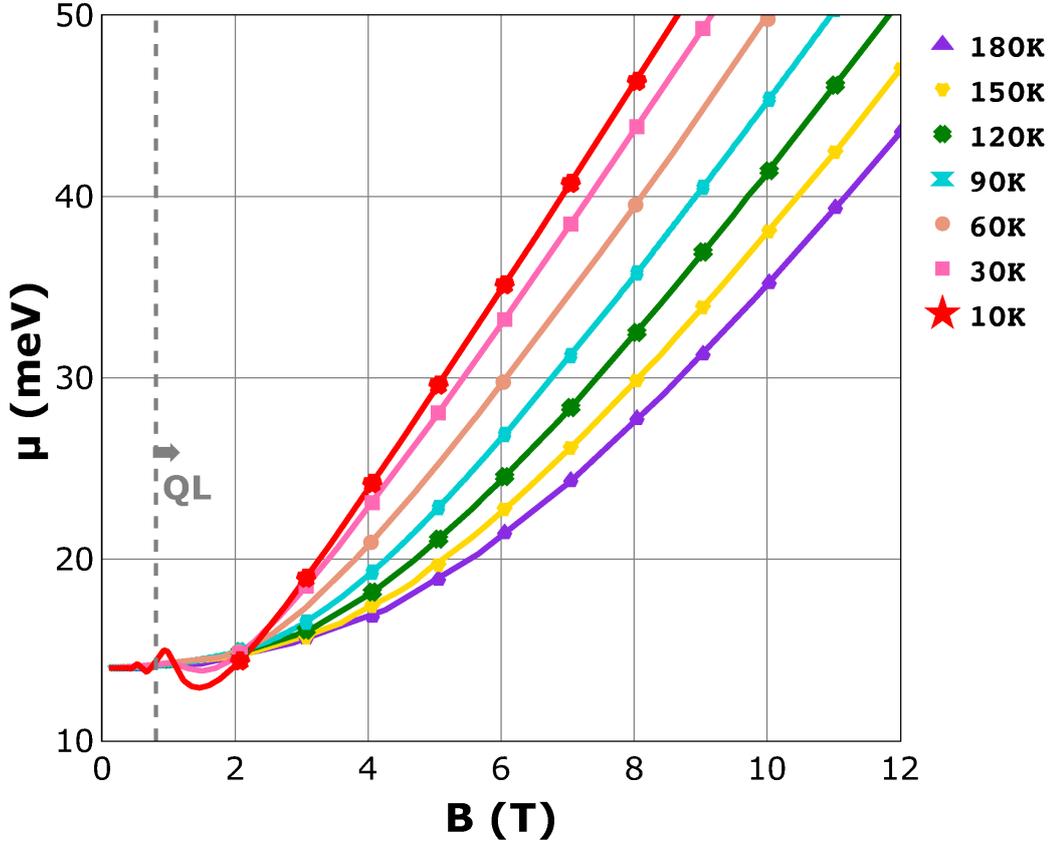


図 3.2.1: 自由電子の化学ポテンシャルの磁場依存性. (3.2.6) 式を用いて, 各温度 ($T = 10, 30, 60, 90, 120, 150, 180\text{K}$) について, 各磁場 B で粒子数 N を一定にする様な化学ポテンシャル μ を数値的に求めた. $B = 0\text{T}$ での化学ポテンシャル μ を 14meV とした. 自由電子のサイクロロン有効質量は通常 m であるが, ディラック電子の場合と比較するため $m/100$ として計算した. 自由電子の化学ポテンシャルは量子極限において上昇する. 自由電子の最低ランダウ準位は磁場に依存し上昇する. カノニカル条件下では, 系のキャリア数 N を一定に保つためには最低ランダウ準位の上昇に合わせて化学ポテンシャル μ は上昇する必要がある.

よって, 磁場中の自由電子系の自由エネルギーは,

$$F = \mu N - k_B T \sum_{(n,\sigma,k_z)} \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon(n,\sigma,k_z) - \mu)} \right) \frac{eB}{2\pi\hbar} L_x L_y \quad (3.3.2)$$

$$= \mu N - k_B T \frac{eB}{2\pi\hbar} L_x L_y L_z \frac{1}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} dk_z \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon(n,\sigma,k_z) - \mu)} \right) \quad (3.3.3)$$

$$= \mu N - k_B T \frac{eBV}{(2\pi)^2 \hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon(n,\sigma,k_z) - \mu)} \right) dk_z \quad (3.3.4)$$

と変形できる．ここで， $\varepsilon(k_z)$ は今偶関数であるので，

$$= \mu N - k_B T \frac{2eBV}{(2\pi)^2 \hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\sigma} \int_0^{\infty} \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon(n, \sigma, k_z) - \mu)} \right) dk_z \quad (3.3.5)$$

$$= \mu N - k_B T \frac{4eBV}{(2\pi)^2 \hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon(n, \sigma, k_z) - \mu)} \right) dk_z \quad (3.3.6)$$

$$= \mu N - k_B T \frac{eBV}{\pi^2 \hbar^2} \sqrt{\frac{m}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\infty} d\varepsilon \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon(n, k_z) - \mu)} \right) \frac{1}{\sqrt{\varepsilon - (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c}} \quad (3.3.7)$$

$$= \mu N - k_B T \frac{eBV}{\pi^2 \hbar^2} \sqrt{\frac{m}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \int_{(n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c}^{\infty} d\varepsilon \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon(n, k_z) - \mu)} \right) \frac{1}{\sqrt{\varepsilon - (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c}} \quad (3.3.8)$$

と求めることができる．さらに無次元化すると次の様になる．

$$F = \mu N - k_B T \frac{eBV}{\pi^2 \hbar^2} \sqrt{\frac{m}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \int_{(n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c}^{\infty} d\varepsilon \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon(n, k_z) - \mu)} \right) \frac{1}{\sqrt{\varepsilon - (n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_c}} \quad (3.3.9)$$

$$= \frac{\eta}{\beta} N - \frac{1}{\beta} \frac{1}{\pi^2} \frac{1}{\hbar^2} \frac{m}{\beta \hbar} \Omega_c V \sqrt{m} \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \int_{(n + \frac{1}{2}) \Omega_c}^{\infty} \frac{1}{\beta} dE \ln \left(1 + e^{-(E(n, k_z) - \eta)} \right) \frac{1}{\sqrt{\frac{E}{\beta} - (n + \frac{1}{2}) \frac{1}{\beta} \Omega_c}} \quad (3.3.10)$$

よって，

$$\beta F = \eta N - N_0 \frac{1}{\sqrt{2} \pi^2} \Omega_c \sum_{n=0}^{\infty} \int_{(n + \frac{1}{2}) \Omega_c}^{\infty} dE \ln \left(1 + e^{-(E(n, k_z) - \eta)} \right) \frac{1}{\sqrt{E - (n + \frac{1}{2}) \Omega_c}} \quad (3.3.11)$$

被積分項に発散項がある．これにより普通の方法で積分を進めることができない．しかし，これを部分積分によって回避することができる．これはブラックマンが示している方法であり，次の様な簡単な部分積分に計算を進めることができる [81]．

$$\beta F = \eta N - N_0 \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \Omega_c \sum_{n=0}^{\infty} \int_{(n + \frac{1}{2}) \Omega_c}^{\infty} dE \frac{\sqrt{E - (n + \frac{1}{2}) \Omega_c}}{e^{(E - \eta)} + 1} \quad (3.3.12)$$

3.4 磁化

まず, $\beta F = R$ とおく. すると (3.0.4) 式より, 自由電子の磁化 M は,

$$M = -\frac{1}{V} \frac{\partial F}{\partial \beta} \quad (3.4.1)$$

$$= -\frac{1}{V} \frac{\partial \left(\frac{R}{\beta} \right)}{\partial \left(\frac{m}{\beta \hbar e} \Omega_c \right)} \quad (3.4.2)$$

$$= -\frac{1}{V} \frac{\hbar e}{m} \frac{\partial R}{\partial \Omega_c} \quad (3.4.3)$$

と $\frac{\partial R}{\partial \Omega_c}$ の計算を進めれば良いことがわかる. よって,

$$\frac{\partial R}{\partial \Omega_c} = \frac{\partial}{\partial \Omega_c} \left\{ \eta N - N_0 \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \Omega_c \sum_{n=0}^{\infty} \int_{(n+\frac{1}{2})\Omega_c}^{\infty} dE \frac{\sqrt{E - (n+\frac{1}{2})\Omega_c}}{e^{(E-\eta)} + 1} \right\} \quad (3.4.4)$$

を計算することになる. $N(B) =$ 一定条件であるので, 化学ポテンシャルは磁場の関数である. つまり, $\eta(\Omega_c)$ であることに注意して以降変形する. $N_0 \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} = W$, $\int_{(n+\frac{1}{2})\Omega_c}^{\infty} dE \frac{\sqrt{E - (n+\frac{1}{2})\Omega_c}}{e^{(E-\eta)} + 1} = W_1$ とすると,

$$\frac{\partial R}{\partial \Omega_c} = \frac{\partial}{\partial \Omega_c} \left\{ \eta N - W \sum_{n=0}^{\infty} \Omega_c W_1 \right\} \quad (3.4.5)$$

$$= \frac{\partial \eta}{\partial \Omega_c} N - W \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial \Omega_c} (\Omega_c W_1) \quad (3.4.6)$$

$$= \frac{\partial \eta}{\partial \Omega_c} N - W \sum_{n=0}^{\infty} \left(W_1 + \Omega_c \frac{\partial W_1}{\partial \Omega_c} \right) \quad (3.4.7)$$

となる. ここで, W_1 に注目すると,

$$W_1 = \int_{(n+\frac{1}{2})\Omega_c}^{\infty} dE \frac{\sqrt{E - (n+\frac{1}{2})\Omega_c}}{e^{(E-\eta)} + 1} \quad (3.4.8)$$

$$= \left[\frac{2}{3} \left(E - \left(n + \frac{1}{2} \right) \Omega_c \right)^{\frac{3}{2}} \frac{1}{e^{(E-\eta)} + 1} \right]_{(n+\frac{1}{2})\Omega_c}^{\infty} - \int_{(n+\frac{1}{2})\Omega_c}^{\infty} \frac{2}{3} \left(E - \left(n + \frac{1}{2} \right) \Omega_c \right)^{\frac{3}{2}} \frac{(-1)e^{(E-\eta)}}{(e^{(E-\eta)} + 1)^2} dE \quad (3.4.9)$$

$$= \frac{1}{3} \int_{(n+\frac{1}{2})\Omega_c}^{\infty} dE \frac{\left(E - \left(n + \frac{1}{2} \right) \Omega_c \right)^{\frac{3}{2}}}{\cosh(E - \eta) + 1} \quad (3.4.10)$$

であるので、 $\frac{\partial W_1}{\partial \Omega_c}$ は次のようになる。ここで Leibniz 則 [105] により、微分と積分の順序を変えた。

$$\frac{\partial W_1}{\partial \Omega_c} = \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial \Omega_c} \left(\int_{(n+\frac{1}{2})\Omega_c}^{\infty} dE \frac{(E - (n + \frac{1}{2})\Omega_c)^{\frac{3}{2}}}{\cosh(E - \eta) + 1} \right) \quad (3.4.11)$$

$$= \frac{1}{3} \int_{(n+\frac{1}{2})\Omega_c}^{\infty} dE \left[\frac{\partial}{\partial \Omega_c} \frac{(E - (n + \frac{1}{2})\Omega_c)^{\frac{3}{2}}}{\cosh(E - \eta) + 1} \right] \quad (3.4.12)$$

を求めることになる。被積分項の微分部分に注目すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \Omega_c} \frac{(E - (n + \frac{1}{2})\Omega_c)^{\frac{3}{2}}}{\cosh(E - \eta) + 1} &= \frac{\partial}{\partial \Omega_c} \frac{(E - (n + \frac{1}{2})\Omega_c)^{\frac{3}{2}}}{\cosh(E - \eta) + 1} \frac{\partial \Omega_c}{\partial \Omega_c} \\ &+ \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{(E - (n + \frac{1}{2})\Omega_c)^{\frac{3}{2}}}{\cosh(E - \eta) + 1} \frac{\partial \eta}{\partial \Omega_c} \end{aligned} \quad (3.4.13)$$

$$\begin{aligned} &= -\frac{3}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{1}{\cosh(E - \eta) + 1} \left(E - \left(n + \frac{1}{2} \right) \Omega_c \right)^{\frac{1}{2}} \\ &+ \left(E - \left(n + \frac{1}{2} \right) \Omega_c \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\sinh(E - \eta)}{(\cosh(E - \eta) + 1)^2} \frac{\partial \eta}{d\Omega_c} \end{aligned} \quad (3.4.14)$$

となる。よって、

$$\begin{aligned} \frac{\partial W_1}{\partial \Omega_c} &= \frac{1}{3} \int_{(n+\frac{1}{2})\Omega_c}^{\infty} dE \left\{ -\frac{3}{2} \left(n + \frac{1}{2} \right) \frac{1}{\cosh(E - \eta) + 1} \left(E - \left(n + \frac{1}{2} \right) \Omega_c \right)^{\frac{1}{2}} \right. \\ &\left. + \left(E - \left(n + \frac{1}{2} \right) \Omega_c \right)^{\frac{3}{2}} \frac{\sinh(E - \eta)}{(\cosh(E - \eta) + 1)^2} \frac{\partial \eta}{d\Omega_c} \right\} \end{aligned} \quad (3.4.15)$$

と $\frac{\partial W_1}{\partial \Omega_c}$ が求まった。 $(n + \frac{1}{2})\Omega_c = \alpha$ とすると、求める磁化 M は、

$$M / \left(\frac{-1 \hbar e}{V m} \right) = \frac{\partial R}{\partial \Omega_c} \quad (3.4.16)$$

$$= \frac{\partial \eta}{\partial \Omega_c} N - W \sum_{n=0}^{\infty} \left(W_1 + \Omega_c \frac{\partial W_1}{\partial \Omega_c} \right) \quad (3.4.17)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\partial \eta}{\partial \Omega_c} N \\ &- N_0 \frac{\sqrt{2}}{3\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \\ &\int_{\alpha}^{\infty} dE \left\{ \frac{(E - \alpha)^{\frac{3}{2}}}{\cosh(E - \eta) + 1} - \frac{3}{2} \alpha \frac{(E - \alpha)^{\frac{1}{2}}}{\cosh(E - \eta) + 1} \right. \\ &\left. + \Omega_c \frac{(E - \alpha)^{\frac{3}{2}} \sinh(E - \eta)}{(\cosh(E - \eta) + 1)^2} \frac{\partial \eta}{\partial \Omega_c} \right\} \end{aligned} \quad (3.4.18)$$

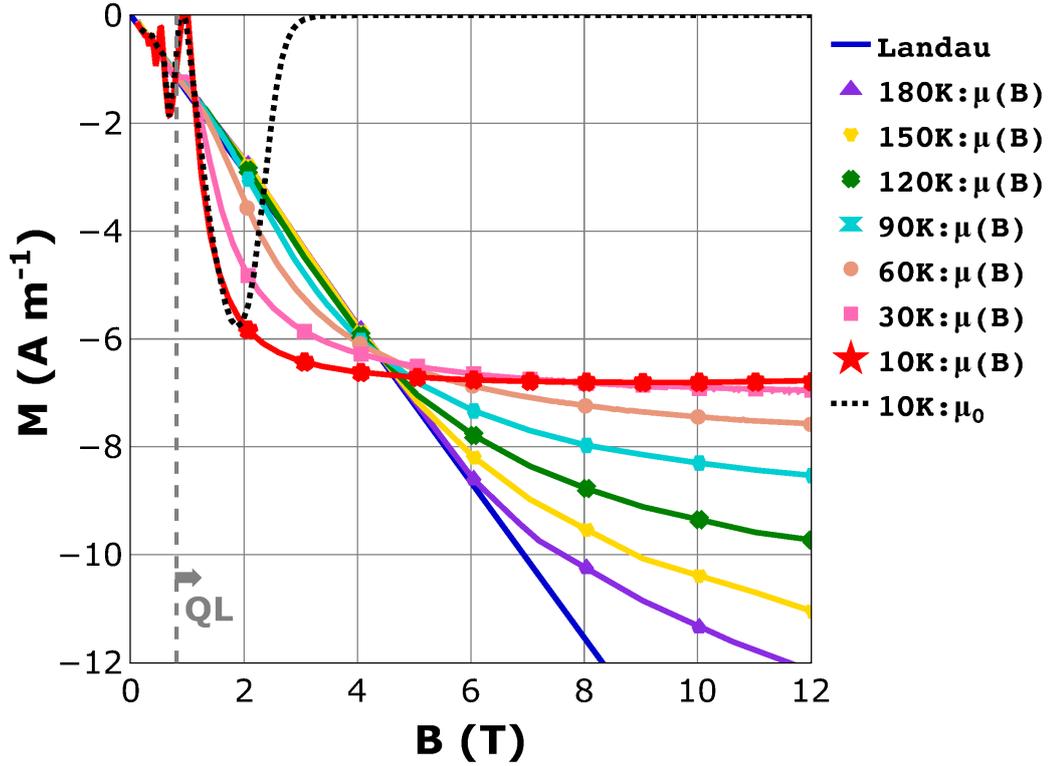


図 3.4.1: 自由電子の磁化の磁場依存性. 磁場と温度に依存する化学ポテンシャル $\mu(B, T)$ を考慮する場合の磁化 (記号付き実線) と磁場と温度の依存を考慮しない化学ポテンシャル μ_0 の場合の磁化 (点線) を示す. 化学ポテンシャルが (B, T) に依存する場合の磁化を求める場合の $\mu(B, T)$ は図 3.2.1 を用い, 両者に依存しない場合は $\mu_0 = 14\text{meV}$ として (3.4.19) 式を用いて計算した. 化学ポテンシャルの磁場と温度依存性の有無は $T = 10\text{K}$ の場合で比較する. 化学ポテンシャルが (B, T) に依存しない場合は, 量子極限で磁化が 0 になるのに対して, 依存する場合は一定値に近づく (6 章で議論する). また, ランダウ反磁性 (青実線) とも比較した. 弱磁場領域では本研究での計算と一致していることが分かる. また, 化学ポテンシャルが (B, T) に依存する場合の磁化は高温になるほどランダウ反磁性に近づいていくことが分かる. これらの計算では, ディラック電子の結果と比較するために, 自由電子のサイクロトロン有効質量は通常 m であるが $m/100$ として計算した.

となる. 整理すると,

$$\begin{aligned}
 M/M_0 &= \frac{-\partial\eta}{\partial\Omega_c} [N/N_0] \\
 &+ \frac{\sqrt{2}}{3\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \int_{\alpha}^{\infty} dE \left\{ \frac{(E-\alpha)^{\frac{1}{2}}(2E-5\alpha)}{2(\cosh(E-\eta)+1)} \right. \\
 &\left. + \Omega_c \frac{(E-\alpha)^{\frac{3}{2}} \sinh(E-\eta)}{(\cosh(E-\eta)+1)^2} \frac{\partial\eta}{\partial\Omega_c} \right\} \quad (3.4.19)
 \end{aligned}$$

と化学ポテンシャルの磁場と温度依存性を考慮した自由電子の磁化を求めることができた. $\frac{\partial\eta}{\partial\Omega_c} = 0$ を代入する, つまり μ の B 依存性を無視すれば, 式 (3.4.19) はブラックマンの反磁性の式と同質の式を得る [81]. 自由電子の M の磁場依存性は, $\mu(B, T)$ と μ_0 の場合でそれぞれ図 3.4.1 に示されている. 弱磁場領域では, 量子振動を除いて, 両方の M がランダウ

の反磁性磁化と一致する。QL を超えると、 μ_0 の場合 M が消失する。これは自由電子において、全てのランダウ準位がエネルギー的に上昇し、最低ランダウ準位 ϵ_0 が $\epsilon_0 \geq \mu_0$ を超えるため、電子が蒸発し、カノニカル条件が明らかに破れるためである。しかし、 μ の B -依存性を適切に考慮すると、 M が消失することはなく、ランダウの反磁性磁化と同様に増加することもない。 M は、低温 $T \lesssim 60$ K では有限の値に飽和する。一方、高温 $T \gtrsim 120$ K では、 M は $\varphi < 1$ であってもランダウの反磁性磁化に近づく。Peierls による研究では、 M が強磁場領域で明らかに増加しているように見える [80]。しかし、この表面的な増加は、狭い磁場範囲のプロットのためである。十分に強い磁場領域においてはこの増加は消えるはずである。なぜなら、Peierls は μ の B -依存性を考慮していなかったからである。

上記のように、 μ の B -依存性は、特に QL で M に重要な役割を果たす。それにもかかわらず、 $\mu(B, T)$ の重要性はしばしば見過ごされているのである。

第4章

ディラック電子

4.1 状態密度

(3.1.10) 式までの状態密度の計算は自由電子の場合と同じである。(3.1.10) 式から再度変形すると,

$$\rho(\varepsilon) = \frac{eB}{2\pi\hbar} \frac{1}{2\pi} \sum_{(n,\sigma)} \left(\sum_i \frac{1}{|f'(a_i)|} \right) \quad (4.1.1)$$

$$= \frac{eB}{2\pi\hbar} \frac{1}{2\pi} \left(\sum_{j=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \left[\frac{1}{|f'(a)|} + \frac{1}{|f'(b)|} \right] \quad (4.1.2)$$

となる。ディラック電子の磁場中のエネルギー分散は,

$$\varepsilon = s \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta \left(j\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_c} \right)} \quad (4.1.3)$$

であるので、これを k_z について解くと,

$$k_z = \pm \frac{\sqrt{2m_c}}{\hbar} \sqrt{\frac{\varepsilon^2 - \Delta^2}{2\Delta} - j\hbar\omega_c} \quad (4.1.4)$$

$$\equiv \begin{cases} a & (> 0) \\ b & (< 0) \equiv -a \end{cases} \quad (4.1.5)$$

となる。すると、 $f'(k_z)$ について

$$f'(k_z) = -\frac{d}{dk_z} E(j, k_z) \quad (4.1.6)$$

$$= -s \frac{\Delta\hbar^2}{m_c} \frac{k_z}{\sqrt{\Delta^2 + 2\Delta \left(j\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m_c} \right)}} \quad (4.1.7)$$

$$(4.1.8)$$

と書けるので,

$$|f'(a)| = |f'(b)| \quad (4.1.9)$$

が成立する。したがって $\rho(\varepsilon)$ は,

$$\rho(\varepsilon) = \frac{eB}{2\pi\hbar} \frac{1}{2\pi} \left(\sum_{j=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \frac{2}{|f'(a)|} \quad (4.1.10)$$

と変形できる。自由電子の場合と同様にして,

$$\rho(\varepsilon) = \frac{eB}{2\pi\hbar} \frac{1}{2\pi} \left(\sum_{j=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) 2 \left| \frac{dk_z}{d\varepsilon} \right| \quad (4.1.11)$$

$$= \frac{B}{\Phi_0} \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{m_c}{\Delta}} \left(\sum_{j=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \frac{|\varepsilon|}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2 - 2\Delta j\hbar\omega_c}} \quad (4.1.12)$$

$$= \frac{eB}{2\pi^2\hbar^2} \sqrt{\frac{m_c}{\Delta}} \left(\sum_{j=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \frac{|\varepsilon|}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2 - 2\Delta j\hbar\omega_c}} \quad (4.1.13)$$

とディラック電子の状態密度が求められた。これは伝導帯と価電子帯によらない表式である。つまり、 s によらず成り立つ。ここで,

$$\frac{eB}{2\pi\hbar} = \frac{B}{\Phi_0^*} = \frac{1}{2} \frac{B}{\Phi_0} \quad (4.1.14)$$

は、ランダウ縮重度を表す。さらに

$$\Phi_0^* = \frac{2\pi\hbar}{e} = \frac{h}{e} \quad (4.1.15)$$

は、磁束量子を表し、 Φ_0 と $\Phi_0^* = 2\Phi_0$ の関係がある。最後に $\rho(\varepsilon)$ を無次元化すると、次のようになる。

$$\rho(\varepsilon) \left/ \left(\frac{1}{\hbar^3} \sqrt{\frac{m^3}{\beta}} \right) \right. = \frac{1}{2\pi^2} \sqrt{M} M \Omega_c \frac{1}{\sqrt{\delta}} \sum_{j=0}^{\infty} \left(\sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \frac{|E|}{\sqrt{E^2 - \alpha}} \quad (4.1.16)$$

ただし、ディラック電子では次のように無次元化を定義する。

$$E = \beta\varepsilon, \quad \eta = \beta\mu, \quad \Omega_c = \beta\hbar\omega_c, \quad M = \frac{m_c}{m}, \quad \delta = \beta\Delta,$$

ここで、 $\alpha = \Delta^2 + 2j\hbar\omega_c\Delta$ であり、この根号は j 番目のランダウサブバンドのバンド端のエネルギーを表す。また状態の総和の上限は十分大きいと仮定する。(4.1.16) 式で示されるように、 $\rho(\varepsilon)$ は各ランダウサブバンドのバンド端で発散することが観察される。

4.2 カットオフ関数の導入

ディラック電子の磁化を計算するためには、エネルギーのカットオフ ε_c を導入することが不可欠である [25, 28, 40]。これは物理量と階段関数との畳み込みを考えることと同義である。弱磁場の場合、簡単な階段関数のカットオフが物理的に正しい磁化を導出するために十分であった。しかし、強磁場においてはこの階段関数のカットオフによって発散項が生じて、

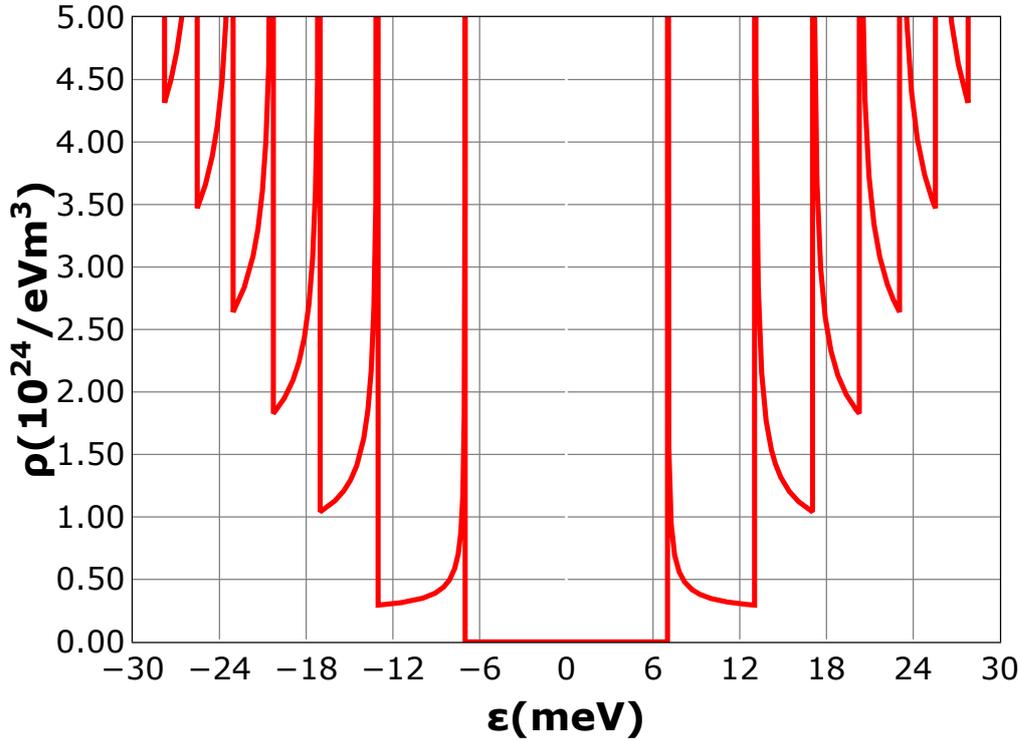


図 4.1.1: ディラック電子状態密度: (4.1.16) 式を用いて, $\Omega_c = 10$, $T = 10\text{K}$ の条件で計算した (磁場が約 0.74T). 伝導帯と価電子帯の状態密度は $\rho = 0$ の軸に関して対称である. 各ランダウサブバンドの底のエネルギーにて状態密度が発散する. バンドギャップでは状態密度は 0 になる.

物理的でない磁場に対する物理量の振動が現れた. 物理的に不適切な振動は, カットオフエネルギーの不連続性から生じるため, 滑らかなカットオフ関数を導入する必要がある. ここでは, 次のように新しい滑らかなカットオフ関数を導入した.

$$C_c(\varepsilon, \varepsilon_c^c) \equiv \frac{1}{2} (\tanh \theta (\varepsilon_c^c - \varepsilon) + 1) \quad (4.2.1)$$

$$C_v(\varepsilon, \varepsilon_c^v) \equiv \frac{1}{2} (\tanh \theta (\varepsilon - \varepsilon_c^v) + 1) \quad (4.2.2)$$

ここで, s は, 導電帯 (価電子帯) の場合, c (v) として読み変える. $\theta/\beta (= \theta kBT)$ は無次元であり, カットオフ関数の滑らかさを決定する. カットオフ関数の模式図は, 図 4.2.2 に示される.

4.3 キャリア密度

4.3.1 伝導帯-キャリア密度 N_c

カットオフ関数がない場合の伝導帯のキャリア密度は次で計算できる.

$$\frac{N_c}{V} = \int_0^\infty \rho(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \quad (4.3.1)$$

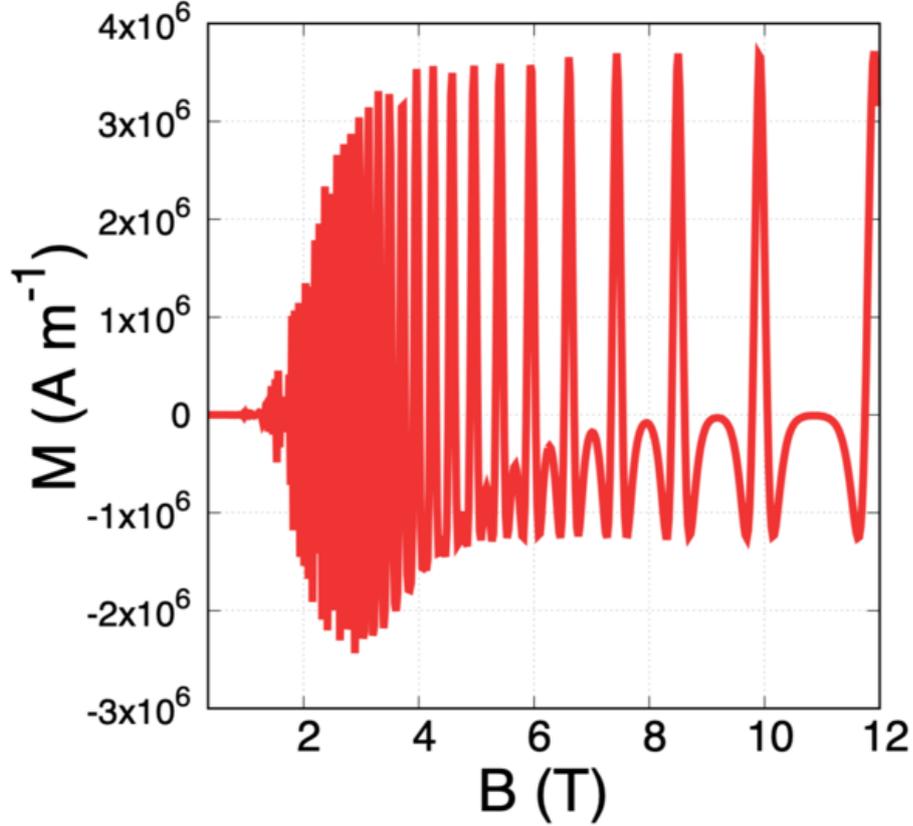


図 4.2.1: 階段関数のカットオフを導入することによる物理的に無意味な磁化 M の振動. 価電子帯の物理量の解析計算をする上で $1/(E - \text{カットオフエネルギー})$ のような因子が出現する. これに由来して物理的に無意味な振動が発生する.

これとカットオフ関数 (4.2.1) 式との畳み込みを計算する. つまり, 次の量を計算することになる.

$$\frac{N_c}{V} = \int_0^\infty \rho(\varepsilon) f(\varepsilon) C_c(\varepsilon, \varepsilon_c^c) d\varepsilon \quad (4.3.2)$$

書き下すと, 次のように変形できる.

$$\begin{aligned} \frac{N_c}{V} &= \int_0^\infty d\varepsilon \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu)}} \frac{1}{2} (\tanh \theta(\varepsilon_c^c - \varepsilon) + 1) \\ &\quad \frac{eB}{2\pi^2 \hbar^2} \sqrt{\frac{m_c}{\Delta}} \left(\sum_{j=0}^0 \sum_{j=1}^\infty \times 2 \right) \frac{|\varepsilon|}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2 - 2j\hbar\omega_c\Delta}} \end{aligned} \quad (4.3.3)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{eB}{4\pi^2 \hbar^2} \sqrt{\frac{m_c}{\Delta}} \left(\sum_{j=0}^0 \sum_{j=1}^\infty \times 2 \right) \\ &\quad \int_{\sqrt{A}}^\infty d\varepsilon \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu)}} (\tanh \theta(\varepsilon_c^c - \varepsilon) + 1) \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 - A}} \end{aligned} \quad (4.3.4)$$

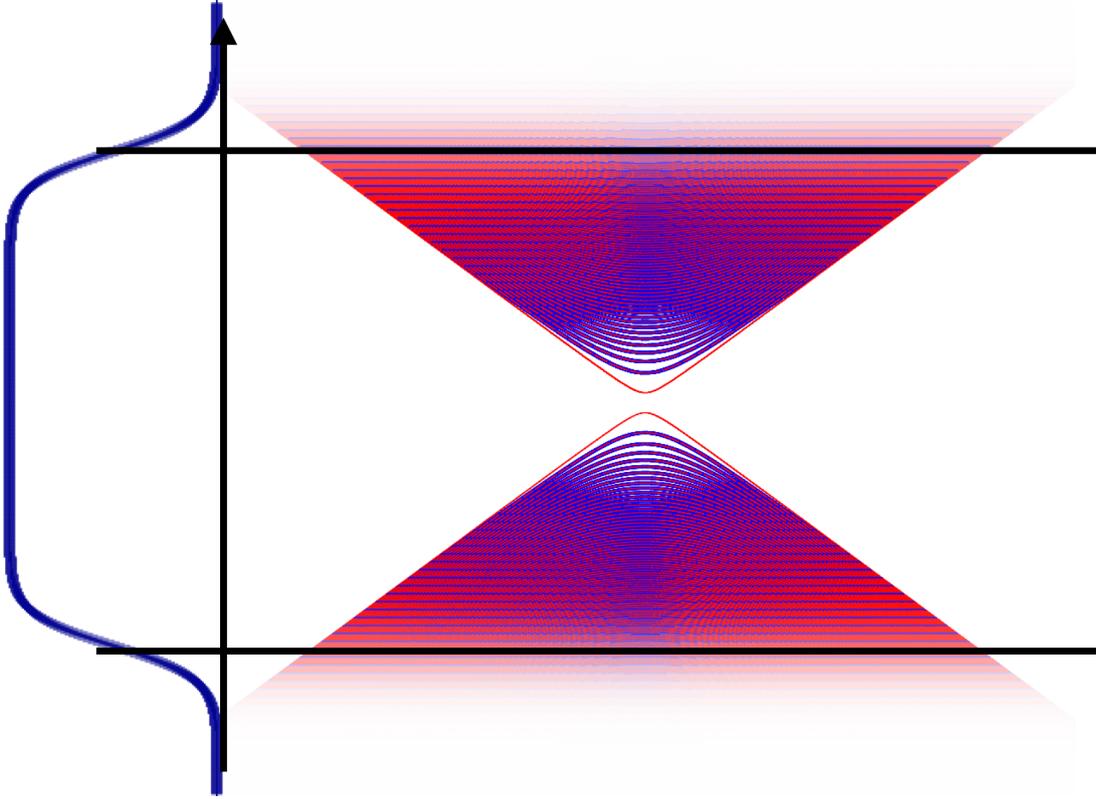


図 4.2.2: 新しく導入したカットオフ関数と磁場下でのディラック電子のエネルギー分散. 赤と青はスピンの違いを表す. カットオフを滑らかにすることでカットオフ由来の自由エネルギーの発散を消すことができる.

ここで $A = 2j\hbar\omega_c\Delta + \Delta^2$ とすし, 各ランダウ準位 j における積分範囲が $[\sqrt{A}, \infty]$ になることに注意した. これの表式を無次元化すると次の様になる.

$$N_c/N_0 = \frac{1}{4\pi^2} \frac{1}{\sqrt{\delta}} M\sqrt{M}\Omega_c \left(\sum_{j=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} dE \frac{1}{1+e^{(E-\eta)}} \frac{E}{\sqrt{E^2-\alpha}} \left(\tanh \frac{\theta}{\beta} (E_c^c - E) + 1 \right) \quad (4.3.5)$$

積分部分を Q とおき, $\Psi_c(E) = \frac{1}{1+e^{(E-\eta)}} \left(\tanh \frac{\theta}{\beta} (E_c^c - E) + 1 \right)$ と定めて Q について計算を続ける.

$$Q = \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \frac{E}{\sqrt{E^2-\alpha}} \Psi_c(E) dE \quad (4.3.6)$$

$$= \left[\sqrt{E^2-\alpha} \Psi_c(E) \right]_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} - \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \sqrt{E^2-\alpha} \Psi_c'(E) dE \quad (4.3.7)$$

$$= - \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \sqrt{E^2-\alpha} \Psi_c'(E) dE \quad (4.3.8)$$

ここで, $\lim_{E \rightarrow \infty} \sqrt{E^2 - \alpha} \Psi_c(E) = 0$ となることを使用した. したがって, 次の様になる.

$$N_c/N_0 = \frac{-1}{4\pi^2} \frac{1}{\sqrt{\delta}} M \sqrt{M} \Omega_c \left(\sum_{j=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \sqrt{E^2 - \alpha} \Psi'_c(E) dE \quad (4.3.9)$$

ただし,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dE} \Psi_c(E) &= \frac{-1}{2(\cosh(E - \eta) + 1)} \left(\tanh \frac{\theta}{\beta} (E_c^c - E) + 1 \right) \\ &\quad + \frac{\theta/\beta}{1 + e^{(E-\eta)}} \left(\left\{ \tanh \frac{\theta}{\beta} (E_c^c - E) \right\}^2 - 1 \right) \end{aligned} \quad (4.3.10)$$

4.3.2 価電子帯-キャリア密度 N_v

カットオフ関数がない場合の価電子帯寄与のキャリア密度は次で計算できる.

$$\frac{N_v}{V} = \int_{-\infty}^0 \rho_D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \quad (4.3.11)$$

これとカットオフ関数 (4.2.2) 式の畳み込みを取ると次の様に変形できる. なお, 状態密度は ε の偶関数, つまり $\rho_D(-\varepsilon) = \rho_D(\varepsilon)$ に注意する.

$$\frac{N_v}{V} = \int_{-\infty}^0 \rho_D(\varepsilon) f(\varepsilon) C_v(\varepsilon, \varepsilon_c^v) d\varepsilon \quad (4.3.12)$$

$$= \int_0^{\infty} \rho_D(-\varepsilon) f(-\varepsilon) C_v(-\varepsilon, \varepsilon_c^v) d\varepsilon \quad (4.3.13)$$

$$\begin{aligned} &= \int_0^{\infty} \frac{e\beta}{2\pi^2 \hbar^2} \sqrt{\frac{m_c}{\Delta}} \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \frac{|\varepsilon|}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2 - 2j\hbar\omega_c\Delta}} \\ &\quad \frac{1}{1 + e^{-\beta(\varepsilon+\mu)}} \frac{1}{2} (\tanh \theta (-\varepsilon - \varepsilon_c^v) + 1) d\varepsilon \end{aligned} \quad (4.3.14)$$

無次元化すると, 次の様に変形できる.

$$\begin{aligned} N_v/N_0 &= \frac{1}{4\pi^2} M \sqrt{M} \frac{1}{\sqrt{\delta}} \Omega_c \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \\ &\quad \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \frac{E}{\sqrt{E^2 - \alpha}} \frac{1}{1 + e^{-(E+\eta)}} \left(\tanh \frac{\theta}{\beta} (-E - E_c^v) + 1 \right) dE \end{aligned} \quad (4.3.15)$$

ここで, $\Psi_v(E) = \frac{1}{1 + e^{-(E+\eta)}} \left(\tanh \frac{\theta}{\beta} (-E - E_c^v) + 1 \right)$ とおき, 伝導帯の計算と同様に部分積分をして被積分関数の発散項を取り除くことで計算を進めることができる.

$$N_v/N_0 = \frac{-1}{4\pi^2} M \sqrt{M} \frac{1}{\sqrt{\delta}} \Omega_c \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \sqrt{E^2 - \alpha} \Psi'_v(E) dE \quad (4.3.16)$$

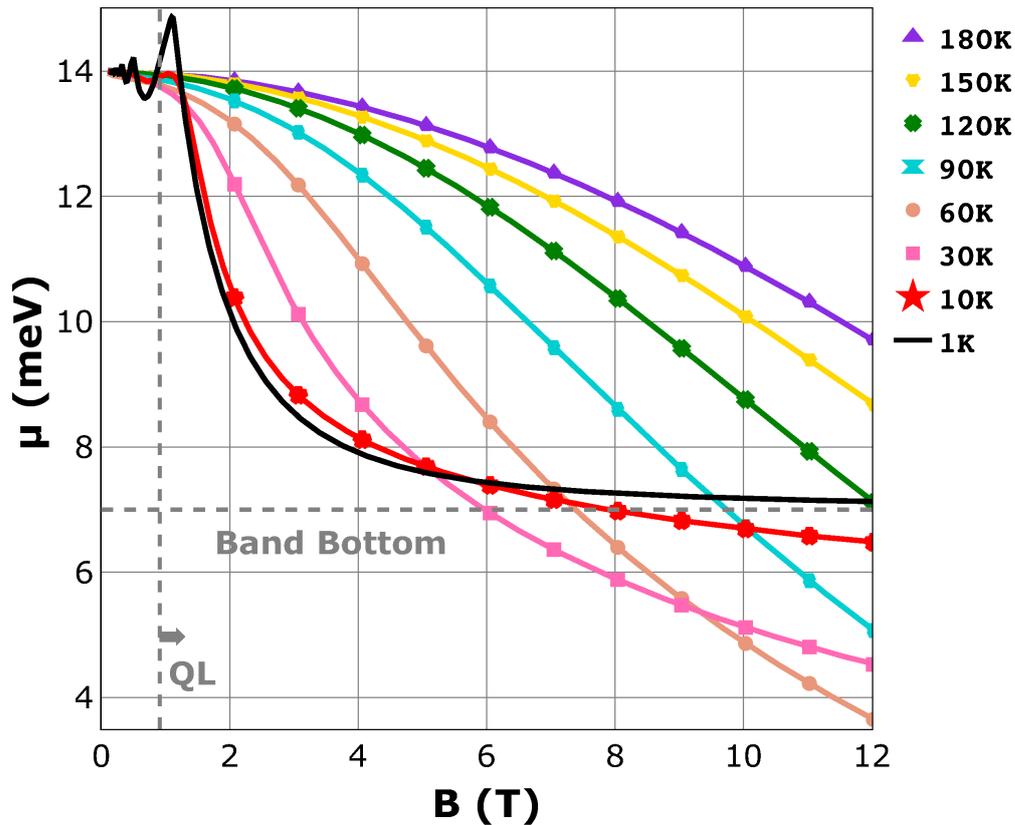


図 4.3.1: 各温度におけるディラック電子の化学ポテンシャルの磁場依存性. $\mu(B=0, T) = 14 \text{ meV}$, $\Delta = 7 \text{ meV}$, $\Lambda = 0.01$ を用いて計算した. バンド端は第 0 ランダウサブバンドのバンド端に対応する. 記号は区別のために表示されている. 上の図では, $0 \leq B \leq 12 \text{ T}$ について 598 点が表示されている. $T = 1 \text{ K}$ の場合, 化学ポテンシャルは QL でエネルギーギャップに入らない (黒実線).

ただし,

$$\begin{aligned} \frac{d}{dE} \Psi_v(E) = & \frac{1}{2(\cosh(E + \eta) + 1)} \left(\tanh \frac{\theta}{\beta} (-E - E_c^v) + 1 \right) \\ & + \frac{\theta/\beta}{1 + e^{-(E+\eta)}} \left(\left\{ \tanh \frac{\theta}{\beta} (-E - E_c^v) \right\}^2 - 1 \right) \end{aligned} \quad (4.3.17)$$

化学ポテンシャル $\mu(B, T)$ の B と T の依存性は, (4.3.10) 式と (4.3.16) 式から各 B と T において $N (= N_c + N_v)$ を一定に保つように各温度 (10 K ~ 180 K) で計算し, 図 4.3.1 に示した. N_v については, $B = 0$ における N_v の値を使用した. また, 以下の計算では, $\theta k B = 0.005 \text{ K}^{-1}$ と設定した. 図 4.3.1 は, 各温度における得られた $\mu(B, T)$ の B 依存性を示してゐる. Landau 準位とカノニカルアンサンブル条件のため, $\mu(B, T)$ は B の増加に伴い減少する. 例えば, 低温 (例: $T = 1 \text{ K}$) では, QL の最低 Landau 準位 ($j = 0$) の伝導帯のバンド端のエネルギーに $\mu(B, T)$ が近づく. 温度が上昇するにつれ, フェルミ分布関数が滑らかになることで, $\mu(B, T)$ は QL のエネルギーギャップに入る.

4.4 自由エネルギー

本研究においてディラック電子の熱力学ポテンシャルを計算する場合、次の (2.4.86) 式を使用している。ここではこの式の導出をすることでこの式を使用する上での仮定を把握する。

まず、グランドカノニカルにおける大分配関数 $\Xi(T, \mu)$ を求める。全系 ($A + B$) は孤立系であり、ミクロカノニカル分布に従うとする。系 A と系 B のエネルギーをそれぞれ E_A と E_B とする。このとき、全系のエネルギーは $E_A + E_B$ である。系 AB 間に相互作用 E_{AB} が働くとき、系 A と系 B の間でエネルギーのやり取りがある。 E_{AB} については次が仮定される。

$$E_{AB} \ll E_A \quad (4.4.1)$$

これは、系 A がマクロであれば満たされる。系 A と系 B の粒子数をそれぞれ N_A, N_B とする。このとき次が成り立つと仮定する。

$$N_A \ll N_A + N_B \quad (4.4.2)$$

$$E_A \ll E_A + E_B \quad (4.4.3)$$

これらは系 A にとっての外界 B が A に比べて十分大きいときに成り立つ。系 B は系 A の粒子浴であるということと同義である。以下、 $E_A = E, N_A = N$ とする。系 A の量子状態を n 、系の粒子数が N 、量子数が n であるときの系 A のエネルギー E を $E_n(N)$ と表す。このとき、系 A が粒子数 N 、エネルギー E を取る確率 $P(N, E)$ は、大分配関数 Ξ を用いて、

$$P(N, E) = \frac{1}{\Xi} \exp[-\beta(E - \mu N)] \quad (4.4.4)$$

$$\Xi(T, \mu) = \sum_N \sum_n \exp[-\beta(E_n(N) - \mu N)] \quad (4.4.5)$$

と表される。ここまで、系 B が系 A の粒子浴である以外の特別な仮定は、系 A のエネルギーがそれと外界 B との相互作用のエネルギーよりも十分に大きいということである。

これを電子系に応用したいので、フェルミオン系の大分配関数 Ξ を求める。求め方は私の知る限り2通りある。1つ目は相互作用のない気体つまり理想気体を仮定し、粒子分布を考えることで Ξ を求める方法である [106]。2つ目は多粒子の粒子一つずつに部分系を定義して (4.4.5) 式を適用する方法である [107]。今回は2つ目の方法を記載する。一つの1粒子状態 i を占める粒子の系を一つの開いた系 O_i とみなす。つまり、粒子1つの系を粒子全体の系の部分系とする。各部分系 O_i の粒子数 n_i は系がフェルミ粒子系なので $n_i = 0, 1$ を満た

す. このとき, 各部分系 O_i の大分配関数は $\Xi_i(T, \mu)$ は,

$$\Xi_i(T, \mu) = \sum_{N=0}^1 \exp[-\beta(E_i(N) - \mu N)] \quad (4.4.6)$$

$$= \sum_{N=0}^1 \exp[-\beta(\varepsilon_i N - \mu N)] \quad (4.4.7)$$

$$= \sum_{N=0}^1 \exp[-\beta(\varepsilon_i - \mu) N] \quad (4.4.8)$$

$$= 1 + \exp[-\beta(\varepsilon_i - \mu)] \quad (4.4.9)$$

である. よって, 粒子全体の系の大分配関数 $\Xi(T, \mu)$ は,

$$\Xi(T, \mu) = \prod_i \Xi_i(T, \mu) \quad (4.4.10)$$

$$= \prod_i (1 + \exp[-\beta(\varepsilon_i - \mu)]) \quad (4.4.11)$$

となる. (4.4.5) 式を使用してこの式を求めているので, 部分系 O_i のエネルギーは, それと部分系 O_i の外界との相互作用のエネルギーよりも十分に大きいことが仮定されていることに注意する. つまり, 各部分系 O_i は互いに弱く相互作用していると仮定されている. 熱力学ポテンシャル Ω は次の様に定義される.

$$\Omega(T, \mu) \equiv -\frac{1}{\beta} \ln \Xi(T, \mu) \quad (4.4.12)$$

よって, フェルミオン系の熱力学関数は,

$$\Omega(T, \mu) = -\frac{1}{\beta} \ln \prod_i (1 + \exp[-\beta(\varepsilon_i - \mu)]) \quad (4.4.13)$$

$$= -\frac{1}{\beta} \sum_i \ln (1 + \exp[-\beta(\varepsilon_i - \mu)]) \quad (4.4.14)$$

となって, (2.4.86) 式が導けた. つまり, 熱力学ポテンシャル (2.4.86) 式の導出には, 部分系のエネルギーが部分系とその部分系の外界との相互作用のエネルギーよりも十分に大きいことが仮定されている.

系が自由電子の場合は, 粒子間に相互作用がないので熱力学ポテンシャル (2.4.86) 式を使用する上での仮定が満たされる. では, 系がディラック電子の場合には使えるか. 結論, ディラック電子の多粒子系の状態を 1 粒子量子状態で記述する枠組みの中では (2.4.86) 式が使用できる. これを次に説明する. それぞれの部分系とそれらとの外界との相互作用が小さいことを仮定することで, それぞれの部分系の量子数が良い量子数になり得ると推測できる. 例えば, 部分系として系 A と系 B を考える. このとき, E_{AB} が大きいとき, 系 A の状態によって系 B のエネルギーに影響を与えてしまい, 系 B の量子状態に影響を与える可能性がある. このとき, 系 A と系 B の量子状態を示す i と j は互いに部分系の良い量子数にならない可能性が考えられる. 部分系とそれらとの外界との相互作用が小さいことを仮定することで, 全体の大分配関数の計算ができる. 実際, 相互作用が小さいことを仮定するこ

とて、系全体の大分配関数は部分系の大分配関数の積として計算できる。これを確率に直すと、全体の確率はそれぞれの部分系がその各々の量子状態をとる確率の積になっている。ここでこの逆を考える。全系が部分系 A と B と C で構成され、それぞれが状態 i, j, k をとるとする。この状態 i, j, k を次で定まる確率変数だと考える。実数 R の中の全ての区間を含む最小の σ 加法族を \mathcal{B} とする。これはボレル集合族という。その任意の元を B_1, B_2, B_3 とする。このとき、状態 i, j, k について次が成り立つとする。

$$P(i^{-1}(B_1) \cap j^{-1}(B_2) \cap k^{-1}(B_3)) = P(i^{-1}(B_1)) P(j^{-1}(B_2)) P(k^{-1}(B_3)) \quad (4.4.15)$$

これは、事象 $i^{-1}(B_1), j^{-1}(B_2), k^{-1}(B_3)$ の積事象が起こる確率はそれぞれの事象が起こる確率の積であることを意味する。つまり、これが成り立つとき、確率変数である状態 i, j, k は独立であることを意味し、各部分系は独立に色々な量子状態を取り得ることを意味する。よって、部分系とそれらとの外界との相互作用が小さいことは、部分系ごとに良い量子数が定義できることと同値であると考えられる。系 A と系 B で考えてみる。

$$E_{AB} \ll E_A, E_B \quad (4.4.16)$$

とは系 A と B がエネルギー的に独立であるということの意味しているのである。したがって、部分系 A と B に良い量子状態 i, j が定義できる。各部分系の量子状態を仮定しているとき、既に各部分系がエネルギー的に独立である。つまり部分系間の相互作用は各部分系のエネルギーに比べて小さいと仮定しているのである。多粒子系の状態を1粒子量子状態で記述するときには、粒子ひとつのみの部分系での量子数が仮定されているので、部分系間の相互作用は各部分系のエネルギーに比べて小さいと仮定している、つまり粒子間の相互作用が小さいと仮定していることなる。したがって、多粒子系の状態を1粒子量子状態で記述する枠組みの中ではいつでも熱力学ポテンシャル (2.4.86) 式が使用できると考えられる。

4.4.1 伝導帯-自由エネルギー- F_c

熱力学ポテンシャル Ω とカットオフ関数の畳み込みを考える。

$$\Omega = -k_B T \sum_i \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu)} \right) C_c(\varepsilon, \varepsilon_c^c) \quad (4.4.17)$$

$$F = \Omega + \mu N \quad (4.4.18)$$

よって、体積 $V = L_x L_y L_z$ 中の磁場中のディラック電子系の伝導帯の自由エネルギーは次のようになる。

$$F_c = \mu N - k_B T \sum_{(n, \sigma, k_z)} \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon(n, \sigma, k_z) - \mu)} \right) C_c(\varepsilon, \varepsilon_c^c) \frac{eB}{2\pi\hbar} L_x L_y \quad (4.4.19)$$

$$= \mu N - k_B T \frac{eBV}{(2\pi)^2 \hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon(n, \sigma, k_z) - \mu)} \right) C_c(\varepsilon, \varepsilon_c^c) dk_z \quad (4.4.20)$$

$$= \mu N - k_B T \frac{2eBV}{(2\pi)^2 \hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\sigma} \int_{\sqrt{A}}^{\infty} \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon - \mu)} \right) C_c(\varepsilon, \varepsilon_c^c) \frac{dk_z}{d\varepsilon} d\varepsilon \quad (4.4.21)$$

ここで, $\varepsilon(n, \sigma, k_z)$ が k_z の偶関数であることに注意する. また, 積分について変数変換した. なお, $\frac{dk_z}{d\varepsilon}$ は伝導帯, 価電子帯によらず次の形で与えられる.

$$\frac{dk_z}{d\varepsilon} = \pm \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m_c}{\Delta}} \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2 - 2j\hbar\omega_c\Delta}} \quad (4.4.22)$$

符号は $+(k > 0)$, $-(k < 0)$ であることに注意する. よって, 次の様に熱力学ポテンシャル Ω の伝導帯寄与が書き換えられる.

$$F_c = \mu N - k_B T \frac{2eBV}{(2\pi)^2 \hbar^2} \sqrt{\frac{m_c}{\Delta}} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\sigma} \int_{\sqrt{A}}^{\infty} \ln(1 + e^{-\beta(\varepsilon - \mu)}) C_c(\varepsilon, \varepsilon_c^c) \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 - A}} d\varepsilon \quad (4.4.23)$$

さらにこれを無次元化した表式に書き直すと次に様になる.

$$\beta F_c = \eta N - N_0 \frac{1}{(2\pi)^2} \Omega_c M \sqrt{M} \frac{1}{\sqrt{\delta}} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\sigma} \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \ln(1 + e^{-(E - \eta)}) \left(\tanh \frac{\theta}{\beta} (E_c^c - E) + 1 \right) \frac{E}{\sqrt{E^2 - \alpha}} dE \quad (4.4.24)$$

積分部分を一時的に Q_1 , $\Psi_c(E) = \ln(1 + e^{-(E - \eta)}) \left(\tanh \frac{\theta}{\beta} (E_c^c - E) + 1 \right)$ とおく. ここで, 自由電子の計算と同様に, 被積分関数の発散項を部分積分により取り除くことにより, 被積分関数を発散しない形に変形できる.

$$Q_1 = \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \Psi_c(E) \frac{E}{\sqrt{E^2 - \alpha}} dE \quad (4.4.25)$$

$$= \left[\sqrt{E^2 - \alpha} \Psi_c(E) \right]_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} - \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \sqrt{E^2 - \alpha} \Psi_c'(E) dE \quad (4.4.26)$$

$$(4.4.27)$$

次の積分 (付録参照) を使用してさらに部分積分をする. ここで略記のために $P(E)$ を定義する.

$$\int \sqrt{E^2 - \alpha} dE = \frac{1}{2} \left[E \sqrt{E^2 - \alpha} - \alpha \ln \left| E + \sqrt{E^2 - \alpha} \right| \right] + C \quad (4.4.28)$$

$$\equiv P(E) + C \quad (4.4.29)$$

したがって, 次の様に変形できる.

$$Q_1 = - \left[P(E) \Psi_c'(E) \right]_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} + \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} P(E) \Psi_c''(E) dE \quad (4.4.30)$$

さらに $\lim_{E \rightarrow \infty} P(E) \Psi_c'(E) = 0$ であるので,

$$Q_1 = P(\sqrt{\alpha}) \Psi_c'(\sqrt{\alpha}) + \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} P(E) \Psi_c''(E) dE \quad (4.4.31)$$

よって、伝導帯の自由エネルギー βF_c は次の様に求まる。

$$\beta F_c = \eta N - N_0 \frac{1}{(2\pi)^2} \Omega_c M \sqrt{M} \frac{1}{\sqrt{\delta}} \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \left\{ P(\sqrt{\alpha}) \Psi'_c(\sqrt{\alpha}) + \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} P(E) \Psi''_c(E) dE \right\} \quad (4.4.32)$$

$$= \eta N - N_0 \frac{1}{8\pi^2} \Omega_c M \sqrt{M} \frac{1}{\sqrt{\delta}} \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \left[-\alpha \ln \sqrt{\alpha} \Psi'_c(\sqrt{\alpha}) + \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \left[E \sqrt{E^2 - \alpha} - \alpha \ln \left| E + \sqrt{E^2 - \alpha} \right| \right] \Psi''_c(E) dE \right] \quad (4.4.33)$$

4.4.2 価電子帯-自由エネルギー F_v

伝導帯の場合と同様に、熱力ポテンシャルとカットオフ関数の畳み込みを考える。価電子帯寄与の非相互作用系フェルミオン系の熱力学ポテンシャルは Ω_v は次の様に定義される。

$$\Omega_v = -k_B T \sum_i \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon_i - \mu)} \right) C_v(\varepsilon, \varepsilon_c^v) \quad (4.4.34)$$

$$F = \Omega + \mu N \quad (4.4.35)$$

よって、体積 $V = L_x L_y L_z$ 中の磁場中のディラック電子系の価電子帯の自由エネルギーは次の様になる。

$$F_v = \mu N - k_B T \sum_{(n, \sigma, k_z)} \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon(n, \sigma, k_z) - \mu)} \right) C_v(\varepsilon, \varepsilon_c^v) \frac{eB}{2\pi\hbar} L_x L_y \quad (4.4.36)$$

$$= \mu N - k_B T \frac{2eBV}{(2\pi)^2 \hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\sigma} \int_0^{\infty} \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon(n, \sigma, k_z) - \mu)} \right) C_v(\varepsilon, \varepsilon_c^v) dk_z \quad (4.4.37)$$

$$= \mu N - k_B T \frac{2eBV}{(2\pi)^2 \hbar} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\sigma} \int_{-\sqrt{A}}^{-\infty} \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon - \mu)} \right) C_v(\varepsilon, \varepsilon_c^v) \frac{dk_z}{d\varepsilon} d\varepsilon \quad (4.4.38)$$

ここで、 $\varepsilon(n, \sigma, k_z)$ が k_z の偶関数であることに注意する。また、積分について変数変換した。なお、 $\frac{dk_z}{d\varepsilon}$ は伝導帯、価電子帯によらず次の形で与えられる。

$$\frac{dk_z}{d\varepsilon} = \pm \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m_c}{\Delta}} \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2 - 2j\hbar\omega_c\Delta}} \quad (4.4.39)$$

符号は $+(k > 0)$, $-(k < 0)$ である。次の様に熱力学ポテンシャル Ω の価電子帯寄与が書き換えられる。

$$F_v = \mu N - k_B T \frac{2eBV}{(2\pi)^2 \hbar^2} \sqrt{\frac{m_c}{\Delta}} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\sigma} \int_{-\sqrt{A}}^{-\infty} \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon - \mu)} \right) C_v(\varepsilon, \varepsilon_c^v) \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 - A}} d\varepsilon \quad (4.4.40)$$

これを無次元化した表式に書き直すと次の様になる。

$$\beta F_v = \eta N - N_0 \frac{1}{(2\pi)^2} \Omega_c M \sqrt{M} \frac{1}{\sqrt{\delta}} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\sigma} \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \ln(1 + e^{(E+\eta)}) \left(\tanh \frac{\theta}{\beta} (-E - E_c^v) + 1 \right) \frac{E}{\sqrt{E^2 - \alpha}} dE \quad (4.4.41)$$

積分部分を一時的に Q_2 , $\Psi_v(E) = \ln(1 + e^{(E+\eta)}) \left(\tanh \frac{\theta}{\beta} (-E - E_c^v) + 1 \right)$ とおく。

$$Q_2 = \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \Psi_v(E) \frac{E}{\sqrt{E^2 - \alpha}} dE \quad (4.4.42)$$

$$= \left[\sqrt{E^2 - \alpha} \Psi_v(E) \right]_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} - \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \sqrt{E^2 - \alpha} \Psi_v'(E) dE \quad (4.4.43)$$

$$= \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \sqrt{E^2 - \alpha} \Psi_v'(E) dE \quad (4.4.44)$$

ここで $\lim_{E \rightarrow \infty} \sqrt{E^2 - \alpha} \Psi_v(E) = 0$ であることを用いた。次の積分を使用して部分積分をする。ここで略記のために $P(E)$ を定義する。

$$\int \sqrt{E^2 - \alpha} dE = \frac{1}{2} \left[E \sqrt{E^2 - \alpha} - \alpha \ln \left| E + \sqrt{E^2 - \alpha} \right| \right] + C \quad (4.4.45)$$

$$\equiv P(E) + C \quad (4.4.46)$$

したがって、次の様に変形できる。

$$Q_2 = - [P(E) \Psi_v'(E)]_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} + \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} P(E) \Psi_v''(E) dE \quad (4.4.47)$$

$\lim_{E \rightarrow \infty} P(E) \Psi_v'(E) = 0$ であるので、

$$Q_2 = P(\sqrt{\alpha}) \Psi_v'(\sqrt{\alpha}) + \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} P(E) \Psi_v''(E) dE \quad (4.4.48)$$

よって、価電子帯の自由エネルギー βF_v は次の様に求まる。

$$\beta F_v = \eta N - N_0 \frac{1}{(2\pi)^2} \Omega_c M \sqrt{M} \frac{1}{\sqrt{\delta}} \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \left\{ P(\sqrt{\alpha}) \Psi_v'(\sqrt{\alpha}) + \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} P(E) \Psi_v''(E) dE \right\} \quad (4.4.49)$$

$$= \eta N - N_0 \frac{1}{8\pi^2} \Omega_c M \sqrt{M} \frac{1}{\sqrt{\delta}} \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \left[-\alpha \ln \sqrt{\alpha} \Psi_v'(\sqrt{\alpha}) + \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \left[E \sqrt{E^2 - \alpha} - \alpha \ln \left| E + \sqrt{E^2 - \alpha} \right| \right] \Psi_v''(E) dE \right] \quad (4.4.50)$$

4.5 磁化

伝導帯-磁化数値計算 M_c

カットオフ関数を含む自由エネルギーの磁場微分を解析計算することはできない。ここでは、伝導帯寄与の磁化を自由エネルギーから数値計算で磁場微分することで求める。

$N = \text{一定}$ かつ $\frac{\partial \eta}{\partial \Omega_c} = 0$ ($\eta(\Omega_c) = \text{一定}$) の条件を C. とおく. まず, グランドカノニカル条件下での磁化 M_c を数値計算する表式を導く. そして特別な場合として条件 C. における磁化 M_c を数値計算によって求める表式を求める. まず, $R = \beta F_c$ とおくと, 磁化の伝導帯寄与 M_c は,

$$M_c = -\frac{1}{V} \frac{\partial F_c}{\partial B} \quad (4.5.1)$$

$$= -\frac{1}{V} \frac{\hbar e}{m_c} \frac{\partial R}{\partial \Omega_c} \quad (4.5.2)$$

となる. そこで, $\frac{\partial R}{\partial \Omega_c}$ に注目して,

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial \Omega_c} = & \frac{\partial \eta}{\partial \Omega_c} N - N_0 \frac{1}{8\pi^2} M \sqrt{M} \frac{1}{\sqrt{\delta}} \frac{\partial}{\partial \Omega_c} \left\{ \Omega_c \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \right. \\ & \left. \left[-\alpha \ln \sqrt{\alpha} \Psi'_c(\sqrt{\alpha}) + \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \left[E \sqrt{E^2 - \alpha} - \alpha \ln |E + \sqrt{E^2 - \alpha}| \right] \Psi''_c(E) dE \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.5.3)$$

となる. よって, 条件 C. の下では,

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial \Omega_c}(C.) = & -N_0 \frac{1}{8\pi^2} M \sqrt{M} \frac{1}{\sqrt{\delta}} \frac{\partial}{\partial \Omega_c} \left\{ \Omega_c \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \right. \\ & \left. \left[-\alpha \ln \sqrt{\alpha} \Psi'_c(\sqrt{\alpha}) + \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \left[E \sqrt{E^2 - \alpha} - \alpha \ln |E + \sqrt{E^2 - \alpha}| \right] \Psi''_c(E) dE \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.5.4)$$

となる. したがって, 条件 C. 下での磁化 $M_c(C.)$ は,

$$M_c(C.) = -\frac{1}{V} \frac{\hbar e}{m_c} \frac{\partial R}{\partial \Omega_c}(C.) \quad (4.5.5)$$

$$\begin{aligned} = & M_0 \frac{1}{8\pi^2} \sqrt{M} \frac{1}{\sqrt{\delta}} \frac{\partial}{\partial \Omega_c} \left\{ \Omega_c \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \right. \\ & \left. \left[-\alpha \ln \sqrt{\alpha} \Psi'_c(\sqrt{\alpha}) + \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \left[E \sqrt{E^2 - \alpha} - \alpha \ln |E + \sqrt{E^2 - \alpha}| \right] \Psi''_c(E) dE \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.5.6)$$

整理すると次の様になる.

$$\begin{aligned} M_c(C.) / M_0 = & \frac{\partial}{\partial \Omega_c} \left\{ \frac{1}{8\pi^2} \sqrt{M} \frac{1}{\sqrt{\delta}} \Omega_c \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \right. \\ & \left. \left[-\alpha \ln \sqrt{\alpha} \Psi'_c(\sqrt{\alpha}) + \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \left[E \sqrt{E^2 - \alpha} - \alpha \ln |E + \sqrt{E^2 - \alpha}| \right] \Psi''_c(E) dE \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.5.7)$$

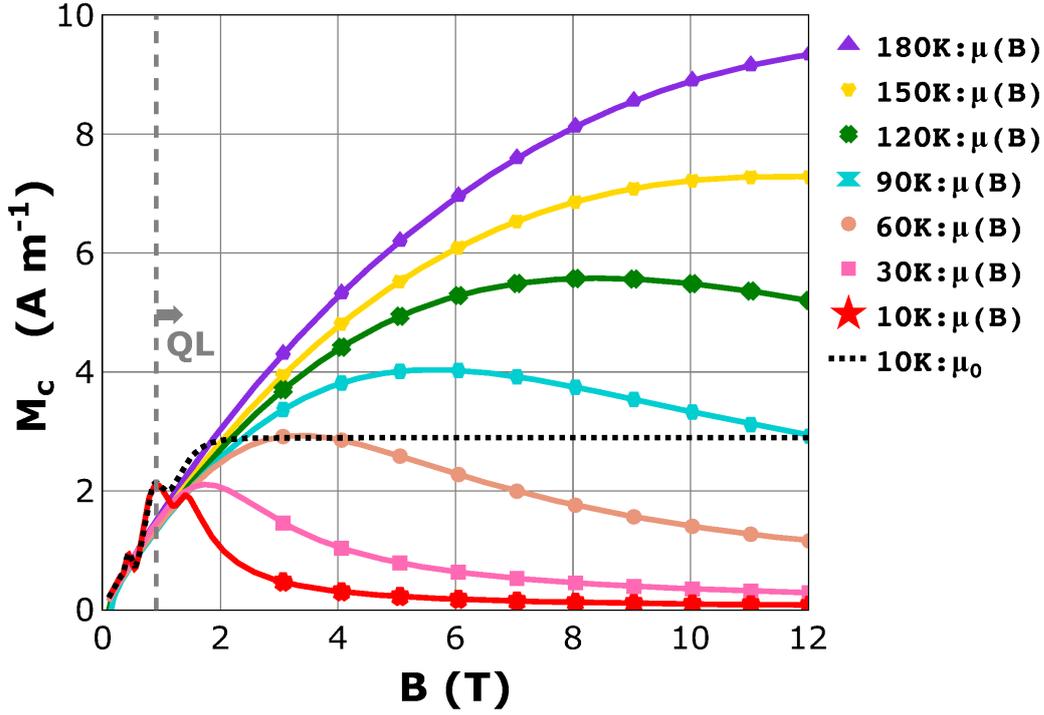


図 4.5.1: ディラック電子の磁化の伝導帯の磁場依存性. $\Lambda = 0.01$ および $\Delta = 7 \text{ meV}$ とし, 磁場および温度依存性がある化学ポテンシャル $\mu(B, T)$ を考慮する場合の磁化 (実線) と μ_0 を使用して依存性を考慮しない場合の磁化 (点線) を示した. 各温度での寄与を計算するために, 図 4.3.1 の $\mu(B, T)$ を使用し, $\mu_0 = 14 \text{ meV}$ とした. 上記の図では, $0 \leq B \leq 12 \text{ T}$ の 598 点が表示されている. 化学ポテンシャルの磁場および温度依存性の考慮の有無は $T = 10 \text{ K}$ の場合で行う. μ_0 を使用する場合は M_c は QL で一定になるが, $\mu(B, T)$ を使用する場合は M_c は 0 に近づくことが分かる.

価電子帯-磁化数値計算 M_v

伝導帯の場合と同様に, 価電子帯寄与の磁化を数値計算によって自由エネルギーを磁場微分することで求める. まず, グランドカノニカル条件下での磁化 M_v を数値計算する表式を導く. そして特別な場合として条件 C. における磁化 M_v を数値計算によって求める表式を求める. $R = \beta F_v$ とおくと M_v は,

$$M_v = -\frac{1}{V} \frac{\partial F_v}{\partial B} \quad (4.5.8)$$

$$= -\frac{1}{V} \frac{\hbar e}{m_c} \frac{\partial R}{\partial \Omega_c} \quad (4.5.9)$$

となる. $\frac{\partial R}{\partial \Omega_c}$ に注目すると,

$$\begin{aligned} \frac{\partial R}{\partial \Omega_c} = & \frac{\partial \eta}{\partial \Omega_c} N_v - N_0 \frac{1}{8\pi^2} M \sqrt{M} \frac{1}{\sqrt{\delta}} \frac{\partial}{\partial \Omega_c} \left\{ \Omega_c \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \right. \\ & \left. \left[-\alpha \ln \sqrt{\alpha} \Psi'_v(\sqrt{\alpha}) + \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \left[E \sqrt{E^2 - \alpha} - \alpha \ln |E + \sqrt{E^2 - \alpha}| \right] \Psi''_v(E) dE \right] \right\} \end{aligned} \quad (4.5.10)$$

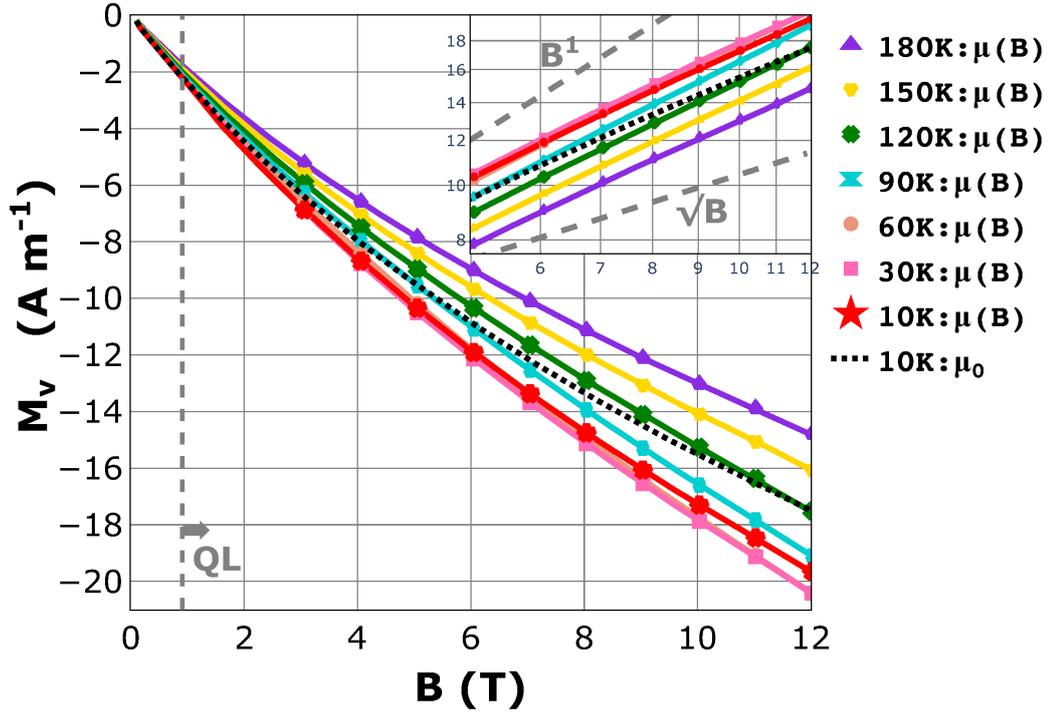


図 4.5.2: ディラック電子の磁化の価電子帯の磁場依存性. $\Lambda = 0.01$ および $\Delta = 7\text{meV}$ とし, 磁場および温度依存性がある化学ポテンシャル $\mu(B, T)$ を考慮する場合の磁化 (実線) と μ_0 を使用して依存性を考慮しない場合の磁化 (点線) を示した. 各温度での寄与を計算するために, 図 4.3.1 の $\mu(B, T)$ を使用し, $\mu_0 = 14\text{meV}$ とした. 上記の図では, $0 \leq B \leq 12\text{ T}$ の 598 点が表示されている. 化学ポテンシャルの磁場および温度依存性の考慮の有無は $T = 10\text{ K}$ の場合で行う. これらの考慮の有無での大きな変化はなかった. これは QL で化学ポテンシャルが価電子帯までに下がってこないために, 価電子帯のキャリア数に影響を与えないためである. 挿入図は $|M_v|$ の対数プロットである. M_v は QL で sub-linear の磁場依存を示す.

よって, 条件 C. の下では,

$$\frac{\partial R}{\partial \Omega_c}(C.) = -N_0 \frac{1}{8\pi^2} M \sqrt{M} \frac{1}{\sqrt{\delta}} \frac{\partial}{\partial \Omega_c} \left\{ \Omega_c \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \right. \\ \left. \left[-\alpha \ln \sqrt{\alpha} \Psi'_v(\sqrt{\alpha}) + \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \left[E \sqrt{E^2 - \alpha} - \alpha \ln |E + \sqrt{E^2 - \alpha}| \right] \Psi''_v(E) dE \right] \right\} \quad (4.5.11)$$

したがって, 条件 C. 下での磁化は,

$$M_v(C.) = -\frac{1}{V} \frac{\hbar e}{m_c} \frac{\partial R}{\partial \Omega_c}(C.) \quad (4.5.12)$$

$$= M_0 \frac{1}{8\pi^2} \sqrt{M} \frac{1}{\sqrt{\delta}} \frac{\partial}{\partial \Omega_c} \left\{ \Omega_c \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \right. \\ \left. \left[-\alpha \ln \sqrt{\alpha} \Psi'_v(\sqrt{\alpha}) + \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \left[E \sqrt{E^2 - \alpha} - \alpha \ln |E + \sqrt{E^2 - \alpha}| \right] \Psi''_v(E) dE \right] \right\} \quad (4.5.13)$$

整理すると次の様になる。

$$M_v(C.) / M_0 = \frac{\partial}{\partial \Omega_c} \left\{ \frac{1}{8\pi^2} \sqrt{M} \frac{1}{\sqrt{\delta}} \Omega_c \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \right. \\ \left. \left[-\alpha \ln \sqrt{\alpha} \Psi'_v(\sqrt{\alpha}) + \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \left[E \sqrt{E^2 - \alpha} - \alpha \ln \left| E + \sqrt{E^2 - \alpha} \right| \right] \Psi''_v(E) dE \right] \right\} \quad (4.5.14)$$

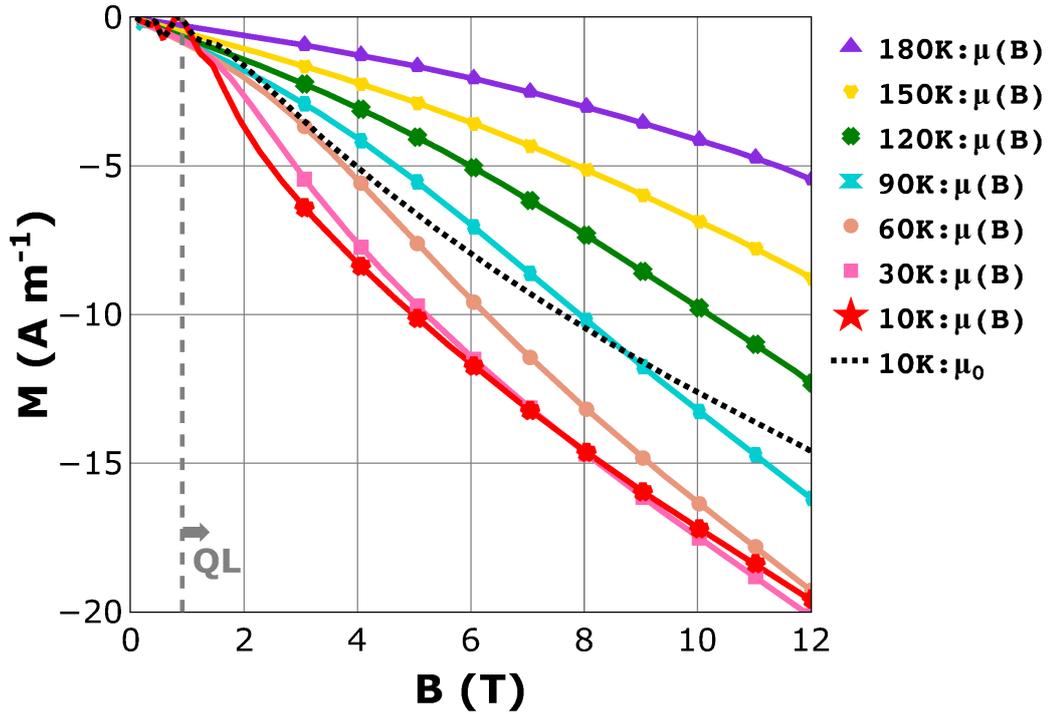


図 4.5.3: ディラック電子の磁化 M の磁場依存性. $\Lambda = 0.01$ および $\Delta = 7 \text{ meV}$ とし, 磁場および温度依存性がある化学ポテンシャル $\mu(B, T)$ を考慮する場合の磁化 $M = (M_c + M_v)$ (実線) と μ_0 を使用して依存性を考慮しない場合の磁化 (点線) を示した. 各温度での寄与を計算するために, 図 4.3.1 の $\mu(B, T)$ を使用し, $\mu_0 = 14 \text{ meV}$ とした. 上記の図では, $0 \leq B \leq 12 \text{ T}$ の 598 点が表示されている. M_c は QL において非単調な温度依存性を持つ. 温度が上昇するにつれて正の M_c が増加し, M の sub-linear の磁場依存性は消失し, 磁場依存性に変化する.

4.5.1 磁化数値計算 $M = M_c + M_v$

各温度 (10 K ~ 180 K) で (4.5.4) 式と (4.5.10) 式より 磁化 M を数値計算により求めた. 既に同条件下で, 各 B と T で $\mu(B, T)$ が計算し, 図 4.3.1 に示してある. この $\mu(B, T)$ を磁化 M の計算に使用した. 伝導帯および価電子帯の M の結果を図 4.5.3 に示す. $\Lambda = 0.01$, $\Delta = 7 \text{ meV}$, および $\epsilon_c = 70 \text{ meV}$ を設定した. これらは, ビスマス中のディラック電子とほぼ一致していますパラメータである. [28, 108, 109].

第5章

議論

5.1 自由電子

5.1.1 磁化の磁場依存性

自由電子の M の磁場依存性は、図 3.4.1 に示されているように弱磁場領域では、量子振動を除いて、 $\mu(B, T)$ と μ_0 の両方の場合で M がランダウの反磁性磁化と一致する。QL を超えると、 μ_0 の場合 M が消失する。これは自由電子において、全てのランダウ準位がエネルギー的に上昇し、最低ランダウ準位 ϵ_0 が $\epsilon_0 \geq \mu_0$ を超えるため、電子が蒸発し、カノニカル条件が明らかに破れるためである (図 5.1.1)。Peierls による研究 [80] は μ_0 の場合 M に対応する。(図 5.1.2) のように M が強磁場領域で増加しているように見える。しかしこれは狭い磁場範囲のプロットによる表面的な増加であるに過ぎない。十分に強い磁場領域において

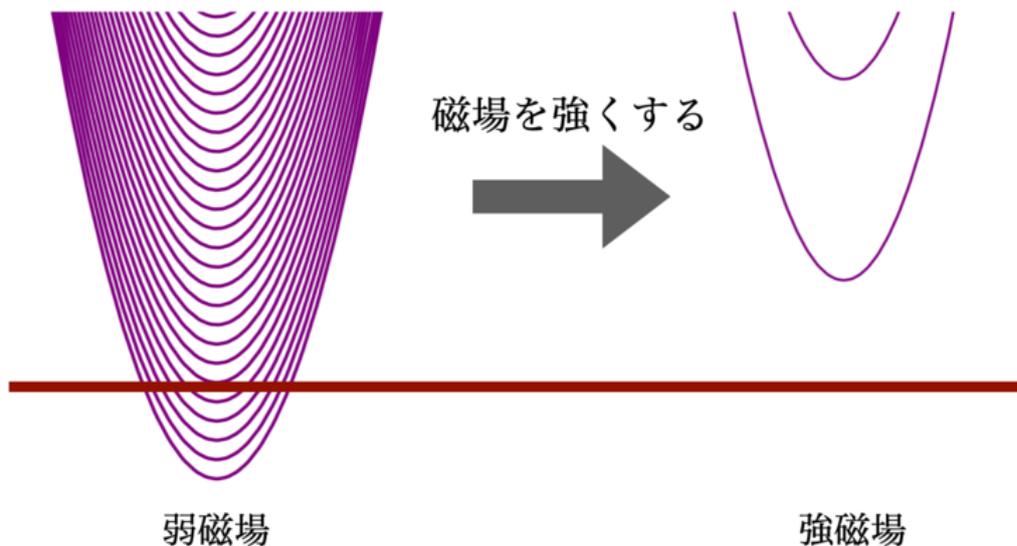


図 5.1.1: 自由電子のランダウ準位と磁場依存しない化学ポテンシャルの関係。自由電子のランダウ準位は磁場に依存する。そのため量子極限になりさらに磁場を強くすると、全てのランダウ準位が化学ポテンシャルよりも大きくなる。これによって系の全ての電子が干上がる。

はこの増加は消える。

μ の B -依存性を適切に考慮すると、 M が消失することはない、ランダウの反磁性磁化と同様に増加することもない。 M は、低温 $T \lesssim 60$ K では有限の値に飽和する。一方、高温 $T \gtrsim 120$ K では、 M は $\varphi < 1$ であってもランダウの反磁性磁化に近づく。

低温の場合、量子極限で自由電子の磁化が一定値に近づく原因は自由電子のランダウ準位は磁場に依存することにある。カノニカル条件を保つために、強磁場極限において化学ポテンシャルは $\eta(\Omega_c) = \frac{1}{2}\Omega_c$ の磁場依存性を持つ。最低ランダウ準位のバンド端のエネルギーは $\frac{1}{2}\Omega_c$ であるので、化学ポテンシャルは最低ランダウ準位のバンド端に接しながら上昇する (図 5.1.3)。つまり、全ての粒子が最低ランダウ準位のバンド端のエネルギー $\frac{1}{2}\Omega_c$ を有する。そのため系の自由エネルギーは強磁場極限において磁場の 1 次の依存性を持つ。よって自由エネルギーの磁場微分である磁化は一定値になる。

量子極限において自由電子の磁化の磁場依存性が一定値になることは示す対応する実験は未だない。自由電子の場合は量子極限になる磁場がとても大きい。しかし、磁束濃縮法で磁場を発生させ磁化を測り、一定値になることを観察できる可能性がある。金属にマイクロ秒の磁場をかけた場合、反磁性電流は非散逸だが、時間変化があるので渦電流が流れる。そのためジュール熱が発生する。サンプルを粉状にすることで粉間の伝導がない状態にできる。体積を大きくし、ジュール熱を抑えて磁化を測ることは可能である。粉にして性質が変化せず、かつ等方的な物質に対してはこの手法を用いることができる。アルカリ金属か銅を用いて実験することが考えられる。

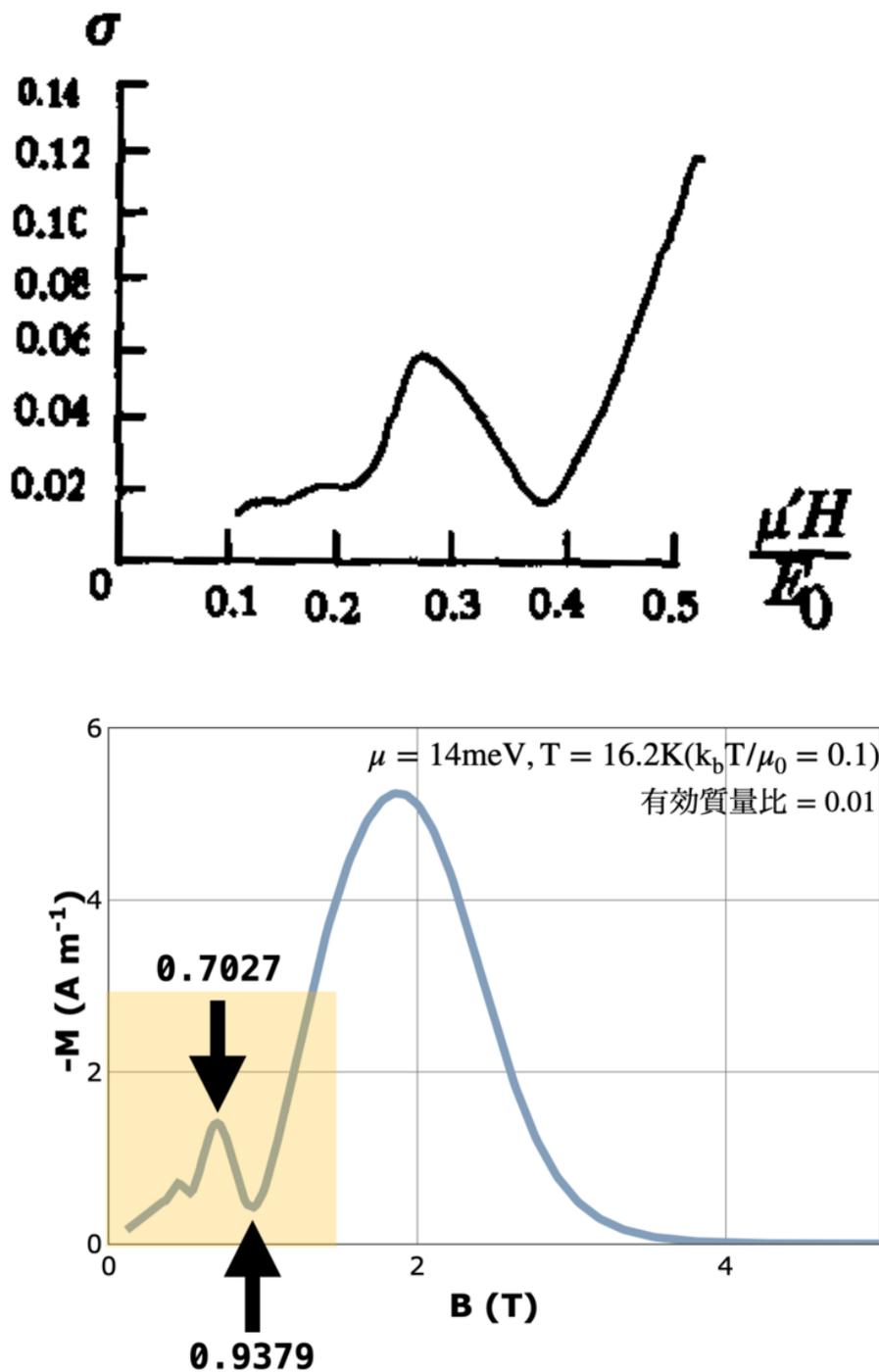


図 5.1.2: Peierls による自由電子の磁化の磁場依存性 [80]. $\frac{K_b T}{E_0} = 0.1$ の場合の結果である. $\frac{\mu'H}{E_0} = 0.29$ ($H = 70\text{T}$), 0.38 ($H = 93\text{T}$) で極大値, 極小値をとることが分かる. 式 (3.4.19) にて $\frac{\partial n}{\partial \Omega_c} = 0$ として化学ポテンシャルの磁場依存性を消した式に, Peierls と同様の条件 ($\frac{K_b T}{\mu} = 0.1$) を適用して計算した結果が下図である. 下図の網掛け部分, $B = 0.7027\text{T}$, 0.9379T の極値が上図の極値に対応している. 下図ではディラック電子の結果と比較するために自由電子のサイクロトロン有効質量は通常 m であるが $m/100$ として計算しているため磁場の尺度が 100 倍違う. Peierls の結果では強磁場で磁化が単調に大きくなるように見えるが, 実際は下図の磁場と温度の依存を考慮しない化学ポテンシャル μ_0 の場合の磁化のように磁化は 0 になる.

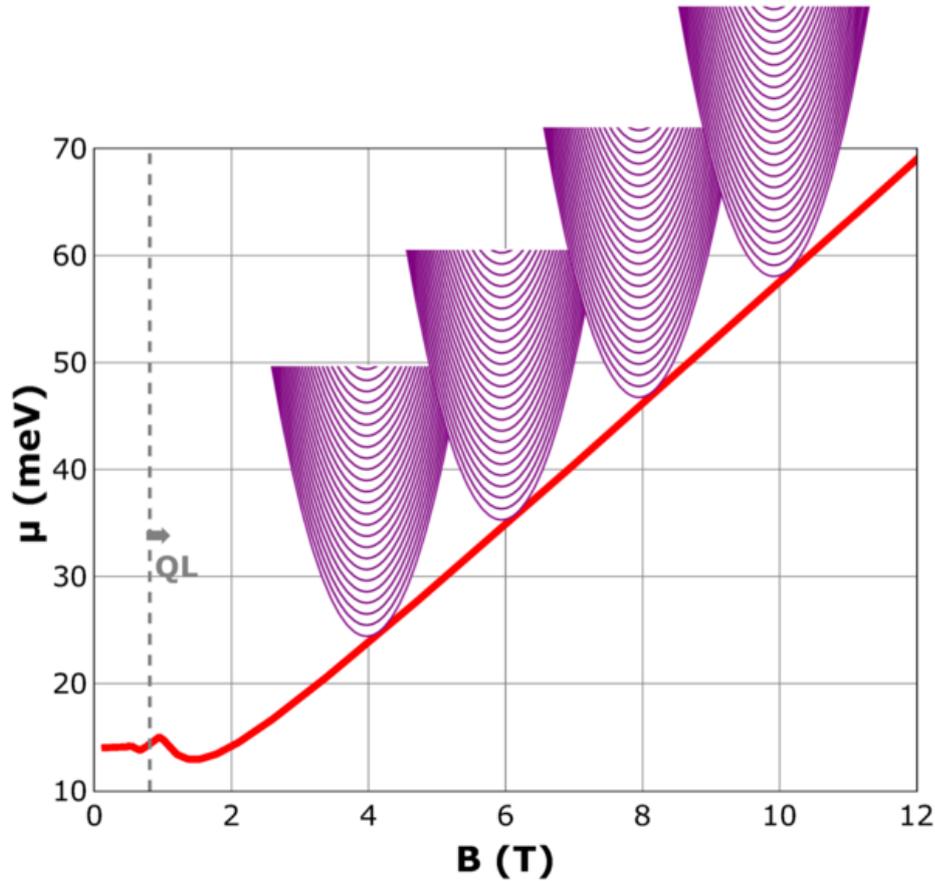


図 5.1.3: 自由電子のランダウ準位と磁場依存する化学ポテンシャルの関係. カノニカル条件を保つために, 強磁場極限において化学ポテンシャルは $\eta(\Omega_c) = \frac{1}{2}\Omega_c$ の磁場依存性を持つ. 最低ランダウ準位のバンド端のエネルギーは $\frac{1}{2}\Omega_c$ であるので, 化学ポテンシャルは最低ランダウ準位のバンド端に接しながら上昇する.

5.1.2 磁化の強磁場極限

自由電子の磁化 M は, カノニカル条件化において化学ポテンシャルの磁場および温度依存性を考慮すると量子極限で飽和する (図 3.4.1). この飽和値を推定する. 結論を先に述べると, 磁場極限での系の磁気モーメント VM は, 系の N 個全ての電子それぞれがボーア磁子 μ_B の (-1) 倍の磁気モーメントを有するときの値に近づく.

量子極限において十分強い磁場領域において化学ポテンシャル $\eta(\Omega_c)$ の関数形は $\frac{1}{2}\Omega_c$ に近づく. つまり, 量子極限において自由電子の化学ポテンシャルは最低ランダウ準位のバンド端のエネルギーに近づく. これについては後に説明する. ここでは一旦, 強磁場で化学ポテンシャル $\eta(\Omega_c)$ が次の形になると仮定する.

$$\eta = J\Omega_c + K \quad (5.1.1)$$

すると、強磁場極限 ($\Omega_c \rightarrow \infty$) での磁化は (3.4.18) 式より次の様に求められる。

$$\begin{aligned} \lim_{\Omega_c \rightarrow \infty} M_f / M_0 &= \lim_{\Omega_c \rightarrow \infty} \left(\frac{-\partial \eta}{\partial \Omega_C} [N / N_0] \right) \\ &+ \lim_{\Omega_c \rightarrow \infty} \frac{\sqrt{2}}{3\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \int_{\alpha}^{\infty} dE \left\{ \frac{(E - \alpha)^{\frac{3}{2}}}{\cosh(E - \eta) + 1} - \frac{3}{2} \alpha \frac{(E - \alpha)^{\frac{1}{2}}}{\cosh(E - \eta) + 1} \right. \end{aligned} \quad (5.1.2)$$

$$\left. + \Omega_c \frac{(E - \alpha)^{\frac{3}{2}} \sinh(E - \eta)}{(\cosh(E - \eta) + 1)^2} \frac{\partial \eta}{\partial \Omega_C} \right\} \quad (5.1.3)$$

$$= -J [N / N_0]$$

$$\begin{aligned} &+ \frac{\sqrt{2}}{3\pi^2} \lim_{\Omega_c \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^{\infty} \int_{\alpha}^{\infty} dE \left\{ \frac{(E - \alpha)^{\frac{3}{2}}}{\cosh(E - \eta) + 1} - \frac{3}{2} \alpha \frac{(E - \alpha)^{\frac{1}{2}}}{\cosh(E - \eta) + 1} \right. \end{aligned} \quad (5.1.4)$$

$$\left. + \Omega_c \frac{(E - \alpha)^{\frac{3}{2}} \sinh(E - \eta)}{(\cosh(E - \eta) + 1)^2} \frac{\partial \eta}{\partial \Omega_c} \right\} \quad (5.1.5)$$

ここで、次の和と積分の部分である次を

$$\sum_{n=0}^{\infty} \int_{\alpha}^{\infty} dE \left\{ \frac{(E - \alpha)^{\frac{3}{2}}}{\cosh(E - \eta) + 1} - \frac{3}{2} \alpha \frac{(E - \alpha)^{\frac{1}{2}}}{\cosh(E - \eta) + 1} + \Omega_c \frac{(E - \alpha)^{\frac{3}{2}} \sinh(E - \eta)}{(\cosh(E - \eta) + 1)^2} \frac{\partial \eta}{\partial \Omega_C} \right\} \quad (5.1.6)$$

$$\begin{aligned} &= \lim_{\nu \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^{\nu} \int_{\alpha}^{\infty} dE \left\{ \frac{(E - \alpha)^{\frac{3}{2}}}{\cosh(E - \eta) + 1} - \frac{3}{2} \alpha \frac{(E - \alpha)^{\frac{1}{2}}}{\cosh(E - \eta) + 1} \right. \\ &\quad \left. + \Omega_c \frac{(E - \alpha)^{\frac{3}{2}} \sinh(E - \eta)}{(\cosh(E - \eta) + 1)^2} \frac{\partial \eta}{\partial \Omega_C} \right\} \end{aligned} \quad (5.1.7)$$

$$= \lim_{\nu \rightarrow \infty} Q_{\nu}(\Omega_c) \quad (5.1.8)$$

とおく。すると、 $\lim_{\Omega_c \rightarrow \infty} \lim_{\nu \rightarrow \infty}$ の累次極限が出現する。これについて次の関係が成り立つとする。

$$\lim_{\Omega_c \rightarrow \infty} \lim_{\nu \rightarrow \infty} Q_{\nu}(\Omega_c) = \lim_{\nu \rightarrow \infty} \lim_{\Omega_c \rightarrow \infty} Q_{\nu}(\Omega_c) \quad (5.1.9)$$

また、次の様に $P(\Omega_c, E)$ を定義する。

$$Q_{\nu}(\Omega_c) = \sum_{n=0}^{\nu} \int_{\alpha}^{\infty} dE P(\Omega_c, E) \quad (5.1.10)$$

すると, (5.1.5) 式は次の様に変形できる.

$$\begin{aligned} \lim_{\Omega_c \rightarrow \infty} M_f / M_0 &= -J [N / N_0] \\ &+ \frac{\sqrt{2}}{3\pi^2} \lim_{\nu \rightarrow \infty} \lim_{\Omega_c \rightarrow \infty} Q_\nu(\Omega_c) \end{aligned} \quad (5.1.11)$$

$$\begin{aligned} &= -J [N / N_0] \\ &+ \frac{\sqrt{2}}{3\pi^2} \lim_{\nu \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^{\nu} \lim_{\Omega_c \rightarrow \infty} \int_{\alpha}^{\infty} dE P(\Omega_c, E) \end{aligned} \quad (5.1.12)$$

$$+ \frac{\sqrt{2}}{3\pi^2} \lim_{\nu \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^{\nu} \lim_{\Omega_c \rightarrow \infty} \int_0^{\infty} dE P(\Omega_c, E) \quad (5.1.13)$$

ここで, $P(\Omega_c, E)$ は Ω_c をインデックスとする $P_{\Omega_c}(E)$ という関数列とみなせる. このとき, $\lim_{\Omega_c \rightarrow \infty} \int_0^{\infty} dE P_{\Omega_c}(E)$ の \lim と \int の交換は, 1. $P_{\Omega_c}(E)$ が連続, 2. $P_{\Omega_c}(E) \rightarrow P(E), \Omega_c \rightarrow \infty$ が一様収束, の2つが十分条件となる. この条件が成り立つとして変形する.

$$\begin{aligned} \lim_{\Omega_c \rightarrow \infty} M_f / M_0 &= -J [N / N_0] \\ &+ \frac{\sqrt{2}}{3\pi^2} \lim_{\nu \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^{\nu} \int_0^{\infty} dE \lim_{\Omega_c \rightarrow \infty} P(\Omega_c, E) \end{aligned} \quad (5.1.14)$$

ここで,

$$\lim_{\Omega_c \rightarrow \infty} P(\Omega_c, E) = 0 \quad (5.1.15)$$

であるので, 次の様に変形される.

$$\lim_{\Omega_c \rightarrow \infty} M_f / M_0 = -J [N / N_0] \quad (5.1.16)$$

J と K の値を求めて議論を進める. 最低ランダウ準位のバンド端 ε_0 は,

$$\varepsilon_0 = \varepsilon(n=0, k=0) = \frac{1}{2} \hbar \omega_c = \frac{1}{2\beta} \Omega_c \quad (5.1.17)$$

これを無次元化すると,

$$E_0 = \beta \varepsilon_0 = \frac{1}{2} \Omega_c \quad (5.1.18)$$

となる. 次に量子極限における化学ポテンシャルの磁場依存性 $\eta(\Omega_c)$ の関数形を求める. ここでは絶対零度を仮定して (3.2.5) 式からそれを求める. 絶対零度の条件化ではフェルミ分布関数はステップ関数のような概形になる. 積分範囲を制限するだけであるので (3.2.5) 式は次のように変形できる.

$$N / N_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi^2}} \Omega_c \sum_n \int_{(n+\frac{1}{2})\Omega_c}^{\eta} \frac{1}{\sqrt{E - (n+\frac{1}{2})\Omega_c}} dE \quad (5.1.19)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi^2}} \Omega_c \sum_n 2\sqrt{\eta - \left(n + \frac{1}{2}\right) \Omega_c} \quad (5.1.20)$$

量子極限では $n = 0$ のみの寄与なので,

$$N/N_0 = \frac{2}{\sqrt{2\pi^2}} \Omega_c \sqrt{\eta - \frac{1}{2}\Omega_c} \quad (5.1.21)$$

となる。カノニカル条件であるので,

$$\frac{\partial N}{\partial \Omega_c} = 0 \quad (5.1.22)$$

である。したがって, (5.1.21) 式から,

$$\left(2\eta - \frac{3}{2}\Omega_c\right) \partial\Omega_c + \Omega_c \partial\eta = 0 \quad (5.1.23)$$

となる。この微分方程式を求める。この形は完全微分形式ではない。積分因子 $K(\Omega_c, \eta) = \Omega_c$ を (5.1.23) 式に乗ずることで次のような完全微分形式になる。

$$\Omega_c \left(2\eta - \frac{3}{2}\Omega_c\right) \partial\Omega_c + \Omega_c^2 \partial\eta = 0 \quad (5.1.24)$$

したがって,

$$A(\Omega_c, \eta) = \Omega_c \left(2\eta - \frac{3}{2}\Omega_c\right) \quad (5.1.25)$$

$$B(\Omega_c, \eta) = \Omega_c^2 \quad (5.1.26)$$

とするとき, 次の条件を満たす関数 $U(\Omega_c, \eta) = C$ が存在する。ただし, C は定数である。

$$\frac{\partial U}{\partial \Omega_c} = A \quad (5.1.27)$$

$$\frac{\partial U}{\partial \eta} = B \quad (5.1.28)$$

(5.1.27) 式より,

$$U = \eta\Omega_c^2 - \frac{1}{2}\Omega_c^3 + f(\eta) \quad (5.1.29)$$

これを (5.1.28) 式に代入して解くと,

$$f(\eta) = C_1 \quad (5.1.30)$$

となる。ただし, C_1 は定数である。したがって, (5.1.29) 式から,

$$U = \eta\Omega_c^2 - \frac{1}{2}\Omega_c^3 + C_1 \quad (5.1.31)$$

となる。 $U = C$ であるので, 結果的に

$$\eta = \frac{1}{2}\Omega_c + \frac{C}{\Omega_c^2} \quad (5.1.32)$$

と求まった。したがって、 $\Omega_c \rightarrow \infty$ のとき、 $\eta \rightarrow E_0 = \frac{1}{2}\Omega_c$ となる。つまり、 $\Omega_c \rightarrow \infty$ のとき、 $J \rightarrow \frac{1}{2}$ 、 $K \rightarrow 0$ である。よって、

$$M_f \rightarrow -\frac{1}{2} [N/N_0] M_0, \quad (\Omega_c \rightarrow \infty) \quad (5.1.33)$$

$$= -\frac{\hbar e}{2m} \frac{N}{V}, \quad (\Omega_c \rightarrow \infty) \quad (5.1.34)$$

$$= -\mu_B \frac{N}{V}, \quad (\Omega_c \rightarrow \infty) \quad (5.1.35)$$

このようにして、磁場極限での系の磁気モーメント VM_f は、系の N 個全ての電子それぞれがボーア磁子 μ_B の (-1) 倍の磁気モーメントを有するときの値に近づくことが分かった。

5.2 ディラック電子

5.2.1 磁化の磁場依存性

最初に、磁化の伝導帯からの寄与である M_c に注目する。ディラック電子は大きな反磁性、つまり $M < 0$ を示すことが知られている [40]。しかし、本研究結果の図 4.5.1 は、 M_c が反磁性ではなく、 B および T の全範囲で $M_c > 0$ であることを示している。伝導帯電子からの常磁性寄与は、Koshino と Ando によって弱磁場領域かつ絶対零度の条件下で記述された [25]。本研究結果はその結果を強磁場と有限温度に拡張したものである。弱磁場領域である QL 以下では、 M_c は T に依存しない。さらに、この磁場範囲では $\mu(B, T)$ がほとんど変化しないため、磁場に依存しない化学ポテンシャル μ_0 を用いた M_c は $\mu(B, T)$ を用いた M_c と一致することが分かる。QL のような強磁場領域では、 M_c は温度 T に強く依存する非単調な磁場依存性を示す。温度 T を下げることにより、 M_c は減少し、絶対零度かつ強磁場領域では M_c は 0 に近づく。これはディラック電子の最低ランダウ準位が磁場に依存しないことに起因する。図 4.3.1 に示されるように、化学ポテンシャルはカノニカル条件を満たすために磁場の増加に伴い減少する。量子極限になり化学ポテンシャルが磁場に依存しない最低ランダウ準位のみと交点を持つ状態で、ランダウ縮重度は増加するためである (図 5.2.1)。これによって、化学ポテンシャルは絶対零度かつ強磁場極限において伝導帯の最低ランダウ準位のバンド端に近づく。最低ランダウ準位は磁場に依存しないため、化学ポテンシャルがバンド端に近づくにつれ全ての伝導帯の電子は、磁場依存しない最低ランダウ準位のバンド端のエネルギーを持つことになる。よって、伝導帯の自由エネルギー F_c が磁場に対して一定になるため伝導帯寄与の磁化 M_c は 0 に近づく。また、絶対零度であるため熱励起は起こらない。この結果、絶対零度かつ強磁場極限では $M_c \rightarrow 0$ となると考えられる。 μ_0 を用いた M_c と $\mu(B, T)$ を用いた M_c の性質は著しく異なっている。 $\mu(B, T)$ を用いた場合、 $M_c \rightarrow 0$ である一方、 μ_0 を用いた場合、 M_c は一定であった。 M_c の違いは μ の特性に基づいて理解することができる。強磁場領域における M_c の本質的な特性は、 μ の B 依存性と T 依存性を考慮しないことによって見過ごされる可能性があることが分かる。

次に、価電子帯の寄与 M_v に焦点を当てる。図 4.5.2 に示されるように、 M_v は負であり、その絶対値は M_c よりも大きい。したがって、全体の M は反磁性であった。 M_v は量子振動を示さず、量子極限においても有意な異常を示さずに単調に減少した。 M_v の大きさは、化学ポテンシャル以下の計算される量子状態の数から決定されるため、カットオフエネルギー $-\epsilon_c$ の値に依存する。 M_v の性質は、 μ の磁場および温度依存性の考慮の有無によって変わらず、 M_c が $\mu(B, T)$ に敏感であるのに対して、 M_v は $\mu(B, T)$ に対して鈍感であることが分かる。 $M_v \propto -B^\varphi$ と表すと、図 4.5.2 の挿入図に示されるように、次数 φ は約 $\varphi = 0.7-0.8$ であった。Keser らは、3次元ディラック電子の価電子帯が絶対零度かつ化学ポテンシャルがの磁場および温度依存性を考慮しない場合に非線形の反磁性磁化率を示すことを示した [72]。本研究結果は、 μ の B -および T -依存性を考慮している場合でも M_v の sub-linear の磁場依存性が成立することを示している。

最後に、3次元ディラック電子の総磁化 $M = M_c + M_v$ についてである。結果は図 4.5.3

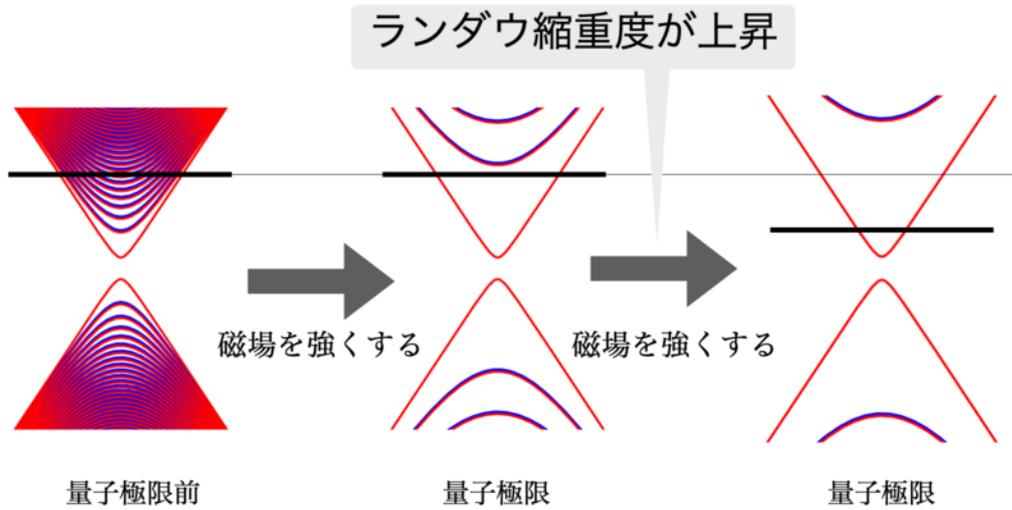


図 5.2.1: ディラック電子のランダウ準位と磁場依存する化学ポテンシャルの関係. 太い黒線が化学ポテンシャルを表す. 量子極限以前はランダウ準位が化学ポテンシャルを通過することによる粒子数の減少とランダウ縮重度の増加が釣りあい粒子数が保たれ, 量子振動を除き化学ポテンシャルは動かない. しかし量子極限になると化学ポテンシャルを通過するランダウ準位はなくなる一方で縮重度は増加する. カノニカル条件を満たすために化学ポテンシャルは下がる必要がある.

に示されるように, 磁化 M は, 弱磁場領域かつ低温条件では M_c からの量子振動を示し, QL では単調に減少する. QL における磁化の大きさ $|M|$ は, 温度の上昇に伴って減少する. これは, M_c の増加と $|M_v|$ の減少によって説明される. 前者が主な原因であり, 後者は副次的な要因である. 本研究の主要な発見は, 低温領域 $k_B T \lesssim E_F$ では, 指数 φ が 1 よりも小さく, 高温領域 $k_B T \gtrsim E_F$ では $\varphi > 1$ であることである. ここで, E_F はバンド底から測ったフェルミエネルギーを表す. φ の変化は, M_c が M_v に対する相対的な寄与の変化によって説明できる. 低温領域では, M_c の寄与は M_v に比べて非常に小さいため, φ は M_v の寄与によって決定された. 高温領域では, M_c の寄与が M_v の寄与に匹敵するため, φ は M_c と M_v の両者の寄与によって決定され, 磁化の磁場依存性は $\varphi > 1$ のように super-linear になった. φ の定性的な変化を評価することは, 有限温度での実験データの解析にとって重要である.

5.2.2 磁化の温度依存性

図 5.2.3 は, 高磁場領域の異なる磁場における磁化率 M/B の温度依存性を示している. $k_B T \gtrsim E_F = 7 \text{ meV} \simeq 70 \text{ K}$ では, 磁化率は温度に比例することが分かった. すなわち, $\chi(0)$ を $T = 0$ における磁化率とすると, 磁化率は $M/B \propto T + \chi(0)$ と表現できる. この磁化率の T -依存性は, Otake らが報告した低磁場領域でのビスマスの実験結果と一致している [77]. 1980 年に Otake らはギャップの温度依存性を仮定することでビスマスの磁化率の温度依存性が線形的になることを指摘した. 一方で本研究ではエネルギーギャップの温度依存性を仮定せずに, 次の 2 つの要因によって磁化率の温度依存性を説明できることを見つけ

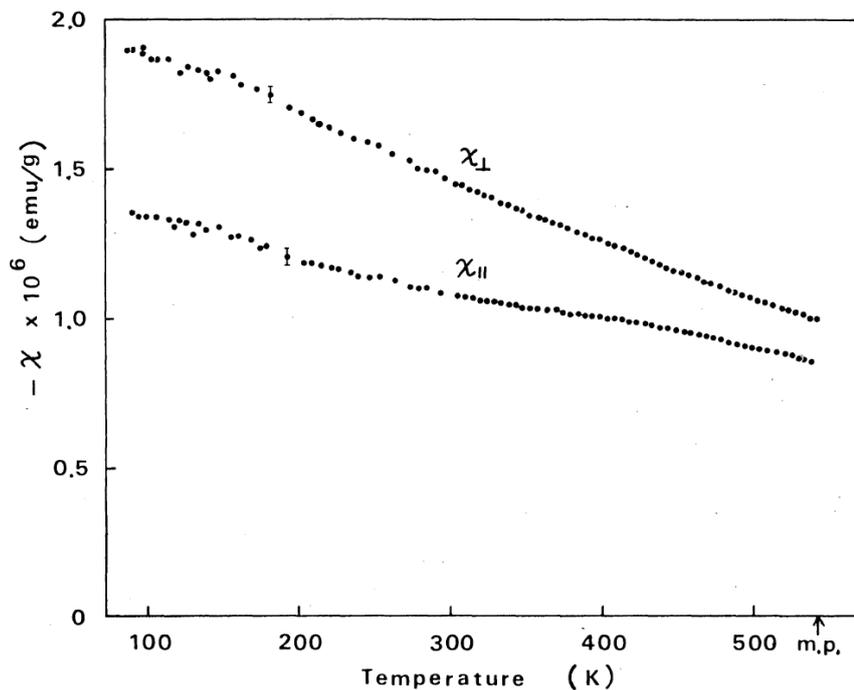


図 5.2.2: 弱磁場におけるビスマスの磁化の温度依存性. 3kOe の磁場, 90K から 540K の温度領域におけるビスマスの磁化率の温度依存性の実験結果 [77]. ビスマスの反磁性が温度の上昇に伴って単調に減少することが分かる.

た. 1 つ目は熱励起である. 温度上昇に伴い, フェルミ分布関数がぼやけ, 価電子帯の状態の占有確率が小さくなるエネルギー領域が広がる. 2 つは化学ポテンシャルの温度依存性である. 図 4.3.1 のように温度上昇に伴って化学ポテンシャルの変化は緩やかになる. 温度上昇に伴って計算される価電子帯の状態のエネルギーと化学ポテンシャルとの差が大きくなるので, M_v の絶対値は小さくなる. このようにエネルギーギャップの温度依存性を仮定せずとも, フェルミ分布関数の広がりや $\mu(B, T)$ の増加によって温度上昇に対して M_v の絶対値が線形的に減少することが分かった. 近年のいくつかの実験により 3 次元ディラック電子である PbTe [75], Sr₃PbO antiperovskite [104], 3 次元ワイル電子である Cd₃As₂ [79], および 3 次元トポロジカル絶縁体である Bi_{1-x}Sb_x ($x=0.08-0.16$) [110] では, 温度が上昇すると反磁性が減少することが報告されている.

5.2.3 磁化率の化学ポテンシャル依存性

0 磁場における磁化率 χ の化学ポテンシャル依存性の先行研究がある. これと本研究の計算により算出される磁化率 χ の化学ポテンシャル依存性を比較し, 本研究の有効性を確かめる.

まず, (4.5.7) 式と (4.5.14) 式を利用した磁化率 χ の計算方法を説明する. 本研究の計算方法では 0 磁場付近の自由エネルギー, 磁化などの物理量を求めることが難しい. なぜなら, 0

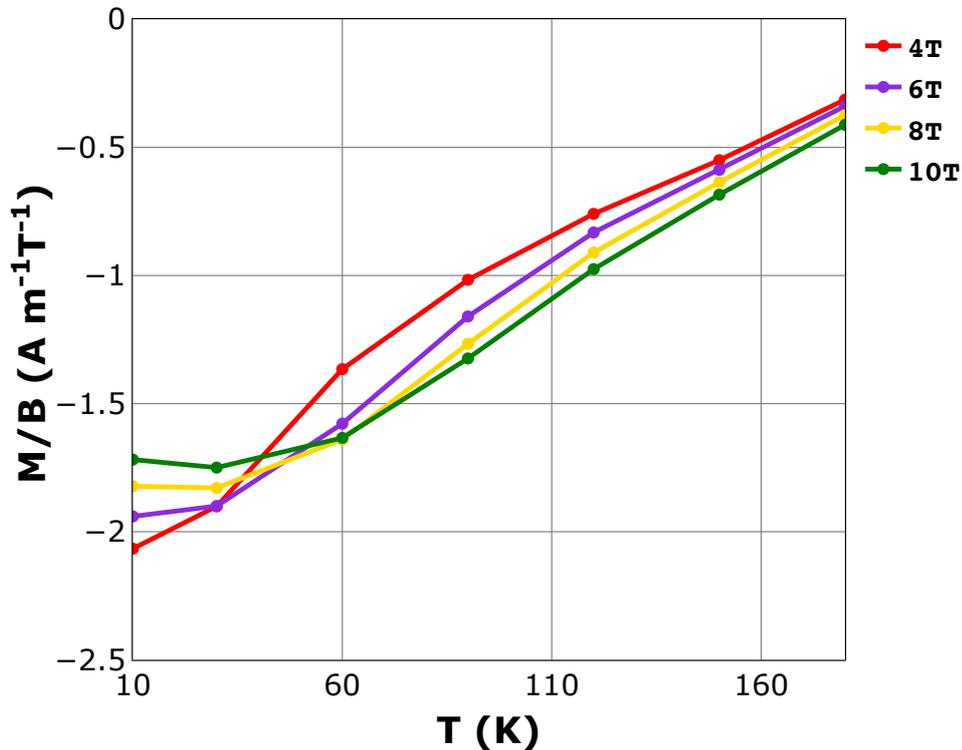


図 5.2.3: 量子極限におけるディラック電子の磁化の温度依存性. Fig. 4.5.3 の $\mu(B, T)$ に基づいて, 磁場の大きさを温度で除算した磁化をプロットした. 記号は計算点を表し, 線で結ばれている. 特に, 30 K 以上では温度が上昇するにつれて反磁性が単調に減少する.

磁場付近ではランダウ量子数の和の上限をととても大きく取る必要があるからである. よって, 最初の step1 として次の様にして近似的に求めることになる. 磁化 M が磁場 $B = B_0 = 0$ で 0 を取るとする. このとき, 0 磁場付近の磁場 $B_1 (> B_0)$ における磁化 M_1 が分かれば, 磁化と磁場の差分比によって近似的に 0 磁場の磁化率 χ が求まる. また, 磁場 B_1 における自由エネルギー F_1 と磁場 $B_2 (> B_1)$ における自由エネルギー F_2 が分かれば, 磁化と自由エネルギーの差分比によって, 磁場 B_1 における磁化 M_1 が計算できる. step1 により 0 磁場の磁化率 χ が計算できた.

しかし, 次の step2 が必要である. というのも B_1 と B_2 において自由エネルギー F_1 と F_2 を求めるときに, 各化学ポテンシャルの値で $F(B)$ のピーク位置がずれるため, 磁場 B_1 と B_2 を固定すると, 各化学ポテンシャルで傾き $(F_2 - F_1)/(B_2 - B_1)$ の正負が変わり, χ にした時に振動するもしくは, 負ではなく, 正の値も出てきてしまうことになる. この振動問題を次の step2 で解決した. まず, 磁化 M の弱磁場での振る舞いを B の 1 次と仮定する. したがって, このとき $F(B)$ の弱磁場での振る舞いは B の 2 次である. 各化学ポテンシャルにおいて, $F(B)$ を弱磁場で数点求めて, 最小 2 乗法により B の 2 次で近似する. 次に, パラメタ微分で B_1 における磁化 M_1 を求める. 最後に, step1 を実行し磁化率 χ を求める.

具体的には次の様に計算した. 各化学ポテンシャルの値ごとに, 自由エネルギー, 磁化, 磁化率の順に計算する. まず, 弱磁場領域として Ω_c が 1.3 から 3.0 の範囲, 計算点 15 点

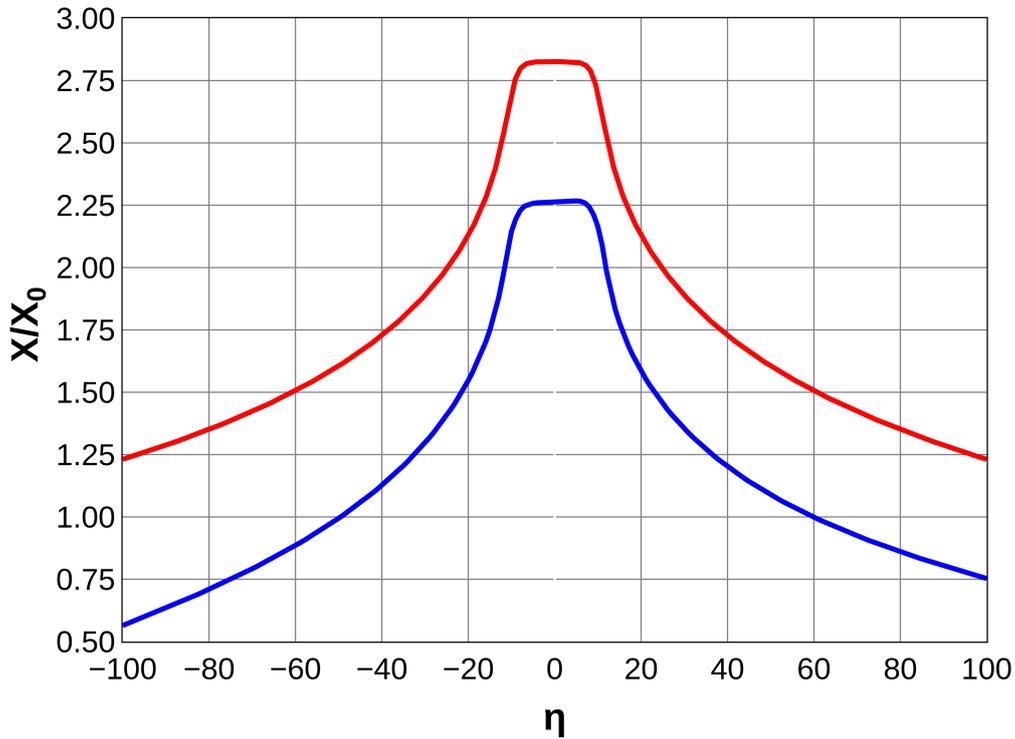


図 5.2.4: 弱磁場における磁化率 χ の化学ポテンシャル依存性の先行研究との比較. ゼロ磁場における磁化率の化学ポテンシャル依存性の, 先行研究 [40](赤実線) と (4.5.7) 式と (4.5.14) 式を利用した本研究 (青実線) を示した. どちらも絶縁相 $|\eta| \leq \delta$ のときディラック電子の磁化率は負で最大になった.

($=B_n$) で自由エネルギー F を計算する. 次にこれを最小二乗法により磁場の 2 次で近似する. $B_n/2$ となる磁場を B_1 , そこでの自由エネルギーの 2 次近似曲線から求めた磁化を M_1 とする. 最後に $B_0 = (0)$ での磁化 0 と差分をとって B_0 での磁化率 χ を求めた.

弱磁場領域においてこの計算結果と既存の理論を比較したものが (図 5.2.4) である. 弱磁場領域におけるディラック電子の磁化率の化学ポテンシャル依存性は定性的に Fukuyama の結果 [40] と一致することがわかる. 絶縁相 $|\eta| \leq \delta$ のときディラック電子の磁化率は負で最大になった. これによって定性的に本研究の有効性を確かめることができた. 両者の完全な一致がない理由は 2 つ考えられる. 1 つ目が本研究ではカットオフ関数を利用してカットオフを滑らかにしている. この結果カットオフエネルギー付近のエネルギー領域での磁化の寄与がカットオフを緩やかにしない場合と比べて少なく見積もられるからである. 2 つ目は本研究結果である (4.5.7) 式と (4.5.14) 式を利用して弱磁場の計算をすることが難しく, 上に示した近似を利用して磁化率を求めたからである. 本研究では状態和をマクローリン展開で近似する手法を用いておらず, 化学ポテンシャル以下のランダウ準位を全て計算する必要がある. そのため, 化学ポテンシャル以下に多数のランダウ準位が存在するゼロ磁場付近の磁場領域の計算は難しくなる.

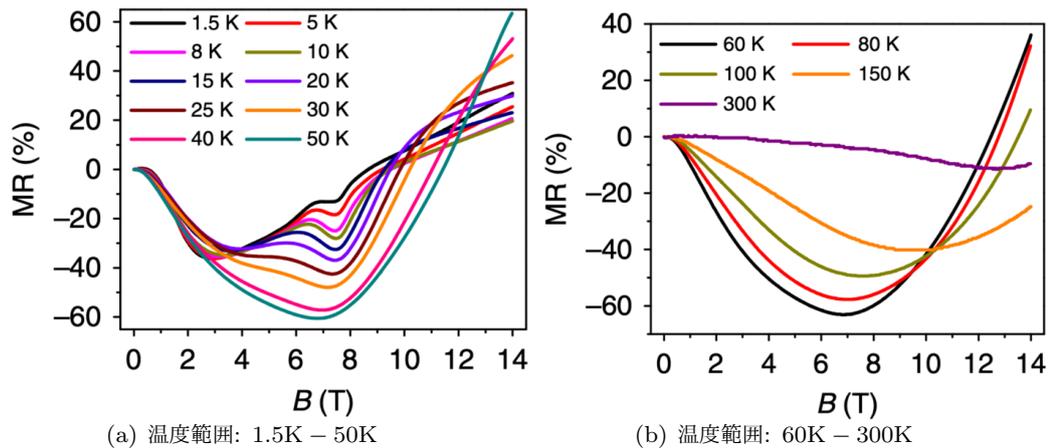


図 5.2.5: 磁場と並行に電場を印加する場合の Cd_3As_2 ナノワイヤー (直径 200nm) の負の磁気抵抗 [111]

5.2.4 化学ポテンシャルの磁場による制御

化学ポテンシャル (絶対零度ではフェルミエネルギー) を磁場により制御できる可能性がある。現実の試料の電子系は本研究の仮定であるカノニカル条件 (等温, 等積, 等粒子数) を満たしていると考えられる。このカノニカル条件が破られない環境であれば化学ポテンシャルは磁場によって制御できる。通常化学ポテンシャルを調整するには, バルクならドーブ, 半導体デバイスなら電場を与える方法を適用する。化学ポテンシャルの磁場制御はこれらと異なる新しい化学ポテンシャルを調整法である。ただし, 物質を他の物質と繋げることで, カノニカル条件が破られる可能性がある。例えば, 半導体デバイスに電場を与える方法であれば半導体デバイスでゲート電圧をかけているときは粒子数をコントロールして化学ポテンシャルを変えている。この場合はカノニカル条件は破られることになる。

5.2.5 磁化以外の物理量の磁場および温度依存性

本研究では 3 次元ディラック電子における磁化の磁場および温度依存性を見てきた。化学ポテンシャルの温度および磁場依存性に起因する, 非単調な伝導帯寄与が, 3 次元ディラック電子の磁化の磁場依存性を温度によって変化させた。ここでは, 温度上昇に伴う化学ポテンシャルのシフトに起因し, その磁場依存性が特徴的な温度変化をするディラック電子の他の物理量を紹介する。例としてワイル電子の負の磁気抵抗の磁場依存性が挙げられる。ワイル電子系である Cd_3As_2 ではカイラル異常を起因として負の磁気抵抗効果が起こることが Li らによる実験で示されている [111]。この実験では Cd_3As_2 のバルク結晶は, フェルミエネルギーがディラック点からかなり離れた位置にあるため, ワイル電子の線形分線からくるカイラル異常を観察しにくい。ナノワイヤー化してキャリア密度を下げることで, フェルミエネルギーをディラック点付近まで下げている。カイラルとはスピンと運動量の相関のことである。磁場をかけて時間反転対称性を破り, ディラック点は 2 つのワイル点に分割される。このときそれぞれのワイル点においてスピンと運動量が互いに平行もしくは反平行にな

論文	種別	次元	電子	ハミルトニアン	ギャップ	温度	磁場	伝導帯の寄与	化学ポテンシャルの		主張:磁化の磁場依存性
									磁場依存性	初期位置	
Kawamura 2023	理論	3次元	ディラック	4x4	あり	任意温度	任意磁場	あり	あり	伝導帯	<ul style="list-style-type: none"> ●(1)低温ではsub-linear(伝導帯+価電子帯) > 伝導帯寄与→0, 価電子帯の寄与による ●(2)高温ではsuper-linear(伝導帯+価電子帯) >化学ポテンシャルの温度/磁場依存に起因する伝導帯寄与の非単調な磁場依存性による ●(3-1)任意磁場, 任意温度で伝導帯寄与: 正 (3-2) 化学ポテンシャルの温度/磁場依存に起因する非単調な磁場依存性 ●(4-1)任意磁場, 任意温度で価電子帯寄与: 負 (4-2)低温でも高温でもsub-linear
Keser 2022	理論	3次元	ディラック	4x4	あり	絶対零度	任意磁場	なし	なし	gap	●絶対零度でsub-linear(価電子帯)
Zhang 2019	理論	3次元	ワイル	2x2	あり (意図的)	絶対零度	量子極限	あり	あり	伝導帯	●絶対零度でsub-linear(伝導帯+価電子帯)
Iwasa 2019	実験	3次元	ディラック			1.3K	任意磁場 (-60T)			伝導帯	●1.3Kでsub-linear(伝導帯+価電子帯)
Pratama 2021	理論	2次元	ワイル	2x2	なし	任意温度	任意磁場	あり	なし	ワイル点	<ul style="list-style-type: none"> ●強磁場/低温極限でsub-linear(伝導帯+価電子帯) >価電子帯寄与による ●弱磁場/高温極限でlinear(伝導帯+価電子帯) >価電子帯から伝導帯への熱励起による

図 5.2.6: 3次元ディラック電子の磁化の磁場依存性に関する先行研究との比較. 3次元ディラック電子の磁化を計算する上でより制限のない条件を記載した欄に色をつけた. 例えば伝導帯の寄与は「あり」の方が「ない」より制限のない条件なので色をつけてある. これを見ると本研究の条件はカノニカル条件下において3次元ディラック電子の磁化の磁場および温度依存性を計算する上でより任意性のある条件になっていることが分かる. 緑の列が条件, 青の列が各論文の主張である.

る. このスピンと運動量の向きの相関が平行の方を右手系, 反平行が左手系と言う. カイラル異常による負の磁気抵抗効が誘起されることは次のように説明できる. 磁場をかけることで時間反転対称性が破れ, 磁場の方向に沿ってディラック点は2つのワイル点に分割し, 2つのワイル電子を形成する. このとき, カイラリティーが異なる右手系ワイル電子と左手系ワイル電子は等しい化学ポテンシャルを持つ. ここに磁場と平行に電場を加えるとカイラリティーの違いによって電場により加速される方向が逆になる. これにより, 一方のワイル電子が反対のカイラリティーを持つ別のワイル電子へポンピングする. その結果, 反対のカイラリティーを持つ2つのワイル電子間で化学ポテンシャルが不均衡になる. これによって, カイラル電流が発生する. このカイラル電流は電場の方向であるため結果として負の磁気抵抗効が誘起されたことになる.

この実験では, Cd_3As_2 ナノワイヤーにおいて, 電場と磁場が平行な場合に大きな負の磁気抵抗が観測された. 温度上昇に伴い負の磁気抵抗は大きくなり, ある温度領域を境にその大きさが減少した. 低温では, キャリア密度が低くフェルミ準位がディラック点に非常に近いので, 磁場によって誘起されるエネルギーギャップの影響で, カイラル異常に基づく負の磁気抵抗が抑制される. 温度上昇に伴い, 熱励起が起これりキャリア密度が増加し, フェルミエネルギーがワイル点から遠ざかる. その結果, 磁場により誘起されたギャップの影響が小さくなり, カイラル異常起因の負の磁気抵抗の寄与が大きくなる. ある温度 (論文では 60K 付近) で負の磁気抵抗が最大となる. その後更に温度が上がると, 次は熱による散乱の効果が増加し負の磁気抵抗は減少する. このように温度上昇に伴うフェルミエネルギーのシフトが負の磁気抵抗の大きさに影響を与えている.

5.2.6 先行研究との比較

本研究の3次元ディラック電子の磁化の磁場依存性について理論と実験の両面で先行研究と比較した(図5.2.6). まず, 磁化 M が低温で sub-linear になる結果(図5.2.6の(1))については, 3次元ディラック電子の伝導帯の寄与も考慮した点が理論として新しい結果である. Keser らによっては3次元ディラック電子を用いて絶対零度における価電子帯寄与のみ考慮した磁化の磁場依存性が求められた [72]. 図におけるその他の理論はワイル電子についての結果である. また, 低温で磁化が sub-linear の磁場依存性になることは 1.3K の低温での Iwasa らによる実験によって示されている [71]. 他の低温領域においても磁化が sub-linear の磁場依存性になることが実験によって示されることも期待される. 次に磁化 M が高温で super-linear になる結果(図5.2.6の(2))は理論として新しい. また, 現在のところ対応する実験もない. 理論としては2次元ワイル電子でワイル点に化学ポテンシャルを固定し, 伝導帯の寄与も含めた Pratama らの計算がある [68]. 彼らは高温/弱磁場極限で磁化の磁場依存性が linear になることを示した. ただ化学ポテンシャルの磁場依存性は考慮されておらず, 化学ポテンシャルはワイル点に固定されている. この状況では伝導帯の寄与の効果が出てくるのは温度による熱励起が起こるときに限られると考えられる. 2次元ワイル電子においても化学ポテンシャルの磁場依存性を考慮した計算がなされ伝導帯寄与の非単調な磁場および温度依存性により, 磁化の磁場依存性が高温で super-linear になることが期待される. 有限温度, 任意磁場で伝導帯寄与 M_c が正になる結果(図5.2.6の(3-1))は理論として新規性がある. 3次元ワイル電子を使った Zhang らによる計算では温度条件が絶対零度であるため量子極限で伝導帯寄与は0である [69]. 2次元ワイル電子では高温/弱磁場極限で価電子帯から伝導帯寄与への熱励起が原因で linear となると Pratama らによって説明されるも [68], 明確に有限磁場で伝導帯寄与が正であるとは分からない. 伝導帯寄与 M_c が化学ポテンシャルの温度/磁場依存性に起因する非単調な磁場依存性になる結果(図5.2.6の(3-2))は理論および実験として新しい. 有限温度, 任意磁場で価電子帯の寄与 M_v が負になる点と高温でも価電子帯寄与は sub-linear になる結果(図5.2.6の(4-1)および(4-2))は理論として新しい. 3次元ディラック電子では絶対零度において任意磁場で価電子帯の寄与は負になり sub-linear になることは Keser らにより示されている [72].

本研究の3次元ディラック電子の磁化の温度依存性について既存の実験と比較した(図5.2.7). まず, 量子極限においても磁化の温度依存性が線形依存になる点が新しい結果である. Otake らにより弱磁場においては Bi の実験によりディラック電子の磁化が弱磁場で線形になることが観測された [77]. 90K – 180K の温度領域において本研究(量子極限 4, 6, 8, 10T) と弱磁場 (0.3T) の Otake らの実験と比較できる. 他の3次元ディラック電子系 (PbTe [75], Sr₃PbO antiperovskite [104]), 3次元ワイル電子である Cd₃As₂ [79] では温度が上昇すると反磁性が減少することが報告されているが, 磁化の線形的な温度依存性があることまでは報告されていない. 最後に, 熱励起と伝導帯寄与 M_c の非単調な磁場および温度依存性によって磁化 M の温度依存性が線形になる点が新しい. Otake らはギャップの温度依存性を仮定することで, 弱磁場における磁化の温度の線形依存性を説明した. 本研究ではギャップの温度依存性は仮定していない.

論文	種別	次元	電子	物質	温度	磁場	主張: 磁化の温度依存性
Kawamura 2023	理論	3次元	ディラック	-	任意温度 (10K- 180K)	量子極限	線形依存 (1)熱励起と (2)化学ポテンシャル温度および磁場依 存に起因する伝導帯寄与の温度依存性
Otake 1980	実験	3次元	ディラック	Bi	90K- 540K	弱磁場 (0.3T)	線形依存 >ギャップの温度依存性を仮定
Akiba 2018	実験	3次元	ディラック	PbTe	2K-30K	~7T	温度上昇により反磁性減少
Suetsugu 2021	実験	3次元	ディラック	Sr3PbO antiperovskite	2K-300K	7T	フェルミエネルギーがDirac点付近で、 温度上昇により反磁性が減少
Pariari 2015	実験	3次元	ワイル	Cd3As2	2K,20K	~7T	温度上昇により反磁性減少

図 5.2.7: 3次元ディラック電子の磁化の温度依存性に関する先行研究との比較。本研究と先行研究を比較した。現時点で3次元ディラック電子の磁化の温度依存性を示した理論はない。緑の列が条件、青の列が各論文の主張である。

第6章

総括

本研究では、系を等温、等積、等密度の条件下で、自由エネルギーを磁場 B と温度 T の関数として計算することで、3次元ディラック電子の磁化 M を調べた。特に、従来の研究では無視されていた化学ポテンシャル μ の磁場と温度依存性を考慮することで、QLにおける磁化 M を計算する上での $\mu(B, T)$ を考慮することの重要性を示した。典型的な例として、自由電子の場合に M は $\mu(B, T)$ によって有限の値に近づくが、磁場と温度依存性を考慮しない μ_0 の場合は、QLで M が消失することが分かった。

ディラック電子の場合、 $M \propto -B^\varphi$ と分類される磁化の磁場依存性は、温度によって変化することが分かった。 E_F をバンド端から測ったフェルミエネルギーとすると、低温 $k_B T \lesssim E_F$ では、 $\varphi \simeq 0.7-0.8$ のような sub-linear の磁場依存性が観察され、従来のディラック電子の研究結果と一致した [67-69, 72]。高温 $k_B T \gtrsim E_F$ では、 $\varphi > 1$ のように磁場依存性が super-linear になった。この φ の定性的な変化は、主に M_c の磁場依存性の非単調性から生じ、 M_c の磁場依存性は μ の磁場 B と温度 T に依存することに起因する。

付録 A

カットオフ関数なしの場合のディラック電子の伝導帯寄与

A.1 伝導帯-キャリア密度 N_c

$$\frac{N_c}{V} = \int_0^\infty \rho_D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \quad (\text{A.1.1})$$

$$= \frac{eB}{2\pi^2 \hbar^2} \sqrt{\frac{m_c}{\Delta}} \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^\infty \times 2 \right) \int_0^\infty \frac{|\varepsilon|}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2 - 2j\hbar\omega_c\Delta}} f(\varepsilon) d\varepsilon \quad (\text{A.1.2})$$

$$= \frac{eB}{2\pi^2 \hbar^2} \sqrt{\frac{m_c}{\Delta}} \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^\infty \times 2 \right) \int_{\sqrt{A}}^\infty \frac{|\varepsilon|}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2 - 2j\hbar\omega_c\Delta}} \frac{1}{1 + e^{\beta(\varepsilon - \mu)}} d\varepsilon \quad (\text{A.1.3})$$

これを無次元化して整理すると、次の形になる。

$$N_c / N_0 = \frac{1}{2\pi^2} \Omega_c M \sqrt{M} \frac{1}{\sqrt{\delta}} \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^\infty \times 2 \right) \int_{\sqrt{\alpha}}^\infty \frac{E}{\sqrt{E^2 - \alpha}} \frac{1}{1 + e^{(E - \eta)}} dE \quad (\text{A.1.4})$$

部分積分をすることで、被積分関数に発散項がないように式変形して、最終的に次の形になる。

$$N_c / N_0 = \frac{1}{2\pi^2} \Omega_c M \sqrt{M} \frac{1}{\sqrt{\delta}} \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^\infty \times 2 \right) \int_{\sqrt{\alpha}}^\infty \frac{\sqrt{E^2 - \alpha}}{(e^{(E - \eta)} + 1)(e^{-(E - \eta)} + 1)} dE \quad (\text{A.1.5})$$

A.2 伝導帯-自由エネルギー F_c

自由電子のときと同様にすると、ディラック電子の伝導帯の自由エネルギー F_c は、

$$F_c = \mu N - k_B T \frac{2eBV}{(2\pi)^2 \hbar} \sum_{n=0}^\infty \sum_{\sigma} \int_0^\infty \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon(n, \sigma, k_z) - \mu)} \right) dk_z \quad (\text{A.2.1})$$

となる．積分変数を k_z から ε に変数変換して，積分の下限を全て 0 に統一する．ディラック電子の磁場中のエネルギー分散から計算される $\frac{dk}{d\varepsilon}$ を代入すると，

$$F_c = \mu N - k_B T \frac{2eBV}{(2\pi)^2 \hbar^2} \sqrt{\frac{m_c}{\Delta}} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\sigma} \int_0^{\infty} \ln \left(1 + e^{-\beta(\varepsilon(n, \sigma, k_z) - \mu)} \right) \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 - \Delta^2 - 2j\hbar\omega_c \Delta}} d\varepsilon \quad (\text{A.2.2})$$

無次元化すると，

$$\beta F_c = \eta N - N_0 \frac{2}{(2\pi)^2} M \frac{1}{\sqrt{\delta}} \Omega_c \sqrt{M} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{\sigma} \int_0^{\infty} \ln \left(1 + e^{-(E-\eta)} \right) \frac{E}{\sqrt{E^2 - \alpha}} dE \quad (\text{A.2.3})$$

となる．ここで積分部分を A とする．被積分関数の分母から $E^2 - \alpha > 0$ であるので，積分区間は $[\sqrt{\alpha}, \infty]$ になる．

$$A = \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \ln \left(1 + e^{-(E-\eta)} \right) \frac{E}{\sqrt{E^2 - \alpha}} dE \quad (\text{A.2.4})$$

$$= \left[\sqrt{E^2 - \alpha} \ln \left(1 + e^{-(E-\eta)} \right) \right]_{\sqrt{\alpha}}^{\infty}$$

$$- \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \sqrt{E^2 - \alpha} \frac{e^{-(E-\eta)} (-1)}{1 + e^{-(E-\eta)}} dE \quad (\text{A.2.5})$$

第一項の極限は 0 になり， A はさらに次の様に変形できる．

$$A = \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \sqrt{E^2 - \alpha} \frac{1}{e^{(E-\eta)} + 1} dE \quad (\text{A.2.6})$$

$$= \left[\frac{1}{2} \left[E\sqrt{E^2 - \alpha} - \alpha \ln \left| E + \sqrt{E^2 - \alpha} \right| \right] \frac{1}{e^{(E-\eta)} + 1} \right]_{\sqrt{\alpha}}^{\infty}$$

$$- \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \frac{1}{2} \left[E\sqrt{E^2 - \alpha} - \alpha \ln \left| E + \sqrt{E^2 - \alpha} \right| \right] \frac{-e^{(E-\eta)}}{(e^{(E-\eta)} + 1)^2} dE \quad (\text{A.2.7})$$

$$= \frac{1}{2} \alpha \ln \sqrt{\alpha} + \frac{1}{2} \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \frac{[E\sqrt{E^2 - \alpha} - \alpha \ln |E + \sqrt{E^2 - \alpha}|]}{(e^{(E-\eta)} + 1)(e^{-(E-\eta)} + 1)} dE \quad (\text{A.2.8})$$

計算の途中で次の積分の公式を使用した．

$$\int \sqrt{x^2 - g} dx = \frac{1}{2} \left[x\sqrt{x^2 - g} - g \ln \left| x + \sqrt{x^2 - g} \right| \right] + C \quad (\text{A.2.9})$$

結果的に伝導帯の自由エネルギー F_c は次の様な形になる．

$$\beta F_c = \eta N - N_0 \frac{2}{(2\pi)^2} M \frac{1}{\sqrt{\delta}} \Omega_c \sqrt{M} \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \left(\frac{1}{2} \alpha \ln \sqrt{\alpha} + \frac{1}{2} \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \frac{[E\sqrt{E^2 - \alpha} - \alpha \ln |E + \sqrt{E^2 - \alpha}|]}{(e^{(E-\eta)} + 1)(e^{-(E-\eta)} + 1)} dE \right) \quad (\text{A.2.10})$$

A.3 伝導帯-磁化 M_c

伝導帯由来の磁化 M_c は次のように、伝導帯電子の自由エネルギー F_c の磁場微分によって求められる。

$$M_c = -\frac{1}{V} \frac{\partial F_c}{\partial B} \quad (\text{A.3.1})$$

ここで、 $R = \beta F_c$ とすると、 M_c は次のようになる。

$$M_c = -\frac{1}{V} \frac{\partial \left(\frac{1}{\beta} R \right)}{\partial \left(\frac{m_c}{\beta \hbar e} \Omega_c \right)} \quad (\text{A.3.2})$$

$$= -\frac{1}{V} \frac{\hbar e}{m_c} \frac{\partial R}{\partial \Omega_c} \quad (\text{A.3.3})$$

$\frac{dR}{d\Omega_c}$ に注目すると、

$$\frac{dR}{d\Omega_c} = \frac{\partial}{\partial \Omega_c} \left[\eta N - N_0 \frac{1}{(2\pi)^2} M \frac{1}{\sqrt{\delta}} \sqrt{M} \Omega_c \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \right] \quad (\text{A.3.4})$$

$$\left(\frac{\alpha \ln \sqrt{\alpha}}{e^{(\sqrt{\alpha}-\eta)} + 1} + \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \frac{[E\sqrt{E^2-\alpha} - \alpha \ln |E + \sqrt{E^2-\alpha}|]}{(e^{(E-\eta)} + 1)(e^{-(E-\eta)} + 1)} dE \right) \quad (\text{A.3.5})$$

となる。 $N = \text{一定}$ であるので $\eta(\Omega_c)$ である。ここで、

$$W = N_0 \frac{1}{(2\pi)^2} M \frac{1}{\sqrt{\delta}} \sqrt{M} \quad (\text{A.3.6})$$

$$W_1 = \frac{\alpha \ln \sqrt{\alpha}}{e^{(\sqrt{\alpha}-\eta)} + 1} \quad (\text{A.3.7})$$

$$W_2 = \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \frac{[E\sqrt{E^2-\alpha} - \alpha \ln |E + \sqrt{E^2-\alpha}|]}{(e^{(E-\eta)} + 1)(e^{-(E-\eta)} + 1)} dE \quad (\text{A.3.8})$$

とおく。 $\eta(\Omega_c)$, $\alpha(\Omega_c, j)$, Ω_c が Ω_c の関数であることに注意して以下変形する。

$$\frac{dR}{d\Omega_c} = \frac{\partial \eta}{\partial \Omega_c} N - \frac{\partial}{\partial \Omega_c} [W \Omega_c (\Sigma \Sigma) (W_1(\alpha, \eta) + W_2(\alpha, \eta))] \quad (\text{A.3.9})$$

$$= \frac{\partial \eta}{\partial \Omega_c} N - W(\Sigma \Sigma) \left[W_1(\alpha, \eta) + W_2(\alpha, \eta) + \Omega_c \left(\frac{\partial W_1(\alpha, \eta)}{\partial \Omega_c} + \frac{\partial W_2(\alpha, \eta)}{\partial \Omega_c} \right) \right] \quad (\text{A.3.10})$$

$\frac{\partial W_1(\alpha, \eta)}{\partial \Omega_c}$ と $\frac{\partial W_2(\alpha, \eta)}{\partial \Omega_c}$ について分けて計算する。

$$\frac{\partial W_1(\alpha, \eta)}{\partial \Omega_c} = \frac{\partial}{\partial \Omega_c} \frac{\alpha \ln \sqrt{\alpha}}{e^{(\sqrt{\alpha}-\eta)} + 1} \quad (\text{A.3.11})$$

$$\begin{aligned} &= \left(\frac{\partial \alpha}{\partial \Omega_c} \frac{\partial}{\partial \alpha} \right) \ln \sqrt{\alpha} \frac{1}{e^{(\sqrt{\alpha}-\eta)} + 1} \\ &+ \left(\frac{\partial \alpha}{\partial \Omega_c} \frac{\partial}{\partial \alpha} \ln \sqrt{\alpha} \right) \alpha \frac{1}{e^{(\sqrt{\alpha}-\eta)} + 1} \\ &+ \frac{\alpha}{\partial \Omega_c} \frac{1}{e^{(\sqrt{\alpha}-\eta)} + 1} \alpha \ln \sqrt{\alpha} \end{aligned} \quad (\text{A.3.12})$$

ここで,

$$\frac{\partial}{\partial \Omega} \frac{1}{e^{(\sqrt{\alpha}-\eta)} + 1} = \frac{\partial}{\partial \alpha} \frac{1}{e^{(\sqrt{\alpha}-\eta)} + 1} \frac{\partial \alpha}{\partial \Omega_c} + \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{1}{e^{(\sqrt{\alpha}-\eta)} + 1} \frac{\partial \eta}{\partial \Omega_c} \quad (\text{A.3.13})$$

$$= \frac{e^{(\sqrt{\alpha}-\eta)}}{(e^{(\sqrt{\alpha}-\eta)} + 1)^2} \left(-j\delta \frac{1}{\sqrt{\alpha}} + \frac{\partial \eta}{\partial \Omega_c} \right) \quad (\text{A.3.14})$$

$$= \frac{1}{2(\cosh(\sqrt{\alpha}-\eta) + 1)} \left(\frac{\partial \eta}{\partial \Omega_c} - j\delta \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \right) \quad (\text{A.3.15})$$

よって, $\frac{\partial W_1(\alpha, \eta)}{\partial \Omega_c}$ は,

$$\begin{aligned} \frac{\partial W_1(\alpha, \eta)}{\partial \Omega_c} &= \frac{j\delta}{e^{(\sqrt{\alpha}-\eta)} + 1} (1 + 2 \ln \sqrt{\alpha}) \\ &\quad + \frac{\alpha \ln \sqrt{\alpha}}{2(\cosh(\sqrt{\alpha}-\eta) + 1)} \left(\frac{\partial \eta}{\partial \Omega_c} - j\delta \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.3.16})$$

と求まる. $\frac{\partial W_2(\alpha, \eta)}{\partial \Omega_c}$ については次のようになる.

$$\frac{\partial W_2(\alpha, \eta)}{\partial \Omega_c} = \frac{\partial}{\partial \Omega_c} \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \frac{[E\sqrt{E^2-\alpha} - \alpha \ln |E + \sqrt{E^2-\alpha}|]}{(e^{(E-\eta)} + 1)(e^{-(E-\eta)} + 1)} dE \quad (\text{A.3.17})$$

$$= \frac{\partial}{\partial \Omega_c} \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \frac{[E\sqrt{E^2-\alpha} - \alpha \ln |E + \sqrt{E^2-\alpha}|]}{2(\cosh(E-\eta) + 1)} dE \quad (\text{A.3.18})$$

ここで, 次の Leibniz 則 [105] により, 微分と積分の順序を変える.

$$\frac{d}{dx} \left(\int_{a(x)}^{b(x)} f(x, t) dt \right) = f(x, b(x)) \frac{d}{dx} b(x) - f(x, a(x)) \frac{d}{dx} a(x) + \int_{a(x)}^{b(x)} \frac{\partial}{\partial x} f(x, t) dt \quad (\text{A.3.19})$$

ただし, $-\infty < a(x), b(x) < \infty$ である. これを適用すると, $\frac{\partial W_2(\alpha, \eta)}{\partial \Omega_c}$ は次の様に変形できる.

$$\frac{\partial W_2(\alpha, \eta)}{\partial \Omega_c} = \lim_{G \rightarrow \infty} \frac{\partial}{\partial \Omega_c} \int_{\sqrt{\alpha}}^G \frac{[E\sqrt{E^2-\alpha} - \alpha \ln |E + \sqrt{E^2-\alpha}|]}{2(\cosh(E-\eta) + 1)} dE \quad (\text{A.3.20})$$

$$\begin{aligned} &= \frac{j\delta \sqrt{\alpha} \ln \sqrt{\alpha}}{2(\cosh(\sqrt{\alpha}-\eta) + 1)} \\ &\quad + \frac{1}{2} \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} \frac{\partial}{\partial \Omega_c} \frac{[E\sqrt{E^2-\alpha} - \alpha \ln |E + \sqrt{E^2-\alpha}|]}{(\cosh(E-\eta) + 1)} dE \end{aligned} \quad (\text{A.3.21})$$

被積分項に注目すると,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \Omega_c} \frac{[E\sqrt{E^2-\alpha} - \alpha \ln |E + \sqrt{E^2-\alpha}|]}{\cosh(E-\eta) + 1} &= \frac{\partial}{\partial \alpha} \left\{ \frac{[E\sqrt{E^2-\alpha} - \alpha \ln |E + \sqrt{E^2-\alpha}|]}{\cosh(E-\eta) + 1} \right\} \frac{\partial \alpha}{\partial \Omega_c} \\ &\quad + \frac{\partial}{\partial \eta} \left\{ \frac{[E\sqrt{E^2-\alpha} - \alpha \ln |E + \sqrt{E^2-\alpha}|]}{\cosh(E-\eta) + 1} \right\} \frac{\partial \eta}{\partial \Omega_c} \end{aligned} \quad (\text{A.3.22})$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{-2j\delta}{\cosh(E-\eta)+1} \left(\frac{E}{2\sqrt{E^2-\alpha}} + \ln |E + \sqrt{E^2-\alpha}| - \frac{\alpha}{2\sqrt{E^2-\alpha}(E + \sqrt{E^2-\alpha})} \right) \\
&+ \left\{ E\sqrt{E^2-\alpha} - \alpha \ln |E + \sqrt{E^2-\alpha}| \right\} \frac{\sinh(E-\eta)}{(\cosh(E-\eta)+1)^2} \frac{\partial\eta}{\delta\Omega_c} \quad (\text{A.3.23})
\end{aligned}$$

と計算できる．この様にして $\frac{\partial W_2(\alpha, \eta)}{\partial \Omega_c}$ は計算された．よってまとめると， M_c は次の様になる．

$$\begin{aligned}
M_c &/ \left(-\frac{1}{V} \frac{\hbar e}{m_c} \right) \\
&= \frac{dR}{\partial \Omega_c} \quad (\text{A.3.24})
\end{aligned}$$

$$= \frac{\partial\eta}{\partial \Omega_c} N - W(\Sigma\Sigma) \left[W_1(\alpha, \eta) + \Omega_c \frac{\partial W_1(\alpha, \eta)}{\partial \Omega_c} + W_2(\alpha, \eta) + \Omega_c \frac{\partial W_2(\alpha, \eta)}{\partial \Omega_c} \right] \quad (\text{A.3.25})$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\partial\eta}{\partial \Omega_c} N - N_0 \frac{1}{(2\pi)^2} M \frac{1}{\sqrt{\delta}} \sqrt{M} \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \\
&\left[\frac{1}{e^{(\sqrt{\alpha}-\eta)}+1} \{ \alpha \ln \sqrt{\alpha} + \Omega_c j \delta (1 + 2 \ln \sqrt{\alpha}) \} + \frac{\Omega_c \alpha \ln \sqrt{\alpha}}{2(\cosh(\sqrt{\alpha}-\eta)+1)} \left(\frac{\partial\eta}{\partial \Omega_c} - j \delta \frac{1}{\sqrt{\alpha}} \right) \right. \\
&+ \frac{\Omega_c j \delta \sqrt{\alpha} \ln \sqrt{\alpha}}{2(\cosh(\sqrt{\alpha}-\eta)+1)} + \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} dE \left\{ \frac{-\Omega_c j \delta}{\cosh(E-\eta)+1} \right. \\
&\left. \left(\frac{E}{2\sqrt{E^2-\alpha}} + \ln |E + \sqrt{E^2-\alpha}| - \frac{\alpha}{2\sqrt{E^2-\alpha}(E + \sqrt{E^2-\alpha})} \right) \right. \\
&\left. \left. + \frac{E\sqrt{E^2-\alpha} - \alpha \ln |E + \sqrt{E^2-\alpha}|}{2(\cosh(E-\eta)+1)} \left(1 + \frac{\Omega_c \sinh(E-\eta)}{\cosh(E-\eta)+1} \frac{\partial\eta}{\partial \Omega_c} \right) \right\} \right] \quad (\text{A.3.26})
\end{aligned}$$

さらに整理すると次の形になる．

$$\begin{aligned}
&M_c / M_0 \\
&= -\frac{\hbar^3}{V} \sqrt{\frac{\beta^3}{m^3}} N \frac{1}{M} \frac{\partial\eta}{\partial \Omega_c} + \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{1}{\sqrt{\delta}} \sqrt{M} \sum_{j=0}^0 \left(\sum_{j=1}^{\infty} \times 2 \right) \\
&\left[\frac{1}{e^{(\sqrt{\alpha}-\eta)}+1} \{ \alpha \ln \sqrt{\alpha} + \Omega_c j \delta (1 + 2 \ln \sqrt{\alpha}) \} + \frac{\Omega_c \alpha \ln \sqrt{\alpha}}{2(\cosh(\sqrt{\alpha}-\eta)+1)} \frac{\partial\eta}{\partial \Omega_c} \right. \\
&+ \int_{\sqrt{\alpha}}^{\infty} dE \left\{ \frac{-\Omega_c j \delta}{\cosh(E-\eta)+1} \right. \\
&\left. \left(\frac{E}{2\sqrt{E^2-\alpha}} + \ln |E + \sqrt{E^2-\alpha}| - \frac{\alpha}{2\sqrt{E^2-\alpha}(E + \sqrt{E^2-\alpha})} \right) \right. \\
&\left. \left. + \frac{E\sqrt{E^2-\alpha} - \alpha \ln |E + \sqrt{E^2-\alpha}|}{2(\cosh(E-\eta)+1)} \left(1 + \frac{\Omega_c \sinh(E-\eta)}{\cosh(E-\eta)+1} \frac{\partial\eta}{\partial \Omega_c} \right) \right\} \right] \quad (\text{A.3.27})
\end{aligned}$$

化学ポテンシャルの磁場依存性がない場合の表式は， $\frac{\partial\eta}{\partial \Omega_c} = 0$ とすれば得られる．

付録 B

磁化と磁化率の単位

書籍や論文によっては単位が異なる様に見える，自由エネルギーから磁化を計算するなどの場合に混乱することがある．ここでは Schoenberg[86] と Solyom[82] の扱っている磁化と磁化率の単位について整理し，本研究で適用すべき磁化や磁化率の公式を確認する．結論として，本論文中の磁化 M の単位は $[A/m]$ であり，磁化率 χ の単位は無次元である．そしてその定義は次の様になる．磁化の定義は，

$$-\frac{1}{V} \frac{\partial F}{\partial B} \quad (\text{B.0.1})$$

であり，磁化と磁化率の関係は次になる．

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} \quad (\text{B.0.2})$$

単位を分析する上で，右辺と左辺の次元が等しいことを \doteq を用いて表す．まず，Schoenberg の磁化の定義については次の様になる． Ω を電子系の熱力学ポテンシャル， B を磁束密度とすると，

$$-\nabla_B \Omega \doteq [A/m] * [m^3] \quad (\text{B.0.3})$$

これは，体積 V の系の磁気モーメントを表しており，これを V で除したものが系の磁化になる．実際，Schoenberg はこの点に注意書きを加えている．Schoenberg の磁化や磁化率の定義は本論文のそれらと本質的に同じであることが確認できた．

Solyom の磁化率の定義については次の様になる．

$$\chi = -\frac{1}{V} \mu_0 \frac{\partial^2 E}{\partial B^2} = \frac{\partial}{\partial \left(\frac{B}{\mu_0} \right)} \left[-\frac{1}{V} \frac{\partial E}{\partial B} \right] \quad (\text{B.0.4})$$

μ_0 は真空の透磁率， B は磁束密度， E は系の内部エネルギーである．

$$\left[-\frac{1}{V} \frac{\partial E}{\partial B} \right] \doteq [A/m] \quad (\text{B.0.5})$$

$$\frac{B}{\mu_0} \doteq [A/m] \quad (\text{B.0.6})$$

より, χ は無次元である. この様にして, Solyom の磁化や磁化率の定義も本論文のそれらと同じであることを確認できた.

また, 種々の量についての次の関係も整理しておく. 磁場の単位 $[A/m]$, 磁束密度の単位 $[wb/m^2] = [T]$, また真空の透磁率 μ_0 の次元は次の様になる.

$$[A/m] \doteq M^0 L^{-1} T^0 I^1 \quad (\text{B.0.7})$$

$$[wb/m^2] \doteq M^1 L^0 T^{-2} I^{-1} \quad (\text{B.0.8})$$

$$\mu_0 \doteq M^1 L^1 T^{-2} I^{-2} \quad (\text{B.0.9})$$

よって, 次の関係が成り立つ.

$$[A/m] \times \mu_0 \doteq [wb/m^2] = [T] \quad (\text{B.0.10})$$

また, 磁気モーメントの次元は, その単位が $[J/T]$ なので,

$$[J/T] \doteq M^0 L^2 T^0 I^1 \quad (\text{B.0.11})$$

である. 以上より,

$$[A/m] \doteq [J/T] \times [m^{-3}] \quad (\text{B.0.12})$$

となることから, 磁化は単位体積あたりの磁気モーメントであることも確認できる.

付録 C

ランダウ量子数の和の上限

カットオフ関数を使用せずに，カットオフエネルギー E_c によって段階的にエネルギー範囲を制限する場合のランダウ量子数の和の上限 j_{max} を考える．磁場中のディラック電子のエネルギー分散

$$\varepsilon = \pm \sqrt{\Delta^2 + 2\Delta \left(\left(n + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}\sigma \right) \hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} \right)} \quad (\text{C.0.1})$$

を無次元化すると，

$$E = s \sqrt{\delta^2 + 2\delta \left(j\Omega_c + \beta \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} \right)} \quad (\text{C.0.2})$$

となる．ここで， $s = \pm$ (+:伝導帯， -:価電子帯) とした．価電子帯の量子数 j の最大値 j_{max}^v とは，その量子数のエネルギー分散の端点のエネルギーがちょうどカットオフエネルギー E_c^v になるような量子数 j^v である．よって，上の分散式に $E = E_c^v, s = -1, j = j_{max}^v, k = 0$ を代入して，

$$E_c^v = -\sqrt{\delta^2 + 2\delta j_{max}^v \Omega_c} \quad (\text{C.0.3})$$

$$\Leftrightarrow j_{max}^v = \frac{E_c^{v2} - \delta^2}{2\delta\Omega_c} \quad (\text{C.0.4})$$

数値計算上は，十分大きい j をとることを考慮して，価電子帯の量子数 j の最大値は $[j_{max}^v] + 1$ の値を使用する． $[]$ はガウス記号である．伝導帯の量子数 j の最大値 j_{max}^c は価電子帯の量子数 j の最大値と同じ大きさにすれば十分である．

カットオフ関数を使用する場合は，伝導帯および価電子帯の量子数 j の最大値は $j_{max}^{(c,v)}$ よりも大きくとる必要がある．カットオフ関数はエネルギーのカットが段階的でなく，緩やかにエネルギー制限を加えるからである．その量子数のエネルギー分散の端点のエネルギーがカットオフ関数の値が十分に 0 に近い値をとるエネルギーになる j を選ぶ必要がある．

付録 D

ディラック電子の磁化 M の凸性

グラフの凹凸を見れば、関数の次数 d が $0 < d < 1$ または、 $d > 1$ がわかる。

$$M = -B^d \quad (0 < d \in \mathbb{R}) \quad (\text{D.0.1})$$

とする。

$$\frac{d^2 M}{dB^2} = -d(d-1)B^{d-2} \quad (\text{D.0.2})$$

$0 < d < 1$ のとき、 $\frac{d^2 M}{dB^2} > 0$ であるので $M(B)$ は下に凸 $d > 1$ のとき、 $\frac{d^2 M}{dB^2} < 0$ であるので $M(B)$ は上に凸となる。

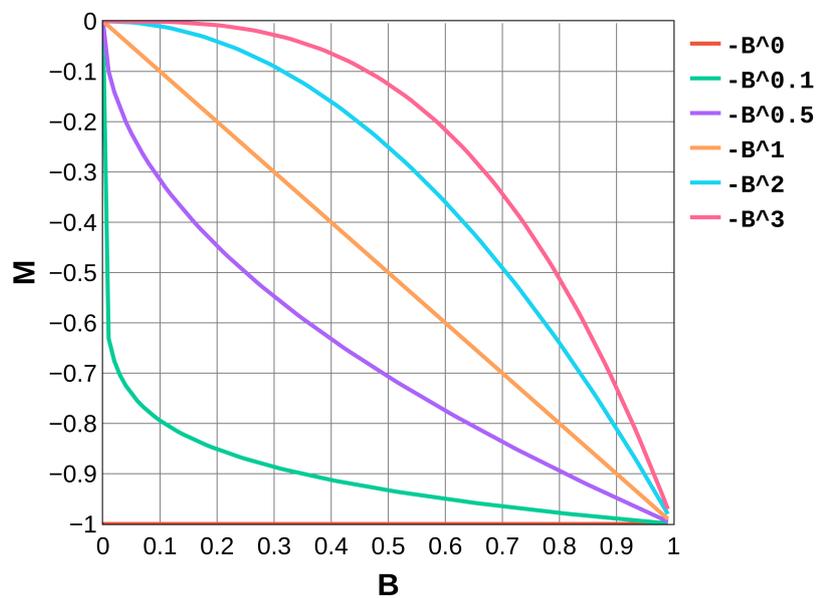


図 D.0.1: Dirac 電子の磁化 M の凸性. $M = -B^d$ ($0 < d \in \mathbb{R}$) とするとき、次数 d の大きさによって関数の凸性が変わる。

付録 E

局所最小二乗法による微分

グラフの区間を分割し、その区間ごとに最小二乗法を利用してグラフの微分値を求める手法を記載する [112]. $\{y_i\}$ をデータ, $f(x)$ を fitting 関数とする. このとき, $G \equiv \sum_{i=1}^N \{y_i - f(x_i)\}^2$ を最小にする $f(x)$ を見つける. つまり, $f(x)$ の各次数の係数をパラメーターとしてこれを動かす. そして G を最小にするパラメーターを発見する.

まず簡単な場合である $f(x) = ax + b$ を考える. $G = \sum_{i=1}^N \{y_i - (ax_i + b)\}^2$ とすると, G が最小になるための必要条件は,

$$\begin{cases} \frac{\partial G}{\partial a} = 0 \\ \frac{\partial G}{\partial b} = 0 \end{cases} \quad (\text{E.0.1})$$

である. これを解くと,

$$\begin{cases} \sum \frac{\partial}{\partial a} \{y_i - ax_i - b\}^2 = 0 \\ \sum \frac{\partial}{\partial b} \{y_i - ax_i - b\}^2 = 0 \end{cases} \quad (\text{E.0.2})$$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma x_i^2 & \Sigma x_i \\ \Sigma x_i & \Sigma 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \Sigma x_i y_i \\ \Sigma y_i \end{bmatrix} \quad (\text{E.0.3})$$

$$= \frac{1}{N \Sigma x_i^2 - (\Sigma x_i)^2} \begin{bmatrix} N \Sigma x_i y_i - \Sigma x_i \Sigma y_i \\ -\Sigma x_i (\Sigma x_i y_i) + \Sigma y_i \Sigma x_i^2 \end{bmatrix} \quad (\text{E.0.4})$$

となる.

次に $f(x) = ax^2 + bx + c$ の場合を考える. $f(x) = ax + b$ の場合と同様にすると, $G = \sum_{i=1}^N \{y_i - (ax_i^2 + bx_i + c)\}^2$ が最小になるために必要条件は, $\frac{\partial G}{\partial a} = 0, \frac{\partial G}{\partial b} = 0, \frac{\partial G}{\partial c} = 0$ である.

$$\begin{cases} \sum \frac{\partial}{\partial a} \{y_i - (ax_i^2 + bx_i + c)\}^2 = 0 \\ \sum \frac{\partial}{\partial b} \{y_i - (ax_i^2 + bx_i + c)\}^2 = 0 \\ \sum \frac{\partial}{\partial c} \{y_i - (ax_i^2 + bx_i + c)\}^2 = 0 \end{cases} \quad (\text{E.0.5})$$

$$\Leftrightarrow \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma x_i^4 & \Sigma x_i^3 & \Sigma x_i^2 \\ \Sigma x_i^3 & \Sigma x_i^2 & \Sigma x_i \\ \Sigma x_i^2 & \Sigma x_i & \Sigma 1 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \Sigma x_i^2 y_i \\ \Sigma x_i y_i \\ \Sigma y_i \end{bmatrix} \quad (\text{E.0.6})$$

となる.

これをさらに一般化する. 各次数の係数を B で表す. 最高次数 n の係数を $B(1)$ とし, 最低次数 0 の係数 (つまり定数) を $B(n+1)$ とする. すると fitting 関数 $f(x)$ は

$f(x) = B(1)x^n + B(2)x^{n-1} + \cdots + B(n+1)x^0$ と表される。このとき、一般化された最小二乗法による fitting 関数の係数を求める式は次のようになる。

$$\begin{bmatrix} B(1) \\ B(2) \\ \vdots \\ B(n+1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum x_i^{2n} & \sum x_i^{2n-1} & \cdots & \sum x_i^n \\ \sum x_i^{2n-1} & \sum x_i^{2n-2} & \cdots & \sum x_i^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sum x_i^n & \sum x_i^{n-1} & \cdots & \sum x_i^0 \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \sum x_i^n y_i \\ \vdots \\ \sum x_i^1 y_i \\ \sum x_i^0 y_i \end{bmatrix} \quad (\text{E.0.7})$$

なお、 (k, j) 成分の次数は $2n - (k - 1) - (j - 1)$ となる。(E.0.7) 式を $\mathbf{s} = T^{-1}\mathbf{u}$ とおくと、行列 T は $(n+1) \times (n+1)$ の対称行列になっており、異なる成分の数は $2n+1$ 個である。

付録 F

 $\int \sqrt{x^2 - g} dx$ の計算

$I = \int \sqrt{x^2 - g} dx$ とおく.

$$I = \int 1 \cdot \sqrt{x^2 - g} dx \quad (\text{F.0.1})$$

$$= x\sqrt{x^2 - g} - \int x \frac{1}{2} (x^2 - g)^{-\frac{1}{2}} \cdot 2x dx \quad (\text{F.0.2})$$

$$= x\sqrt{x^2 - g} - \int \left(\frac{x^2 - g}{\sqrt{x^2 - g}} + \frac{g}{\sqrt{x^2 - g}} \right) dx \quad (\text{F.0.3})$$

$$= x\sqrt{x^2 - g} - I - g \ln |x + \sqrt{x^2 - g}| + C' \quad (\text{F.0.4})$$

したがって,

$$I = \int \sqrt{x^2 - g} dx = \frac{1}{2} \left\{ x\sqrt{x^2 - g} - g \ln |x + \sqrt{x^2 - g}| \right\} + C \quad (\text{F.0.5})$$

謝辞

伏屋教授にはいくら言葉を尽くしても尽くせないほど感謝しております。およそ8年強前の2015年11月に初めてお会いして以来、研究の方法と姿勢、論文の書き方、そしてディラック電子の奥ゆかしさなど様々なことを学ばせていただきました。当初2015年には場の量子論を学びたく、この手法を用いて研究していた伏屋研にとっても魅力を感じて研究室のドアを叩いたことを思い出します。ただ、私は研究よりも勉強を好むたちであり研究者の資質として欠ける部分がありました。しかし、先生はその一面も評価してくださり、比較的自由にさせて頂きました。これにより物理学、数学を自分なりに一歩ずつ興味を失うことなく進めることができました。時には厳しいお言葉もいただき、研究に火が付き、博士として最低限のことはクリアすることができたと思います。博士号取得後も変わらず、物理と数学をするつもりです。研究室でも人一倍抜いづらい人間であったと思いますが、最後までバランスの良い接し方をしていただきありがとうございました。8年強という長い間、本当にありがとうございました。

次に本博士論文の審査を担当して頂いた先生方、松林先生、佐々木先生、斎藤先生、池田先生に感謝を申し上げます。審査会において研究成果の意義そして内容の理解が進むご質問、ご意見を頂戴いたしました。池田先生以外の先生方については学部、そして大学院で授業を受けておまして、私としては馴染みのある思い出深い先生方に私の発表を聞いていただきとても嬉しく思っております。また、池田先生につきましても、強磁場の実験のご専門の方に私の発表を聞いていただけただという事で大変ありがたく思っております。特に松林先生には松林研のメンバーと共にフットサルなどでも交流させていただき大学生活を豊かにすることができました。重ねて皆様に厚く感謝を申し上げます。

伏屋研究室で関わって頂いた皆様に感謝を申し上げます。まず同期の新出君と野間口君には大変お世話になりました。M1の時は先生がフランスに行っており不在の中、三人(アドバイザーとして早坂さん)でなんとかAGD(Abrikosov-Gorkov-Dzvaloshinski)を進めることができました。私と違い、野間口君はあまり理論や物理が好きなタイプでなく、新出君がその間の性質でした。また、性格については私と新出君はどちらかという主張が強いタイプで、野間口君は聖人のように優しい言い方をするタイプでした。3人それぞれタイプが違い、だからこそ輪講も研究生活もうまく行ったと思っております。また、物理だけでなく、卓球やキャッチボールをして研究の疲れを取りながら物理に勤しんだことは今でも宝物です。彼らが修士を卒業して5年弱立ちますが、これからも生涯続く、大学同期、研究室での戦友だと思っております。同期といえば、山田君もそうです。博士1年からは同じ環境で研究生活を送ることができとても感謝しております。山田君には真の研究姿勢と方法を見せつ

けられた気がします。博士課程のお手本のような方でとても刺激を受けました。また、体力お化けのような性質の持ち主で山田君の自転車の旅の話の聞くことが楽しみでした。成功する必要条件として体力があることを感じ取らせていただきました。先輩の大和田さん、早坂さん、猪崎さん、渡部さんに感謝申し上げます。大和田さんには、物理のことはもちろん、M1の時はドイツ語を教えてもらったりなどしていただきました。世話好きで丁寧なためよく頼りにしていました。猪崎さんについては、日頃は多くお話することはなかったものの Altland-Simons や超伝導講義録作成で関ることができ嬉しく思っております。一度カラオケに誘い、来て頂いた時は驚きました。渡部さんにもお世話になりました。勉強や研究は好きな方ではなかったと記憶しておりますが、質問すれば返ってきたり、また面白いお話や知識を教えて頂いたり勉強させていただきました。渡部さんと早坂さんと研究室そして飲み屋で物理のこと含めお話ししたことは良い思い出です。最後に早坂さん、研究室で一緒にの時や卒業しても突然の電話などで議論させていただきとても感謝しております。解けない問題があっても早坂さんと話しているとよく会話の中で自己解決できたり、また議論の中で解決させて頂いたり、教えて頂いたりとても楽しい時間を過ごさせていただきました。AGDの輪講でアドバイザーとしてお時間を頂戴しているにも関わらず生意気な態度で一度怒らせてしまったことがあります。もう忘れているかもしれませんが、ご迷惑をおかけいたしました。総じてありがとうございました。これからも頼りにしています。後輩の皆様にも感謝申し上げます。浅香君、狩野君、菊地君、北河君、特に粟島君。ありがとうございました。浅香君、粟島君とは物理の話はもちろん、寺子屋、Altland-Simons、超伝導講義録作成でもお世話になりました。狩野君とは一緒に Schoenberg を解読しました。修士を卒業するときにくれたお酒ありがとうございました。そろそろ飲めそうです。菊地君とは寺子屋で一緒でした。階段の踊り場で定常波でラ?の音を作って遊んだことを覚えています。北河君にも感謝申し上げます。彼はディラック電子の軌道反磁性の研究室での先行研究者です。彼の研究を引き継いで私は研究を始めました。彼が修士でまとめ上げていた仕事があったからこそ、自由電子そしてディラック電子の軌道反磁性の現状整理を短時間にすることができ、また問題点を把握しやすかったです。それが、カノニカル条件とグランドカノニカル条件を意識し、計算の初めから化学ポテンシャルの磁場依存性を考えるべきことを思いつくことができました。また、ディラックの価電子帯から物理的に無意味な振動が出ることは彼の時にすでにわかっていたことでした。そのため、その問題を念頭に置き研究をすることができ、それを解決する時間と心の余裕がありました。私の研究は彼の仕事があった上にあります。厚く感謝を申し上げます。最後に粟島君、彼は物理の良い話相手になってくれただけでなく精神的な支えにもなってくれました。博士の辛い時期も散歩、ランニング、飲み歩きなど様々な機会に誘ってくれたり、卒業しても気にかけてくれたり、相談に乗ってもらったりしてもらいとても感謝しております。早坂さんと同じく今後も頼りにしております。ここには、記していない伏屋研の方々にももちろん様々に支えてもらいました。最後に重ねてですが、伏屋研の皆様感謝申し上げます。

博士論文執筆中は恋人のさやかには精神的にとっても支えてもらいました。仕事の疲れもある中、最後までやり切ることができたことについては彼女のおかげだと思います。心から感謝しております。母方祖父には生前に活力をいただきました。卒論、修論の内容を説明し分

からないながらも最後まで聞いていただきました。両家祖母にもコロナ禍で山口で研究をしていた時に生活の援助をしてもらいました。特に父方祖母には東京の下宿先にも私の好物を送ってくれるなどして助けていただきました。とても感謝しております。妹にも感謝を申し上げます。これまでの大学生活や研究生活で多々心労をかけた部分もあると思っています。書き出すには細かい援助もありました。そして最後に私の両親に感謝を申し上げます。二人からは他の支援もありますが、経済的に生まれてから大学院卒業まで援助してもらいました。小学校の時に物理を好きになり、大学で物理学の研究をし、今も物理を好きでいられているのは両親の援助のおかげであると思います。博士進学にあたっては、父親に博士に進学したいとのプレゼンをしました。その結果受け入れてもらうことができ博士に進むことができました。感謝しています。そして、卒業論文と修士論文の最後にも書きましたが、私の心の支えの一つである愛犬の reo にも心から感謝申し上げます。

参考文献

- 1) C. L. Kane and E. J. Mele, Physical review letters **95**, 226801 (2005).
- 2) L. Fu and C. L. Kane, Physical Review B **76**, 045302 (2007).
- 3) D. Hsieh et al., Nature **452**, 970 (2008).
- 4) Y. Chen et al., science **325**, 178 (2009).
- 5) M. Z. Hasan and C. L. Kane, Reviews of modern physics **82**, 3045 (2010).
- 6) K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, Physical review letters **45**, 494 (1980).
- 7) R. B. Laughlin, Physical Review B **23**, 5632 (1981).
- 8) D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, Physical review letters **49**, 405 (1982).
- 9) B. I. Halperin, Physical review B **25**, 2185 (1982).
- 10) S. Girvin and R. Prange, (1987).
- 11) Y. Hatsugai, Journal of Physics: Condensed Matter **9**, 2507 (1997).
- 12) D. Sheng, Z. Weng, L. Sheng, and F. Haldane, Physical review letters **97**, 036808 (2006).
- 13) J. Ye et al., Physical review letters **83**, 3737 (1999).
- 14) R. Yu et al., science **329**, 61 (2010).
- 15) Z. Qiao et al., Physical Review B **82**, 161414 (2010).
- 16) C.-Z. Chang et al., Science **340**, 167 (2013).
- 17) N. Kumar, S. N. Guin, C. Felser, and C. Shekhar, Physical Review B **98**, 041103 (2018).
- 18) W. Rao et al., Physical Review B **103**, 155415 (2021).
- 19) M. N. Ali et al., Nature **514**, 205 (2014).
- 20) T. Liang et al., Nature materials **14**, 280 (2015).
- 21) J. McClure, Physical Review **104**, 666 (1956).
- 22) H. Fukuyama, Journal of the Physical Society of Japan **76**, 043711 (2007).
- 23) A. Kobayashi, Y. Suzumura, and H. Fukuyama, Journal of the Physical Society of Japan **77**, 064718 (2008).
- 24) Y. Fuseya, M. Ogata, and H. Fukuyama, Physical review letters **102**, 066601 (2009).
- 25) M. Koshino and T. Ando, Phys. Rev. B **81**, 195431 (2010).
- 26) M. Faraday, Exp. Res. Ser. XX , 27 (1845).

- 27) R. M. Bozorth, *Rev. Mod. Phys.* **19**, 29 (1947).
- 28) Y. Fuseya, M. Ogata, and H. Fukuyama, *J. Phys. Soc. Jpn.* **84**, 012001 (2015).
- 29) L. Landau, *Z. Phys.* **64** (1930).
- 30) R. Peierls, *Z. Phys.* **80** (1933).
- 31) Y. Liu and R. E. Allen, *Phys. Rev. B* **52**, 1566 (1995).
- 32) E. N. Adams, *Phys. Rev.* **89**, 633 (1953).
- 33) J. Hebborn and E. Sondheimer, *Phys. Rev. Lett.* **2**, 150 (1959).
- 34) E. Blount, *Physical Review* **126**, 1636 (1962).
- 35) G. Wannier and U. Upadhyaya, *Physical Review* **136**, A803 (1964).
- 36) S. Ichimaru, *J. Phys. Soc. Jpn.* **20**, 520 (1965).
- 37) L. M. Roth, *Physical Review* **145**, 434 (1966).
- 38) H. Fukuyama and R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **27**, 604 (1969).
- 39) P. Wolff, *J. Phys. Chem. Solids* **25**, 1057 (1964).
- 40) H. Fukuyama and R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **28**, 570 (1970).
- 41) K. Y. Heung, *Summer Student Research Presentations* (2005).
- 42) A. V. Etingshausen and W. Nernst, *Annalen der Physik und Chemie* **265**, 343 (1886).
- 43) P. Kapitza, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **119**, 358 (1928).
- 44) L. Schubnikov and W. J. de Haas, *Comm. Phys. Lab. Leiden* **207**, d (1930).
- 45) W. J. de Haas and P. M. van Alphen, *Comm. Phys. Lab. Leiden* **212**, a (1930).
- 46) J. Galt, W. Yager, F. Merritt, B. Cetlin, and H. Dah Jr, *Physical Review* **100**, 748 (1955).
- 47) B. A. Green Jr and B. Chandrasekhar, *Physical Review Letters* **11**, 331 (1963).
- 48) D. Shoenberg and M. Z. Uddin, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A-Mathematical and Physical Sciences* **156**, 687 (1936).
- 49) D. Shoenberg, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **170**, 341 (1939).
- 50) H. Jones, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A-Mathematical and Physical Sciences* **147**, 396 (1934).
- 51) H. Jones, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A-Mathematical and Physical Sciences* **155** (1936).
- 52) S. Mase, *Journal of the Physical Society of Japan* **13**, 434 (1958).
- 53) L. G. Ferreira, *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **28**, 1891 (1967).
- 54) S. Golin, *Physical Review* **166**, 643 (1968).
- 55) J. Galt, W. Yager, F. Merritt, B. Cetlin, and A. Brailsford, *Physical Review* **114**, 1396 (1959).
- 56) B. Abeles and S. Meiboom, *Physical Review* **101**, 544 (1956).
- 57) J. Babiskin, *Physical Review* **107**, 981 (1957).
- 58) W. Boyle, F. Hsu, and J. Kunzler, *Physical Review Letters* **4**, 278 (1960).

- 59) R. Brown, R. Hartman, and S. Koenig, *Physical Review* **172**, 598 (1968).
- 60) W. Engeler, *Physical Review* **129**, 1509 (1963).
- 61) R. N. Brown, J. G. Mavroides, and B. Lax, *Physical Review* **129**, 2055 (1963).
- 62) M. Maltz and M. Dresselhaus, *Physical Review B* **2**, 2877 (1970).
- 63) R. Isaacson and G. Williams, *Physical Review* **185**, 682 (1969).
- 64) 伏屋雄紀, *物性研究* **90**, 537 (2008).
- 65) 下村理, *圧力技術* **11**, 144 (1973).
- 66) L. Díaz-Sánchez, A. Romero, M. Cardona, R. Kremer, and X. Gonze, *Physical review letters* **99**, 165504 (2007).
- 67) Z. Li et al., *Phys. Rev. B* **91**, 094429 (2015).
- 68) F. Pratama, M. S. Ukhtary, and R. Saito, *Phys. Rev. B* **103**, 245408 (2021).
- 69) C.-L. Zhang et al., *Nat. Commun.* **10**, 1 (2019).
- 70) K. Akiba et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **84**, 054709 (2015).
- 71) A. Iwasa et al., *Sci. Rep.* **9**, 1 (2019).
- 72) A. C. Keser, Y. Lyanda-Geller, and O. P. Sushkov, arXiv preprint arXiv:2101.09714 (2021).
- 73) P. Stiles, E. Burstein, and D. Langenberg, *Physical Review Letters* **6**, 667 (1961).
- 74) A. Svane et al., *Physical Review B* **81**, 245120 (2010).
- 75) K. Akiba et al., *Phys. Rev. B* **98**, 115144 (2018).
- 76) S. Kawakatsu et al., *J. Phys. Soc. Jpn.* **88**, 013704 (2019).
- 77) S. Otake, M. Momiuchi, and N. Matsuno, *J. Phys. Soc. Jpn.* **49**, 1824 (1980).
- 78) Z. Wang, H. Weng, Q. Wu, X. Dai, and Z. Fang, *Physical Review B* **88**, 125427 (2013).
- 79) A. Pariari, P. Dutta, and P. Mandal, *Phys. Rev. B* **91**, 155139 (2015).
- 80) R. Peierls, *Z. Phys.* **81** (1933).
- 81) M. Blackman, *Proc. R. Soc. London, Ser. A* **166**, 1 (1938).
- 82) J. Sólyom, *Fundamentals of the Physics of Solids*, volume 2, Springer Science & Business Media, 2008.
- 83) 江沢洋, *量子力学 (I)*, 裳華房, 2002.
- 84) J. J. Sakurai and E. D. Commins, *Modern quantum mechanics*, revised edition, 1995.
- 85) B. Savoie, *Reviews in Mathematical Physics* **27**, 1550019 (2015).
- 86) D. Shoenberg, *Magnetic oscillations in metals*, Cambridge university press, 2009.
- 87) L. Onsager, *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* **43**, 1006 (1952).
- 88) L. Landau and E. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics* **1980**, 1 (1980).
- 89) A. B. Pippard, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **305**, 291 (1968).
- 90) R. Levien, *Rapp. tech* (2008).

- 91) A. Akhieser, J. Phys.(Ussr) **1**, 277 (1939).
- 92) I. Lifshitz and A. Kosevich, Sov. Phys. JETP **2**, 636 (1956).
- 93) M. Willatzen and L. C. L. Y. Voon, *The $k \cdot p$ Method*, Springer Science & Business Media, 2009.
- 94) J. M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).
- 95) M. Cohen and E. Blount, Philos. Mag. **5**, 115 (1960).
- 96) P. A. M. Dirac, Proc. R. Soc. London, Ser. A **117**, 610 (1928).
- 97) C. Kittel, *Introduction to solid state physics*, John Wiley & sons, inc, 2005.
- 98) Y. Yafet, g factors and spin-lattice relaxation of conduction electrons, in *Solid state physics*, volume 14, pages 1–98, Elsevier, 1963.
- 99) N. W. Ashcroft and N. Mermin, Physics (New York: Holt, Rinehart and Winston) Appendix C (1976).
- 100) H. Fukuyama, Progress of Theoretical Physics **45**, 704 (1971).
- 101) M. Ogata and H. Fukuyama, Journal of the Physical Society of Japan **84**, 124708 (2015).
- 102) J. Hebborn and E. Sondheimer, Journal of Physics and Chemistry of Solids **13**, 105 (1960).
- 103) J. Hebborn, J. Luttinger, E. Sondheimer, and P. Stiles, Journal of Physics and Chemistry of Solids **25**, 741 (1964).
- 104) S. Suetsugu et al., Physical Review B **103**, 115117 (2021).
- 105) 高木貞治, 解析概論, 岩波書店, 1983.
- 106) 長岡洋介, 統計力学, volume 7, 岩波書店, 1994.
- 107) L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics*, volume 5, Elsevier, 2013.
- 108) Z. Zhu, B. Fauqué, Y. Fuseya, and K. Behnia, Physical Review B **84**, 115137 (2011).
- 109) Z. Zhu, B. Fauqué, K. Behnia, and Y. Fuseya, Journal of Physics: Condensed Matter **30**, 313001 (2018).
- 110) Y. Watanabe et al., Journal of the Physical Society of Japan **90**, 053701 (2021).
- 111) C.-Z. Li et al., Nature communications **6**, 10137 (2015).
- 112) W. メンケ, 離散インパース理論 : 逆問題とデータ解析, 古今書院, 1997.

関連論文の印刷公表の方法及び時期

- (1) 全著者名 : Shogo Kawamura and Yuki Fuseya
論文題目 : 「Orbital magnetization of three-dimensional Dirac electrons
in the quantum limit」
印刷公表の方法及び時期 :
令和5年3月 J. Phys. Condens. Matter **35** 225801(2023)