スピンと軌道の電子論

(2021/07/14　堀 文哉)

第 3 章 遍歴電子系

3.6 Landau 反磁性

○ 3.6.1 古典論の復習

調和ポテンシャルと磁場下での電子のハミルトニアン H と角運動量の z 成分 $\hbar l_z$ は，対称ケージ $\boldsymbol{A}=(-y,x,0)H/2$ を用いて，

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m}\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2+\frac{1}{2}m\omega_0^2\left(x^2+y^2\right) \qquad (3.97)\\ &= \frac{1}{2m}(p_x^2+p_y^2)+\omega_L(p_yx-p_xy)+\frac{1}{2}m(\omega_L^2+\omega_0^2)\left(x^2+y^2\right)\\ &= m\omega\left(\omega_1r_0^2+\omega_2R^2\right)=\frac{\omega}{m\omega_1}\left(\pi_x^2+\pi_y^2\right)+m\omega\omega_2\left(X^2+Y^2\right)\\ \hbar l_z &= [\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}]_z=\frac{\omega}{m\omega_1^2}\left(\pi_x^2+\pi_y^2\right)-m\omega\left(X^2+Y^2\right) \end{aligned}$$

ここで，$\omega_\mathrm{L}\equiv eH/2mc$ は Larmor 振動数であり，

$$\omega\equiv\sqrt{\omega_0^2+\omega_\mathrm{L}^2},\quad \omega_1\equiv\omega+\omega_\mathrm{L},\quad \omega_2\equiv\omega-\omega_\mathrm{L}\geqq 0 \qquad (3.101)$$

$$\pi_x=\frac{\omega_1}{2\omega}\left(p_x-m\omega y\right),\quad \pi_y=\frac{\omega_1}{2\omega}\left(p_y+m\omega x\right)$$

$$X=\frac{1}{2}\left(x-\frac{p_y}{m\omega}\right),\quad Y=\frac{1}{2}\left(y+\frac{p_x}{m\omega}\right) \qquad (3.102)$$

とおいた。また，$X+iY\equiv Re^{-i\omega_2t}$（サイクロトロンの中心位置），$\pi_x+i\pi_y\equiv im\omega_1r_0e^{i\omega_1t}$（サイクロトロン運動の動的運動量）である。$(\pi_x,\pi_y)$ および (X,Y) をそれぞれ共役な正準運動量と正準座標と考えれば，2 つの調和振動子からなる系と見なせる。

○今回の目標

3.6.2 では磁場下での電子の運動を量子論で議論し，離散的なエネルギー準位（Landau 準位）をとることを理解する。3.6.3 では，磁場下での状態密度や自由エネルギーを計算し，Landau 反磁性を導出する。

3.6.2　量子論

◆量子論におけるハミルトニアン

まず，(π_x, π_y) および (X, Y) の交換関係を計算する。(π_x, π_y) および (X, Y) の交換関係のうちゼロでないものは

$$[\pi_x, \pi_y] = -\frac{i\hbar m\omega_1^2}{2\omega}, \quad [X, Y] = \frac{i\hbar}{2m\omega} \equiv il_B^2 \tag{3.103}$$

である。ここで，**磁気長** $l_B \equiv \sqrt{\hbar/2m\omega}$ を導入した。

○ (π_x, π_y)，(X, Y) の交換関係の具体的な計算

$[x, p_x] = [y, p_y] = i\hbar$ の交換関係を用いて計算する。

$$\begin{aligned}
[\pi_x, \pi_y] &= \frac{\omega_1^2}{4\omega^2}[p_x - m\omega y, p_y + m\omega x] \\
&= \frac{\omega_1^2}{4\omega^2}([p_x, p_y] + [p_x, m\omega x] - [m\omega y, p_y] - [m\omega y, m\omega x]) \\
&= \frac{\omega_1^2}{4\omega^2}(0 - m\omega i\hbar - m\omega i\hbar - 0) \\
&= -\frac{i\hbar m\omega_1^2}{2\omega} \\
[X, Y] &= \frac{1}{4}\left[x - \frac{p_y}{m\omega}, y + \frac{p_x}{m\omega}\right] \\
&= \frac{1}{4}\left([x, y] + \left[x, \frac{p_x}{m\omega}\right] - \left[y, \frac{p_y}{m\omega}\right] - \frac{1}{m^2\omega^2}[p_x, p_y]\right) \\
&= \frac{1}{4}\left(0 + \frac{i\hbar}{m\omega} + \frac{i\hbar}{m\omega} + 0\right) = \frac{i\hbar}{2m\omega}
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
[\pi_x, X] &= \frac{\omega_1}{4\omega}[p_x - m\omega y, x - \frac{p_y}{m\omega}] \\
&= \frac{\omega_1}{4\omega}\left([p_x, x] - \left[p_x, \frac{p_y}{m\omega}\right] - [m\omega y, x] - \left[m\omega y, \frac{p_y}{m\omega}\right]\right) \\
&= \frac{1}{4}(-i\hbar - 0 - 0 + i\hbar) = 0 \\
[\pi_y, Y] &= \frac{\omega_1}{4\omega}[p_y + m\omega x, y + \frac{p_x}{m\omega}] \\
&= \frac{\omega_1}{4\omega}\left([p_y, y] + \left[p_y, \frac{p_x}{m\omega}\right] + [m\omega x, y] + \left[m\omega x, \frac{p_x}{m\omega}\right]\right) \\
&= \frac{1}{4}(-i\hbar - 0 - 0 + i\hbar) = 0 \\
[\pi_x, Y] &= \frac{\omega_1}{4\omega}[p_x - m\omega y, y + \frac{p_x}{m\omega}] \\
&= \frac{\omega_1}{4\omega}\left([p_x, y] + \left[p_x, \frac{p_x}{m\omega}\right] - [m\omega y, y] - \left[m\omega y, \frac{p_x}{m\omega}\right]\right) \\
&= 0 \\
[\pi_y, X] &= \frac{\omega_1}{4\omega}[p_y + m\omega x, x - \frac{p_y}{m\omega}] \\
&= \frac{\omega_1}{4\omega}\left([p_y, x] - \left[p_y, \frac{p_y}{m\omega}\right] + [m\omega x, x] - \left[m\omega x, \frac{p_y}{m\omega}\right]\right) \\
&= 0
\end{aligned}
$$

新たに下降演算子 $a.b$ を

$$
\begin{aligned}
a &\equiv i\sqrt{\frac{\omega}{\hbar m\omega_1^2}}\,(\pi_x - i\pi_y) = \frac{1}{2\sqrt{2}l_B}(x - iy) + \frac{il_B}{\sqrt{2}\hbar}\,(p_x - ip_y) \\
b &\equiv \frac{1}{\sqrt{2}l_B}(X + iY) = \frac{1}{2\sqrt{2}l_B}(x + iy) + \frac{il_B}{\sqrt{2}\hbar}\,(p_x + ip_y)
\end{aligned}
\tag{3.104}
$$

のように導入すれば，上昇演算子は

$$
\begin{aligned}
a^\dagger &= -i\sqrt{\frac{\omega}{\hbar m\omega_1^2}}\left(\pi_x + i\pi_y\right) = \frac{1}{2\sqrt{2}l_B}(x+iy) - \frac{il_B}{\sqrt{2}\hbar}\left(p_x + ip_y\right) \\
b^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2}l_B}(X - iY) = \frac{1}{2\sqrt{2}l_B}(x-iy) - \frac{il_B}{\sqrt{2}\hbar}\left(p_x - ip_y\right)
\end{aligned}
$$

となり，$[a, a^\dagger]$ および $[b, b^\dagger]$ を計算すると

$$
\begin{aligned}
\left[a, a^\dagger\right] &= \frac{\omega}{\hbar m\omega_1^2}\left([\pi_x, \pi_x] + i[\pi_x, \pi_y] - i[\pi_y, \pi_x] + [\pi_y, \pi_y]\right) \\
&= \frac{\omega}{\hbar m\omega_1^2}\left(0 + \frac{\hbar m\omega_1^2}{2\omega} + \frac{\hbar m\omega_1^2}{2\omega} + 0\right) \\
&= 1 \\
\left[b, b^\dagger\right] &= \frac{1}{2l_B^2}\left([X, X] + i[Y, X] - i[X, Y] + [Y, Y]\right) \\
&= \frac{1}{2l_B^2}(0 + l_B^2 + l_B^2 + 0) \\
&= 1
\end{aligned}
$$

である。また，(π_x, π_y) および (X, Y) の交換関係のうちゼロでないものは (3.103) の 2 つだけなので $[a, b] = [a^\dagger, b] = [a, b^\dagger] = [a^\dagger, b^\dagger] = 0$ である。これらを用いると，ハミルトニアン H と角運動量の z 成分 l_z は

$$
H = \hbar\omega_1\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_2\left(b^\dagger b + \frac{1}{2}\right) \tag{3.105}
$$

$$
l_z = a^\dagger a - b^\dagger b \tag{3.106}
$$

のように表される。

○ハミルトニアン H と角運動量の z 成分 l_z の具体的な計算

$$
\begin{aligned}
\hbar\omega_1\left(a^\dagger a+\frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{2}\hbar\omega_1(a^\dagger a+aa^\dagger) \qquad (\because \left[a,a^\dagger\right]=1)\\
&= \frac{1}{2}\hbar\omega_1\Big\{\frac{\omega}{\hbar m\omega_1^2}(\pi_x^2-i\pi_x\pi_y+i\pi_y\pi_x+\pi_y^2)\\
&\qquad\qquad +\frac{\omega}{\hbar m\omega_1^2}(\pi_x^2+i\pi_x\pi_y-i\pi_y\pi_x+\pi_y^2)\Big\}\\
&= \frac{\omega}{m\omega_1}\left(\pi_x^2+\pi_y^2\right)\\
\hbar\omega_2\left(b^\dagger b+\frac{1}{2}\right) &= \frac{1}{2}\hbar\omega_2(b^\dagger b+bb^\dagger) \qquad (\because \left[b,b^\dagger\right]=1)\\
&= \frac{1}{2}\hbar\omega_2\Big\{\frac{1}{2l_B^2}(X^2+iXY-iYX+Y^2)\\
&\qquad\qquad +\frac{1}{2l_B^2}(X^2-iXY+iYX+Y^2)\Big\}\\
&= m\omega\omega_2\left(X^2+Y^2\right)
\end{aligned}
$$

であるから，

$$
\begin{aligned}
\hbar\omega_1\left(a^\dagger a+\frac{1}{2}\right)+\hbar\omega_2\left(b^\dagger b+\frac{1}{2}\right) &= \frac{\omega}{m\omega_1}\left(\pi_x^2+\pi_y^2\right)+m\omega\omega_2\left(X^2+Y^2\right)\\
a^\dagger a-b^\dagger b &= \frac{\omega}{\hbar m\omega_1^2}\left(\pi_x^2+\pi_y^2\right)-\frac{m\omega}{\hbar}\left(X^2+Y^2\right)
\end{aligned}
$$

これらを古典論のときの計算と比較すれば (3.105) と (3.106) が導ける。

◆量子論における固有エネルギーと固有状態

独立な 2 つの調和振動子の和になっているので，ハミルトニアン H の固有状態はゼロ以上の整数 n, m を用いて

$$|n, m\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!m!}} \left(a^\dagger\right)^n \left(b^\dagger\right)^m |0, 0\rangle \tag{3.107}$$

のように表され，固有エネルギーは

$$E(n, m) = \hbar\omega_1 \left(n + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_2 \left(m + \frac{1}{2}\right) \tag{3.108}$$

である。[*1] $|0, 0\rangle$ は基底状態であり，$a|0, 0\rangle = b|0, 0\rangle = 0$ である。
$l_z|n, m\rangle = (n - m)|n, m\rangle$ が成り立つので，$|n, m\rangle$ は角運動量の固有状態（固有値 $n - m$）でもある。

---

*1 一次元調和振動子 $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ を思い出してほしい。$a = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{i}{m\omega}p\right)$, $a^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\left(x + \frac{i}{m\omega}p\right)$ を導入すると，ハミルトニアンは

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

と書き換えられ，固有状態は

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}}\left(a^\dagger\right)^n |0\rangle$$

と表されるのだった。$|n+1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n+1}}a^\dagger|n\rangle, |n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}a|n\rangle$ が成り立つので，固有エネルギーは

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

であった。

◆磁気長 l_B の物理的意味

軌道の広がりの 2 乗 $r_\perp^2 \equiv x^2 + y^2$ の期待値を計算したい。(3.104) から

$$
\begin{aligned}
b + a^\dagger &= \frac{1}{\sqrt{2} l_B}(x + iy) \\
b^\dagger + a &= \frac{1}{\sqrt{2} l_B}(x - iy)
\end{aligned}
$$

なので

$$
\begin{aligned}
(b + a^\dagger)(b^\dagger + a) &= \frac{1}{2 l_B^2}(x^2 + y^2) \\
\therefore x^2 + y^2 &= 2 l_B^2 (b b^\dagger + b a + a^\dagger b^\dagger + a^\dagger a)
\end{aligned}
$$

よって基底状態 $|0,0\rangle$ の軌道の広がりの 2 乗の期待値は

$$
\begin{aligned}
\langle r_\perp^2 \rangle &\equiv \langle x^2 + y^2 \rangle \\
&= \langle 0,0 | x^2 + y^2 | 0,0 \rangle \\
&= 2 l_B^2 \langle 0,0 | (b b^\dagger + b a + a^\dagger b^\dagger + a^\dagger a) | 0,0 \rangle \\
&= 2 l_B^2
\end{aligned}
$$

であり，磁気長 l_B は，後に説明する基底状態の Gauss 関数の拡がりを表す。[*2] $\omega_0 = 0$（調和ポテンシャルがゼロ）のとき，$\omega_1 = 2\omega_\mathrm{L} \equiv \omega_\mathrm{c}$, $\omega_2 = 0$, $\omega = \omega_\mathrm{L} = \omega_\mathrm{c}/2$，$l_B = \sqrt{\hbar/m\omega_c} = \sqrt{\hbar c/eH}$ となる。$\omega_0 = 0$ のときの古典

[*2] 教科書では $\langle r_\perp^2 \rangle \equiv \langle x^2 + y^2 \rangle = \frac{2}{m} \frac{\partial E(0,0)}{\partial(\omega_0^2)} = \frac{\hbar}{m\omega} = 2 l_B^2$ という表式で計算されている。

的なエネルギーは $m\omega\left(\omega_1 r_0^2+\omega_2 R^2\right)=m\omega_c^2 r_0^2/2$ であり, 量子論での基底状態のエネルギーは $E(0,0)=\hbar\omega_1/2+\hbar\omega_2/2=\hbar\omega_c/2$ である。基底状態での古典的なエネルギーの比較 $m\omega_c^2 r_0^2/2=\hbar\omega_c/2$ より，$l_B=r_0$ である。

$\omega_0=0$ のときの $H=10^5$ Oe（10 T）に対する磁気長 l_B を cgs-Gauss 単位系に注意して計算すると[*3]

$$
\begin{aligned}
l_B &= \sqrt{\frac{\hbar c}{eH}} \\
&= \sqrt{\frac{(1.05457171817\times 10^{-34}\times 10^{7}\ \mathrm{erg}\cdot\mathrm{s})\times \bar{c}\ \mathrm{cm}}{(1.602176634\times 10^{-19}\times \bar{c}/10\ \mathrm{Fr})\times 10^{5}\ \mathrm{Oe}}} \\
&= \sqrt{\frac{1.05457171817}{1.602176634}\times 10^{-12}\ \mathrm{cm}} \\
&\approx 0.81130\times 10^{-6}\ \mathrm{cm} \\
&\approx 81\ \mathrm{\mathring{A}}
\end{aligned}
$$

である。反磁性磁気モーメントの期待値は

$$
\begin{aligned}
\langle \mu_{\mathrm{dia}} \rangle &= -\frac{\partial E(0,0)}{\partial H} \\
&= -\frac{\hbar e}{2mc} \quad \left(\because E(0,0)=\frac{\hbar\omega_c}{2}=\hbar\omega_L=\frac{\hbar e H}{2mc}\right) \\
&= -\frac{\hbar e}{2mc}\frac{\left\langle r_\perp^2\right\rangle}{2l_B}=-\frac{e^2\left\langle r_\perp^2\right\rangle}{4mc^2}H
\end{aligned}
$$

となり，閉殻構造をとる希ガス原子の反磁性 (Larmor 反磁性) の式 (2.8) と一致する。

---

*3 erg = dyn·cm，Fr = esu = $\mathrm{dyn}^{\frac{1}{2}}$cm, Oe = $\mathrm{dyn}^{\frac{1}{2}}$/cm である。cgs-Gauss 単位系では電荷は $[力]^{1/2}[長さ]$，磁場は $[力]^{1/2}[長さ]^{-1}$ の次元であることに注意。

◆ **Landau 準位と波動関数**

以下，$\omega_0 = 0$（調和ポテンシャルがゼロ）を考える。ハミルトニアンは $H = \hbar\omega_c\left(a^\dagger a + 1/2\right)$ となりエネルギー準位は $E(n,m) = \hbar\omega_c(n+1/2)$ のように $\hbar\omega_c$ 間隔で離散的な値を取る。各エネルギー準位は量子数 m に関する縮退がある。これは，サイクロトロン運動の中心位置 R に関する縮退である。[*4] この縮退離散準位を **Landau 準位**という。

次に，波動関数を求めたい。無次元の座標[*5]

$$z = \frac{1}{2l_B}(x - iy), \quad z^* = \frac{1}{2l_B}(x + iy) \tag{3.109}$$

を導入する。$x = l_B(z^* + z)$，$y = -il_B(z^* - z)$ であるから，微分演算子は

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial z} &= \frac{\partial x}{\partial z}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial z}\frac{\partial}{\partial y} \\
&= l_B\frac{\partial}{\partial x} + il_B\frac{\partial}{\partial y} \\
\frac{\partial}{\partial z^*} &= \frac{\partial x}{\partial z^*}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial z^*}\frac{\partial}{\partial y} \\
&= l_B\frac{\partial}{\partial x} - il_B\frac{\partial}{\partial y}
\end{aligned}$$

*4 $\omega_0 \neq 0$ のときの古典論と量子論の両者でエネルギーの表式を比較するとわかりやすい。

$$E(r_0, R) = m\omega\left(\omega_1 r_0^2 + \omega_2 R^2\right) \qquad \text{（古典論）}$$

$$E(n,m) = \hbar\omega_1\left(n + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_2\left(m + \frac{1}{2}\right) \qquad \text{（量子論）}$$

$\omega_0 = 0$ すなわち $\omega_2 = 0$ のときは R の選び方に関する縮退が生じることがわかる。$b \propto X + iY \equiv Re^{-i\omega_2 t}$，$a \propto \pi_x + i\pi_y \equiv im\omega_1 r_0 e^{i\omega_1 t}$ であることからも演算子 b, a から生じる量子数 n, m は，それぞれサイクロトロンの中心位置 R，サイクロトロン運動の半径 r_0 に対応していると考えられる。

*5 3.6.1 の古典論で用いた z とは異なることに注意。

となり，$p_i = -i\hbar\partial/\partial x_i \ (i = x, y)$ を用いれば

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{il_B}{\hbar}\left(p_x + ip_y\right), \quad \frac{\partial}{\partial z^*} = \frac{il_B}{\hbar}\left(p_x - ip_y\right) \tag{3.110}$$

と表される。$z^\dagger = z^*, (\partial/\partial z)^\dagger = -\left(\partial/\partial z^*\right)$ に注意。これらを用いると下降演算子 a, b は

$$a = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(z + \frac{\partial}{\partial z^*}\right), \quad b = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(z^* + \frac{\partial}{\partial z}\right) \tag{3.111}$$

となる。基底状態の波動関数 $\varphi_{0,0}\left(z, z^*\right) \equiv e^{-|z|^2}/\sqrt{2\pi}l_B$ に対して，次の関係が確認できる。[*6]

$$\begin{aligned}
a\varphi_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(z + \frac{\partial}{\partial z^*}\right)\varphi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2\pi}l_B}(ze^{-|z|^2} - ze^{-zz^*}) = 0 \\
b\varphi_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(z^* + \frac{\partial}{\partial z}\right)\varphi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2\pi}l_B}(z^*e^{-|z|^2} - z^*e^{-zz^*}) = 0 \\
b^\dagger\varphi_{0,0} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(z - \frac{\partial}{\partial z^*}\right)\varphi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{2\pi}l_B}(ze^{-|z|^2} + ze^{-zz^*}) = \sqrt{2}z\varphi_{0,0} \\
[b^\dagger, z] &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[z - \frac{\partial}{\partial z^*}, z\right] = \frac{1}{\sqrt{2}}\left([z, z] - \left[\frac{\partial}{\partial z^*}, z\right]\right) = 0
\end{aligned}$$

これらの性質を用いれば、$z = re^{-i\phi}/2l_B$ として

---

*6 $H\varphi_{0,0} = \hbar\omega_c\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right)\varphi_{0,0} = \hbar\omega_c\left(0 + \frac{1}{2}\right))\varphi_{0,0} = \frac{1}{2}\hbar\omega_c\varphi_{0,0}$ となるので $\varphi_{0,0}$ は H の固有関数であり基底状態となっている。ここでは $\omega_0 = 0$ で議論しているが，$\omega_0 \neq 0$ のときは，$l_B \equiv \sqrt{\hbar/2m\omega}$ に $\omega_0 \neq 0$ での ω を代入すれば同様の議論ができると思う。ちなみに，一次元調和振動子 $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ の基底状態の波動関数は $\varphi_0 = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-x^2}$ である。

$$
\begin{aligned}
\varphi_{n,m}(x,y) &= \frac{1}{\sqrt{n!m!}}\left(a^\dagger\right)^n\left(b^\dagger\right)^m\varphi_{0,0} = \frac{2^{m/2}}{\sqrt{n!m!}}\left(a^\dagger\right)^n\left[z^m\varphi_{0,0}\right] \\
&= \frac{2^{m/2}}{l_B\sqrt{2\pi n!m!}}\left(a^\dagger\right)^n\left[\left(\frac{r}{2l_B}\right)^m e^{-im\phi}e^{-(r/2l_B)^2}\right] \qquad (3.112)
\end{aligned}
$$

となる。$(a^\dagger)^n$ も作用させたときの結果は，$p=|n-m|$ として次のようになることが知られている。

$$
\varphi_{n,m}(x,y) = C_{n,m}|z|^p L^p_{(n+m-p)/2}\left(2|z|^2\right)e^{-|z|^2}e^{i(n-m)\phi} \qquad (3.113)
$$

$C_{n,m}$ は規格化因子，$L^n_m(x)$ は Laguerre 陪多項式である。[*7] $m \geq n$ で $n=0,1$ において Laguerre 陪多項式を用いた波動関数の具体的な計算を以下に記す。[*8]

*7 ここでは，$\left(x\frac{d^2}{dx^2}+(\alpha+1-x)\frac{d}{dx}+n\right)L^\alpha_n(x)=0$ が成り立つ多項式であり，

$$
L^\alpha_n(x) \equiv \frac{e^x x^{-\alpha}}{n!}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x}x^{n+\alpha}
$$

と定義される [1]。Laguerre 陪多項式は文献によって定義が異なるので注意。例えば，wikipedia[2] では，$\left(x\frac{d^2}{dx^2}+(k+1-x)\frac{d}{dx}+(n-k)\right)L^k_n(x)=0$ が成り立つ多項式として定義されており，$L^k_n(x)=\frac{d^k}{dx^k}\left(e^x\frac{d^n}{dx^n}\left(x^n e^{-x}\right)\right)$ と表されている。

*8 一般の n,m について (3.112) と (3.113) が等しいことは，数学的帰納法を用いて示せそうだったので証明を試みたが，実際には計算が複雑で堀には厳しかった (汗)。

○ Laguerre 陪多項式を用いた波動関数の具体的な計算

ここでは，$m \geq n$ で $n = 0, 1$ において，Laguerre 陪多項式を用いた表式 (3.113) が $(a^\dagger)^n$ を残した表式 (3.112) と等しいことを確認する。

◇ $n = 0$ $(m \geq 0)$ のとき

(3.112) を用いれば

$$\varphi_{0,m}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{m!}} \left(b^\dagger\right)^m \varphi_{0,0} \propto z^m e^{-|z|^2}$$

また，$n = 0$ のとき $p = |0 - m| = m, (n + m - p)/2 = n = 0$ である。Laguerre 陪多項式 $L_0^m(x)$ は

$$L_0^m(x) = e^x x^{-m} e^{-x} x^m = 1$$

よって，規格化因子を除いて (3.113) を計算すると

$$\begin{aligned}
\varphi_{0,m}(x, y) \propto & |z|^p L^p_{(n+m-p)/2}\left(2|z|^2\right) e^{-|z|^2} e^{i(n-m)\phi} \\
= & |z|^m L_0^p\left(2|z|^2\right) e^{-|z|^2} e^{-im\phi} \\
= & |z|^m e^{-|z|^2} e^{-im\phi} = z^m e^{-|z|^2} \qquad (\because z = |z|e^{-i\phi})
\end{aligned}$$

したがって，$m \geq 0$ で $n = 0$ のとき (3.112) の計算結果と (3.113) の計算結果は等しくなる。

◇ $n = 1$ $(m \geq 1)$ のとき

(3.112) を用いれば

$$\begin{aligned}
\varphi_{1,m}(x, y) = & \frac{1}{\sqrt{m!}} a^\dagger \left(b^\dagger\right)^m \varphi_{0,0} \\
& \propto \left(z^* - \frac{\partial}{\partial z}\right) [z^m e^{-|z|^2}] = (2z^* z^m - m z^{m-1}) e^{-|z|^2}
\end{aligned}$$

また，$n = 0$ のとき $p = |1 - m| = m - 1, (n + m - p)/2 = n = 1$ であ

る。Laguerre 陪多項式 $L_1^{m-1}(x)$ は

$$
\begin{aligned}
L_1^{m-1}(x) &= e^x x^{1-m}\frac{d}{dx}(e^{-x}x^m) \\
&= e^x x^{1-m}(-e^{-x}x^m + me^{-x}x^{m-1}) = -x+m
\end{aligned}
$$

よって，規格化因子を除いて (3.113) を計算すると

$$
\begin{aligned}
\varphi_{1,m}(x,y) \propto& |z|^p L^p_{(n+m-p)/2}\left(2|z|^2\right)e^{-|z|^2}e^{i(n-m)\phi} \\
=& |z|^{m-1}L_1^{m-1}\left(2|z|^2\right)e^{-|z|^2}e^{-i(m-1)\phi} \\
=& |z|^{m-1}\left(-2z^*z+m\right)e^{-|z|^2}e^{-i(m-1)\phi} \\
=& (-2z^*z^m + mz^{m-1})e^{-|z|^2} \qquad (\because z=|z|e^{-i\phi}) \\
\propto& (2z^*z^m - mz^{m-1})e^{-|z|^2}
\end{aligned}
$$

したがって，$m \geq 1$ で $n=1$ のとき (3.112) の計算結果と (3.113) の計算結果は等しくなる。

一般の n,m については省略する（というかよく分からなかった）。

※ Landau ゲージを用いた場合の波動関数

これまで，対称ケージ $\boldsymbol{A}=(-y,x,0)H/2$ を用いて議論してきた。Landau ゲージ $\boldsymbol{A}=(0,xH,0)$ を用いた場合について考える。[*9]ハミルトニアン H は

$$
H = \frac{1}{2m}\left(p_x^2+p_y^2+2\frac{eH}{c}p_yx+\frac{e^2H^2}{c^2}x^2\right)
$$

であり，y を陽に含まないので $[H,p_y]=0$ であり，p_y は保存量である。よっ

[*9] どちらも $\boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{A}=0$ を満たし，$\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}=(0,0,H)$ を導く。

て，波動関数は p_y の固有値が $\hbar k_y$ であるような関数 $\psi(x,y) = X(x)e^{ik_y y}$ でおける。$H\psi(x,y) = E\psi(x,y)$ から

$$\frac{1}{2m}\left(p_x^2 + \hbar^2 k_y^2 + 2\frac{eH}{c}\hbar k_y x + \frac{e^2H^2}{c^2}x^2\right)X(x)e^{ik_y y} = EX(x)e^{ik_y y}$$

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2m}\left(\frac{eH}{c}x - \hbar k_y\right)^2\right\}X(x) = EX(x)$$

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega_c^2\left(x - \hbar k_y\frac{c\hbar}{eH}\right)^2\right\}X(x) = EX(x) \qquad (\because \omega_c = eH/mc)$$

ここで，$\xi \equiv \sqrt{m\omega_c/\hbar}(x - \hbar k_y c/eH) = (x - k_y l_B^2)/l_B$ とおけば，

$$\frac{\hbar\omega_c}{2}\left(-\frac{d}{d\xi^2} + \xi^2\right)X(\xi) = EX(\xi)$$

となり，一次元調和振動子の問題に帰着するので[*10]

$$X_n(\xi) = C_n' e^{-\xi^2/2}H_n(\xi)$$

[*10] 一次元調和振動子 $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$ の場合，

$$\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2m}\frac{1}{2}m\omega^2\right\}X(x) = EX(x)$$

と表され，$\xi \equiv \sqrt{m\omega/\hbar}x$ とおくと，

$$\frac{\hbar\omega}{2}\left(-\frac{d}{d\xi^2} + \xi^2\right)X(\xi) = EX(\xi)$$

となり，波動関数は Hermite 多項式 $H_n(\xi)$ を用いて

$$X_n(\xi) = C_n' e^{-\xi^2/2}H_n(\xi)$$

となる。

であり

$$\psi_{n,s}(x,y) = C'_{n,s} e^{ik_y y} e^{-\xi^2/2} H_n(\xi), \quad \xi \equiv \frac{x - k_y l_B^2}{l_B} \tag{3.114}$$

のように，Hermite 多項式[*11] を用いた表式が得られる。$k_y = 2\pi s/L$（s は整数）であり，対称ケージのときの m と同様，s に関するマクロな縮退が存在する。Landau ゲージの波動関数 $\psi_{n,s}(x,y)$ は，対称ケージの波動関数 $\varphi_{n,m}(x,y)$ の異なる m についての重ね合わせ $\psi_{n,s}(x,y) = \sum_{m=0}^{\infty} c_{sm}\varphi_{n,m}(x,y)$ で表すことができる。[*12]

◆ Landau 準位の縮退度

対称ケージの話に戻す。最低 Landau 準位 ($n=0$) の場合，波動関数は

$$\varphi_{0,m} = \frac{2^{m/2}}{l_B\sqrt{2\pi m!}}\left(\frac{r}{2l_B}\right)^m e^{-im\phi} e^{-(r/2l_B)^2} \tag{3.115}$$

であり，この存在確率 $\rho_{0,m}(x,y) \equiv |\varphi_{0,m}|^2$ は半径 $r_{\max} \equiv \sqrt{2m} l_B$ 付近で最大値を取る。[*13] 図 3.10 に $m = 13$ の場合の存在確率 $\rho_{0,13}(x,y)$ を示し

---

*11 $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}$ であり，$\left(\frac{d^2}{dx^2} - 2x\frac{d}{dx} + 2n\right) H_n(x) = 0$ を満たす。

*12 つまり，両者の波動関数はユニタリー変換でつながっている。ちなみに Landau ゲージにおけるハミルトニアンは，$a = \sqrt{m\omega_c/2\hbar}\{(x - k_y l_B) + ip_x/m\omega_c\}$ を導入すれば，$H = \hbar(a^\dagger a + 1/2)$ と表され，観測量であるエネルギー固有値はどちらのゲージも同じである（物理的な結果はゲージのとり方に依存しない）。

*13 ちなみに $|0,m\rangle$ の x^2+y^2 の期待値は

$$\left\langle 0,m|x^2+y^2|0,m\right\rangle = 2l_B^2\left\langle 0,m\left|(bb^\dagger + ba + a^\dagger b^\dagger + a^\dagger a)\right|0,m\right\rangle = 2l_B^2(m+1)$$

であり，$\sqrt{\langle r^2\rangle} = \sqrt{\langle x^2+y^2\rangle} = \sqrt{2(m+1)}l_B$ となる。

た。 半径 $\sqrt{2\times13}l_B \approx 5.10 l_B$ 付近で最大値が存在することが分かる。

◇ Landau 準位の縮退度の考え方 1

系の半径を $R \gg l_B$ とすると，$r_{\rm max} \simeq R$ となる最大値 m は $m_{\rm max} = (R/l_B)^2/2$ である。この $m_{\rm max}$ が縮退度 n_L に他ならない。

$$n_L = m_{\rm max} = \frac{R^2}{2l_B^2} = \frac{\pi R^2 H}{2\pi l_B^2 H} = \frac{\Phi}{\phi_0}, \quad \Phi \equiv \pi R^2 H \tag{3.116}$$

ここで,

$$\begin{aligned}\phi_0 &\equiv 2\pi l_B^2 H = \frac{2\pi\hbar c}{e} \\ &= \frac{2\pi\times(1.054571817\times10^{-34}\times10^7\ {\rm erg\cdot s})\times\bar{c}\ {\rm cm/s}}{1.0602176634\times10^{-19}\times\bar{c}/10\ {\rm Fr}} \\ &= 4.14\times10^{-7}\ {\rm G\ cm^2}\end{aligned} \tag{3.117}$$

である。[*14] この ϕ_0 は，超伝導体の議論に現れる**磁束量子**の 2 倍である[*15]。Landau 準位の縮重度 n_L は系を貫く磁束量子の本数という意味をもち，マクロな数である。磁束量子 $\phi_0 \equiv 2\pi l_B^2 H$ は $2\pi l_B^2$ の面積を占め，1 本ごとに 1 つの量子状態が存在する。

◇ Landau 準位の縮退度の考え方 2

2 次元の状態密度は $\rho^{(2{\rm d})}(\epsilon) = \rho_{\rm F}^{(2{\rm d})} = mL^2/2\pi\hbar^2$ のようにエネルギーによらず一定値を取る。図 3.11 のように，エネルギー幅 $\hbar\omega_c$ にある電子状態の数は $n_{\rm L} = \int_{\hbar\omega_c(n+1/2)}^{\hbar\omega_c(n+1+1/2)} d\epsilon\rho^{(2{\rm d})}(\epsilon) = \rho_{\rm F}^{(2{\rm d})}\hbar\omega_c = \Phi/\phi_0\ (\Phi = L^2 B)$ が 1 つの準位に集約しており，それが縮退度そのものになる。[*16]

---

*14 つまり，$\phi_0/2 = 2.07\times10^{-7}$ G cm^2 となる。おそらく誤植。

*15 教科書はこの ϕ_0 を磁束量子として定義しているので注意。

*16 Landau ゲージでの波動関数 $\psi_{n,s}(x,y)$ の場合は，x 方向の波動関数のが 0 と L の間にある条件 $0 \le k_y l_B^2 \le L$ から，とりうる s が $0 \le s \le L^2/2\pi l_B^2$ となり，同様に縮退度 $L^2/2\pi l_B^2 = \Phi/\phi_0$ が得られる。

図 3.10: 調和ポテンシャルと磁場下での電子の運動と存在確率。(a) 古典軌道。(b) 量子的確率 $\rho_{0,13}(x, y)$（おそらく緑の箇所の確率が大きい）。

図 3.11: Landau 準位と縮退度。

3.6.3　量子振動と Landau 反磁性

ここからは，磁場下で電子が xy 平面内に限らず 3 次元的な運動する場合を考える。

◆波動関数，固有エネルギー

ハミルトニアン H は

$$
\begin{aligned}
H &= \frac{1}{2m}\left(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + \frac{eH}{c}(p_y x - p_x y) + \frac{e^2H^2}{4c^2}(x^2+y^2)\right) \\
&= \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) + \omega_L(p_y x - p_x y) + \frac{1}{2}m\omega_L^2\left(x^2+y^2\right)
\end{aligned}
$$

であり，z を陽に含まないので $[H, p_z] = 0$ であり，波動関数は p_z の固有値が $\hbar k$ であるような関数 $\varphi(x,y,z) = f(x,y)e^{ikz}/\sqrt{L}$ でおける。$H\varphi(x,y,z) = E\varphi(x,y,z)$ から

$$
\begin{aligned}
&\left\{\frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + \hbar^2k^2) + \omega_L(p_y x - p_x y) + \frac{1}{2}m\omega_L^2\left(x^2+y^2\right)\right\} f(x,y)\frac{e^{ikz}}{\sqrt{L}} \\
&\qquad = Ef(x,y)\frac{e^{ikz}}{\sqrt{L}} \\
&\left\{\frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2) + \omega_L(p_y x - p_x y) + \frac{1}{2}m\omega_L^2\left(x^2+y^2\right)\right\} f(x,y) \\
&\qquad = \left(E - \frac{\hbar^2k^2}{2m}\right) f(x,y) \\
&\therefore f(x,y) = \varphi_{n,m}(x,y), \quad E - \frac{\hbar^2k^2}{2m} = \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right)
\end{aligned}
$$

となるので，波動関数と固有エネルギーは

$$
\varphi_{n,m,k}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikz} \varphi_{n,m}(x,y)
$$
$$
E_{n,m,k} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \tag{3.118}
$$

である。

◆<u>状態密度</u>

まず，この系のエネルギー ϵ 以下のスピンあたりの状態数 $N_\sigma(\epsilon)$ を求める。スピンあたりの 1 次元の状態数

$$
N_\sigma^{(1\mathrm{d})}(\epsilon) = \sum_k \theta\left(\epsilon - \epsilon_k\right) = \sum_k \theta\left(\epsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\right) = \frac{L}{\pi\hbar}\sqrt{2m\epsilon}
$$

と電子数 $N_\mathrm{e} = 2N_\sigma^{(3\mathrm{d})}(\epsilon_\mathrm{F}) = \frac{8}{3}\pi(\frac{L}{2\pi})^3(\frac{2m\epsilon_\mathrm{F}}{\hbar^2})^{3/2}$ 用いると，

$$
\begin{aligned}
N_\sigma(\epsilon) &\equiv \sum_{knm} \theta\left(\epsilon - E_{n,m,k}\right) \\
&= \sum_n \sum_m \sum_k \theta\left(\epsilon - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right)\right) \\
&= \sum_m \sum_n N_\sigma^{(1\mathrm{d})}\left(\epsilon - \hbar\omega_c(n + 1/2)\right) \\
&= n_\mathrm{L} \sum_n N_\sigma^{(1\mathrm{d})}\left(\epsilon - \hbar\omega_c(n + 1/2)\right) \\
&= \rho_\mathrm{F}^{(2\mathrm{d})} \hbar\omega_c \frac{L}{\pi\hbar}\sqrt{2m} \sum_{n=0} \sqrt{\epsilon - \hbar\omega_c\left(n + \frac{1}{2}\right)} \\
&= \frac{mL^2}{2\pi\hbar^2}(\hbar\omega_c)^{3/2} \frac{L}{\pi\hbar}\sqrt{2m} \sum_{n=0} \sqrt{\frac{\epsilon}{\hbar\omega_c} - \left(n + \frac{1}{2}\right)} \\
&= \frac{3N_\mathrm{e}}{4}\left(\frac{\hbar\omega_c}{\epsilon_\mathrm{F}}\right)^{3/2} \sum_{n=0} \sqrt{\frac{\epsilon}{\hbar\omega_c} - \left(n + \frac{1}{2}\right)}
\end{aligned} \tag{3.119}
$$

となる。ただし，n の和は根号の中が正となる範囲で取る。$N_\sigma(\epsilon)$ の微分から状態密度 $\rho_\sigma(\epsilon)$ が得られる。

$$\rho_\sigma(\epsilon) = \frac{dN_\sigma}{d\epsilon} = \frac{3N_\mathrm{e}}{4}\left(\frac{\hbar\omega_c}{\epsilon_\mathrm{F}}\right)^{3/2}\frac{1}{2\hbar\omega_c}\sum_{n=0}\left\{\frac{\epsilon}{\hbar\omega_c} - \left(n+\frac{1}{2}\right)\right\}^{-1/2}$$

図 3.12 に示すように Landau 量子化を反映して，エネルギー ϵ が Landau 準位を横切るたびに状態密度に発散的な異常が現れる。そのため，磁場 H を増加させると，$\epsilon_\mathrm{F}/\hbar\omega_c = \epsilon_\mathrm{F}/2\mu_\mathrm{B}H$ の周期で熱力学量に異常が現れる。このような異常を**量子振動**という。磁化の量子振動を **de Haas-van Alphen (dHvA) 振動**といい，磁気抵抗に現れる振動を **Shubnikov-de Haas (SdH) 振動**という。強磁場において，全ての電子が $n = 0$ の最低 Landau 準位だけを占有した状態を**量子極限**という。

図 3.12: 磁場中の状態数 $N_\sigma(\epsilon)$ と状態密度 $\rho_\sigma(\epsilon)$ の振る舞い。

図: Au で観測された量子振動 [3]。

◆自由エネルギー

自由エネルギー F は大分配関数 $\Xi = \prod_\nu \left(1 + \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_\nu - \mu)}\right)$ を用いれば

$$
\begin{aligned}
F &= N_{\mathrm{e}}\mu - k_{\mathrm{B}}T \ln \Xi \\
&= N_{\mathrm{e}}\mu - k_{\mathrm{B}}T \ln \prod_\nu \left(1 + \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_\nu - \mu)}\right) \\
&= N_{\mathrm{e}}\mu - k_{\mathrm{B}}T \sum_\nu \ln \left(1 + \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon_\nu - \mu)}\right) \\
&= N_{\mathrm{e}}\mu - 2k_{\mathrm{B}}T \int_0^\infty d\epsilon \rho_\sigma(\epsilon) \ln \left(1 + \mathrm{e}^{-\beta(\epsilon - \mu)}\right)
\end{aligned}
$$

と計算できるので，1 電子あたりの自由エネルギーは

$$
\begin{aligned}
\frac{F}{N_e} &= \mu - \frac{2}{\beta N_e} \int_0^\infty d\epsilon \rho_\sigma(\epsilon) \ln \left(1 + e^{-\beta(\epsilon - \mu)}\right) \\
&= \mu - \frac{2}{\beta N_e} \int_0^\infty d\epsilon \frac{dN_\sigma}{d\epsilon} \ln \left(1 + e^{-\beta(\epsilon - \mu)}\right) \\
&= \mu - \frac{2}{\beta N_e} \Biggl\{ \left[N_\sigma(\epsilon) \ln \left(1 + e^{-\beta(\epsilon - \mu)}\right) \right]_0^\infty \\
&\qquad\qquad - \int_0^\infty d\epsilon N_\sigma(\epsilon) \frac{d}{d\epsilon} \ln \left(1 + e^{-\beta(\epsilon - \mu)}\right) \Biggr\} \\
&= \mu - \frac{2}{N_e} \int_0^\infty d\epsilon N_\sigma(\epsilon) f(\epsilon - \mu) \qquad \left(\because \frac{d}{d\epsilon} \ln \left(1 + e^{-\beta(\epsilon - \mu)}\right) = -\beta f \right) \\
&= \mu - \frac{2}{\beta N_e} \left\{ \left[\left(\int N_\sigma(\epsilon') d\epsilon' \right) f(\epsilon - \mu) \right]_0^\infty - \int_0^\infty d\epsilon \left(\int N_\sigma(\epsilon') d\epsilon' \right) \left(\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) \right\} \\
&= \mu - \epsilon_F \left(\frac{\hbar\omega_c}{\epsilon_F} \right)^{5/2} \int_0^\infty d\epsilon \sum_{n=0} \left[\frac{\epsilon}{\hbar\omega_c} - \left(n + \frac{1}{2} \right) \right]^{3/2} \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right)
\end{aligned}
\tag{3.120}
$$

◆エネルギーと磁化率

最後に $T=0$ の弱磁場についてエネルギー E を評価し，Landau 反磁性の磁化率を導出しよう。

$$
\begin{aligned}
E &= 2\int_0^\infty d\epsilon \rho_\sigma(\epsilon) f(\epsilon-\mu)\epsilon \\
&= 2\int_0^\infty d\epsilon \rho_\sigma(\epsilon)\theta(\epsilon_{\mathrm{F}}-\epsilon)\epsilon \quad (\because T=0) \\
&= 2\int_0^{\epsilon_{\mathrm{F}}} d\epsilon \rho_\sigma(\epsilon)\epsilon \\
&= 2\left[N_\sigma(\epsilon)\epsilon\right]_0^{\epsilon_{\mathrm{F}}} - \int_0^{\epsilon_{\mathrm{F}}} d\epsilon N_\sigma(\epsilon)\epsilon \\
&= 2N_\sigma(\epsilon_{\mathrm{F}})\epsilon_{\mathrm{F}} - N_{\mathrm{e}}\epsilon_{\mathrm{F}}\left(\frac{\epsilon_{\mathrm{F}}}{\hbar\omega_c}\right)^{-5/2}\sum_{n=0}\left[\frac{\epsilon_{\mathrm{F}}}{\hbar\omega_c}-\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^{3/2} \\
&= \frac{3}{5}N_{\mathrm{e}}\epsilon_{\mathrm{F}}\times\frac{5}{3}\left\{1-\left(\frac{\epsilon_{\mathrm{F}}}{2\mu_{\mathrm{B}}H}\right)^{-5/2}\sum_{n=0}\left[\frac{\epsilon_{\mathrm{F}}}{2\mu_{\mathrm{B}}H}-\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^{3/2}\right\}
\end{aligned}
$$

ここで，$2N_\sigma(\epsilon_{\mathrm{F}})=N_{\mathrm{e}}$ を用いた。無磁場の基底エネルギー $E_0=3N_{\mathrm{e}}\epsilon_{\mathrm{F}}/5$ を用いれば[*17]

$$
\begin{aligned}
E &= E_0\phi\left(\frac{\epsilon_{\mathrm{F}}}{2\mu_{\mathrm{B}}H}\right) \\
\phi(x) &\equiv \frac{5}{3}\left\{1-x^{-5/2}\sum_{n=0}\left[x-\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^{3/2}\right\}
\end{aligned}
\tag{3.121}
$$

*17 3 次元の状態数は $N_\sigma^{(3\mathrm{d})}(\epsilon)=\frac{4}{3}\pi(\frac{L}{2\pi})^3(\frac{2m\epsilon_{\mathrm{F}}}{\hbar^2})^{3/2}=\frac{N_{\mathrm{e}}}{2}(\frac{\epsilon}{\epsilon_{\mathrm{F}}})^{3/2}$ なので $E_0=2\int_0^{\epsilon_{\mathrm{F}}}d\epsilon\rho_\sigma^{(3\mathrm{d})}(\epsilon)\epsilon=3N_{\mathrm{e}}\epsilon_{\mathrm{F}}/5$ となる。

となる。n の和は根号の中が正となる範囲で取ることを考えれば，$H \to 0$ 極限で和の上限 $n_0 \leq x = \epsilon_{\mathrm{F}}/2\mu_{\mathrm{B}}H$ は非常に大きくなる。$n_0 \gg 1$, $F(y) = (x-y)^{3/2}$ に対して Euler-Maclaurin の総和公式から得られる近似式

$$\sum_{n=0}^{n_0} F(n+1/2) \simeq \int_0^{n_0+1} dy F(y) - \frac{1}{24}\left[F'\left(n_0+1\right) - F'(0)\right]$$

を用いると

$$\begin{aligned}
\sum_{n=0}^{n_0}\left[x-\left(n+\frac{1}{2}\right)\right]^{3/2} &\simeq \int_0^{n_0+1} dy (x-y)^{3/2} - \frac{1}{24}\left[\frac{3}{2}(x-n_0-1)^{1/2} - \frac{3}{2}x^{1/2}\right] \\
&= \frac{5}{2}\left[(x-y)^{5/2}\right]_0^{n_0+1} - \frac{1}{24}\left[\frac{3}{2}(x-n_0-1)^{1/2} - \frac{3}{2}x^{1/2}\right] \\
&\simeq \frac{2}{5}x^{5/2} - \frac{1}{16}x^{1/2} \quad (\because x-n_0-1 \ll x)
\end{aligned}$$

であるから

$$\begin{aligned}
\phi(x) &= \frac{5}{3}\left\{1 - x^{-5/2}\left(\frac{2}{5}x^{5/2} - \frac{1}{16}x^{1/2}\cdots\right)\right\} \\
&= \frac{5}{3}\left(1 - \frac{2}{5} + \frac{1}{16}x^{-2}\cdots\right) \\
&= 1 + \frac{5}{48x^2} + \cdots \quad (x \gg 1)
\end{aligned}$$

である。よって，低磁場極限のエネルギーは (3.121) から，スピンあたりの 3 次元の状態密度 $\rho_{\mathrm{F}} = dN^{(\mathrm{3d})}/d\epsilon(\epsilon_{\mathrm{F}}) = 3N_{\mathrm{e}}/4\epsilon_{\mathrm{F}}$ を用いて

$$
\begin{aligned}
E &= E_0 \left\{ 1 + \frac{5}{48} \left(\frac{2\mu_{\mathrm{B}} H}{\epsilon_{\mathrm{F}}} \right)^2 + \cdots \right\} \\
&= E_0 + \frac{5}{48} E_0 \left(\frac{2\mu_{\mathrm{B}} H}{\epsilon_{\mathrm{F}}} \right)^2 \\
&= E_0 + \frac{1}{3} \rho_{\mathrm{F}} \mu_{\mathrm{B}}^2 H^2 + \cdots
\end{aligned}
$$

したがって，低磁場極限のエネルギーと磁化率は

$$
E = E_0 + \frac{1}{3} \rho_{\mathrm{F}} \mu_{\mathrm{B}}^2 H^2 + \cdots, \quad \chi_{\text{Landau}} = -\frac{\partial^2 E}{\partial H^2} = -\frac{2\rho_{\mathrm{F}} \mu_{\mathrm{B}}^2}{3} \tag{3.122}
$$

となる。この現象を **Landau 反磁性**といい，電子の軌道運動から生じる効果である。スピン自由度から生じる Pauli 常磁性の磁化率は $\chi_{\text{Pauli}} = 2\rho_F \mu_{\mathrm{B}}^2$ であったから，系全体の磁化率は常磁性的で

$$
\chi = \chi_{\text{Pauli}} + \chi_{\text{Landau}} = \frac{4}{3} \rho_F \mu_{\mathrm{B}}^2 \tag{3.123}
$$

となる。[*18]

*18 すなわち自由電子モデルでは $\chi_{\text{Landau}} = -\frac{1}{3}\chi_{\text{Pauli}}$ である。結晶の周期ポテンシャルを考慮すると，有効質量を m^* を用いて $\chi_{\text{Landau}} = -\frac{1}{3}\left(\frac{m}{m^*}\right)^2 \chi_{\text{Pauli}}$ となることが知られている（Landau-Peierls の反磁性）[3, 4]。このときの系全体の磁化率は $\chi = \chi_{\text{Pauli}}\left[1 - \frac{1}{3}\left(\frac{m}{m^*}\right)^2\right]$ となり，有効質量に依存する。

参考文献

[1] 倉澤治樹 「量子力学」 (2019 年)
URL:http://kurasawa.c.ooco.jp/qm_a.pdf

[2] ラゲールの陪多項式 - Wikipedia
URL:https://ja.wikipedia.org/wiki/%E3%83%A9%E3%82%B2%E3%83%BC%E3%83%AB%E3%81%AE%E9%99%AA%E5%A4%9A%E9%A0%85%E5%BC%8F

[3] イバッハ・リュート 「固体物理学 21 世紀物質科学の基礎」 丸善出版 (1998 年)

[4] Stephen Blundell "Magnetism in Condensed Matter" Oxford Master Series in Physics (2001).