

講義ノート 磁性 第6回

2022年5月18日 勝本信吾 東京大学物性研究所(理学系研究科物理学専攻)

3.2.3 de Haas-van Alphen 効果

ランダウ軌道反磁性を導いた際には、磁場は弱く、 E_F に対してランダウ準位間隔 $\hbar\omega_c$ は狭いという漸近形の近似を用いた。磁場が強くと、 $\hbar\omega_c$ が E_F に比べてそれほど圧倒的に小さくはない程度まで大きくなると^{*1}、ランダウ量子化の影響が磁化にも劇的な影響を及ぼす。これが、de Haas-van Alphen 効果と呼ばれている磁化の振動である。軌道反磁性は、Pauli 常磁性とは異なり、固体中では特にフェルミ面付近のバンド構造の影響を強く受ける。このため、前副節の最後に示した Pauli 常磁性と Landau 反磁性の関係も固体中では成立しない。また、この反磁性磁化振動を用いてフェルミ面構造を実験的に究明することも行われる。

式(3.19)をもう一度次のように書く。

$$\frac{F}{n_e} = \mu - \frac{\hbar\omega_c}{E_F^{3/2}} \int_0^\infty dE \sum_{n=0} \left[E - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c \right]^{3/2} \left(-\frac{\partial f}{\partial E} \right). \quad (3.26)$$

$n_e = N_e/L^3$ である。また、 μ_B と ω_c の定義により、(m を共通に取る場合には) $2\mu_B B = \hbar\omega_c$ であることを使用した。(3.26)の中で、 n の和は、 (\dots) 内が正であるところまで取るが、一方フェルミ分布関数のエネルギー微分 $-\partial f/\partial E$ は、 $T \rightarrow 0$ では、フェルミ準位位置のデルタ関数になるので、ランダウ準位 $(n + 1/2)\hbar\omega_c$ が E_F に一致するところで、磁場に対して大きな変化を生じることがわかる。この効果による、磁場に対する磁化の振動現象を、**de Haas-van Alphen 効果** (de Haas-van Alphen effect, dHvA effect) と呼ぶ。

この時の(スピンあたり)エネルギー状態密度は、1次元系の状態密度が

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \rho_{1d}(E) = \frac{1}{L} \frac{L}{2\pi} \left(\frac{\hbar^2 k}{m} \right)^{-1} = \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}}$$

であるから、

$$\rho(E) = \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \sum_{n=0} \frac{1}{\sqrt{(E - (n + 1/2)\hbar\omega_c)}} \quad (3.27)$$

である。 n の和は、 $E > (n + 1/2)\hbar\omega_c$ の範囲で取る。 $E/\hbar\omega_c$ に対して、(3.27)をプロットすると、図3.2のように、やはり、 $E = (n + 1/2)\hbar\omega_c$ のところで発散する状態密度が得られる。磁場を増加させていくと図3.27のプロットでは、分母の $\hbar\omega_c$ の増大により、 E_F の位置が下がっていき、発散位置を通過する際に電子のランダウ準位への再配置が生じて磁化のような熱力学関数に急激な変化が生じることがわかる。

以上の説明では、この振動から k -空間の情報が得られることはわかりにくい。付録6Bにこの点が理解しやすいと思われる dHvA 効果の導出を示した。また、講義では、タリウム系高温超伝導体の例を紹介する [1]。

以上を説明する。この振動から k -空間の情報が得られることはわかりにくい。付録6Bにこの点が理解しやすいと思われる dHvA 効果の導出を示した。また、講義では、タリウム系高温超伝導体の例を紹介する [1]。

^{*1} 微妙な言い方だが、付録6Bでもそのように扱っているが、通常の金属の場合、一般的な実験施設の「強磁場」で $\hbar\omega_c \sim E_F$ になることはまずなく、漸近形ではないが、 $\hbar\omega_c \ll E_F$ の条件は使用している。

3.3 グラファイト系の軌道反磁性

以上見たのは自由電子系の磁場応答である。パウリの常磁性については、固体中のバンド電子でも同じ結果が出ることは状態密度の図を描いてみれば、状態密度の異常を通して大きな常磁性帯磁率が生じる可能性はあるものの、同じ表式が適用できると推察される。

一方、軌道反磁性の方はバンドの影響を強く受ける。ランダウ反磁性の条件であった弱磁場極限でも実は難しい問題であり、線形応答理論(久保公式など)を用いた理論形式 [2] や具体例の計算などについても、長い間不断の研究が続けられてきた。最近でもグラフェンなどへの応用を念頭に、理論的手法の開発に関する報文が精力的に発表されている [3, 4, 5]。ここでは、著しい例としてグラフェン、グラファイトの軌道反磁性について簡単に紹介する。グラファイトが軌道反磁性としては大変大きな帯磁率を持っていることは、本章冒頭でも述べたが、これはその特異なバンド構造に由来する。

3.3.1 グラフェンの軌道反磁性

鉛筆の芯などに使用されて身近な物質であるグラファイト(黒鉛)(graphite)は、炭素の単元素結晶としては熱力学的に最も安定と言われ、図 3.3 のように、平面六角格子が積層された構造をしている。この一つのシートがグラフェン(graphene)と呼ばれており、グラファイトから剥離したり、気相成長法で成長、あるいはシリコンカーバイド(SiC)を加熱するなど、様々な方法で単層グラフェンが作られている。

グラフェンは、面内が共有結合で強靱であり、2次元面上での原子の凹凸がないため、軌道的には2次元系と考えることができる。また、付録 6C に示したように、ちょうど(純粋なグラフェンの場合) E_F 付近の有効質量はゼロになり、純粋なグラフェンの場合丁度 E_F にディラック点と呼ばれる測度ゼロの点が生じることが特徴である。グラフェンの帯磁率は、非常に古くから計算され、最も単純なモデルでは [6]、

$$\chi(E_F) = -\frac{g_v g_s e^2}{6\pi} \left(\frac{e}{c}\right)^2 \delta(E_F) \quad (3.28)$$

と計算されている。 $g_v = 2$ は、軌道縮退度(k 空間で、 K, K' 点)、 $g_s = 2$ はスピン縮退度、 c は光速である。 E_F はディラック点から測っており、(3.28) は、 E_F がディラック点にある時無限大、それ以外ではゼロ、という変わった帯磁率を与えている。

これは、ごく粗くは次のように解釈できるであろう。 k -空間でディラック点以外の領域にいる電子が磁場の下でサイクロトロン運動をしているとして、磁場を変化させたとすると、式(1.28)に従い、磁場変化によって生じた電場による力が電子に働く。電子がこれによって仕事をされ、エネルギーが上昇する。通常は、 $|k|$ の上昇により電子の加速が生じて、反磁性が現れる、というのが 1.3.2 節で見たことであった。今の場合は、 $|k|$ が増加しても、 dE/hdk は一定で加速されないため、反磁性電流は増加せず、反磁性は現れない。一方、ディラック点の上では、分散直線が折

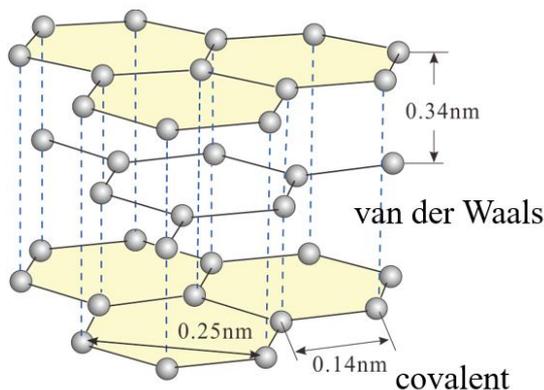


図 3.3 グラファイトの結晶構造模式図。共有結合による平面六角格子(グラフェン)が半格子定数分シフトして、主に van der Waals 力で結合した構造をしている。AB 積層と呼ばれ、1 原子層飛ばしで同じ格子が現れる。

れ曲がらなければならない。このため、ディラック点上では速度がゼロで、 $|k|$ が無限小だけ増加すれば、突然有限の反磁性電流が現れる。このため、ディラック点上では帯磁率が発散する。

講義では、このような機構による異常なグラフェンの軌道反磁性を捉えた、とする実験について紹介する。

3.3.2 多層グラフェンの軌道反磁性

グラファイトが何故、磁気浮揚 (magnetic levitation) をする程強い反磁性を示すのか、あるいは、その反磁性が光に応答するのか、など、実験的には比較的簡単で劇的な効果も、意外に良くわかっていない部分が多い。実験との良い一致を得るためには、磁場の不均一性を考慮した現実的なモデルで考える必要があると言われている [7]。

磁場の空間分布を考えるため、 xy 面内の 2 次元系に印可された z 方向磁場のフーリエ展開 $B(\mathbf{r}) = B(q) \cos qx$ を考える。 $B(\mathbf{r})$ に対して生じる応答電流分布は一般に $j_y(\mathbf{r}) = j_y(q) \sin qx$ の形になる [8]。この 2 次元電流から、磁化 $m(\mathbf{r})$ の q 成分は

$$j_y = -c \frac{\partial m}{\partial x} \rightarrow m(\mathbf{r}) = m(q) \cos qx \quad m(q) = -\frac{j_y(q)}{cq}$$

と求められる。帯磁率 $\chi(q)$ は $m(q)/B(q)$ で定義される。 $B(\mathbf{r}) = B(q) \cos qx$ に対するグラフェンの応答電流は

$$j_y(\mathbf{r}) = -\frac{g_v g_s e^2 v}{16\hbar c} B(q) \sin qx \quad (3.29)$$

となり、この応答電流による反磁性誘導磁場は、アンペールの法則により

$$B_{\text{ind}}(\mathbf{r}) = -\alpha_g B(\mathbf{r}), \quad \alpha_g = \frac{2\pi g_v g_s e^2 v}{16\hbar c^2} \approx 4 \times 10^{-5} \quad (3.30)$$

となる。これは、空間分布波数 q によらない結果になった。すなわち、どのような空間分布磁場であっても、その $-\alpha_g$ 倍の誘導磁場を生じ、重ね合わせの定理により、磁場に対してはすべて $-\alpha_g$ 倍の誘導磁場が生じることがわかる。

このことより、図 3.4 のように、磁場のソースを便宜的に $z > 0$ にある磁荷 q_m に取ると、グラフェンによって磁場の遮蔽が生じ、 $z < 0$ からは、 $-\alpha_g q_m$ の鏡像磁荷があって、これによる磁場がもとの磁場に加わっているように見える。 $z > 0$ でも同じで、 $\alpha_g q_m$ の鏡像磁荷があるとして計算した磁場が誘導磁場として現れる。図 3.4 では便宜的に磁荷として表した磁性源が、一般にグラフェンから受ける反発力は、図 3.4(c) の鏡像磁性源によって計算される。

永久磁石をグラフェンに近づける状況を考える。永久磁石を半径 a の半無限円柱とし、端面磁荷密度を σ_m とする。端面をグラフェン位置まで下げて、両者の距離 $d = 0$ とすると、磁石の受ける単位面積当たりの力は、 $2\pi\alpha_g\sigma_m^2$ である。ネオジウム磁石では、 σ_m は、1 T 程度になるから、この力は 1 cm^2 あたり 0.16 g と見積もられ、単原子層でも大変大きな力が生じる。

これを通常の 2 次元金属と比較すると、帯磁率は有効質量を m^* として、長波長領域で一定値 $\chi_0 = -e^2/(24\pi m^* c^2)$ を取る。 GaAs の 2 次元電子系 $m^* = 0.067m_0$ からの反発力 f_c 、をグラフェンからの反発力 f_g と比較すると、 $f_g/f_c \approx a/(0.01 \text{ nm})$ となる。磁石の径は cm オーダーのマクロなものなので、9 桁程度も大きな反発力があることがわかる。

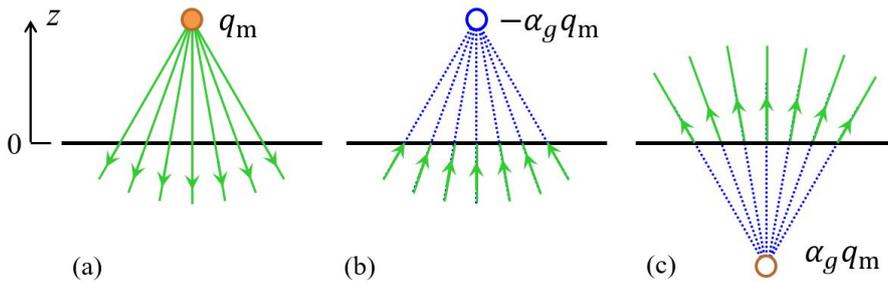


図 3.4 グラフェンによる鏡像磁荷。 $z = 0$ の黒線がグラフェン。(a) 点磁荷による磁場。(b) $z < 0$ 、(c) $z > 0$ の誘導磁場。 [8] より。

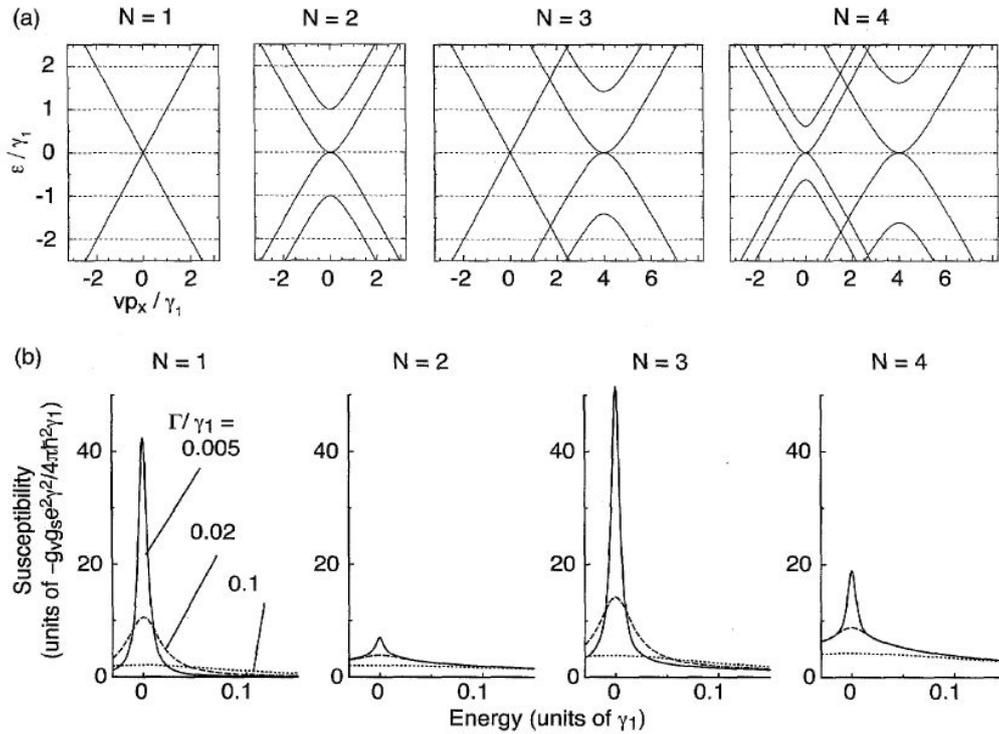


図 3.5 1層から4層までの多層グラフェンの (a) バンド構造と, (b) 軌道反磁性磁化率 $\chi(E_F)$. γ_1 は層間結合の強さ, Γ は不純物によるエネルギーの揺らぎ幅である. [8, 9] より.

単原子層グラフェンを複数層積み上げた, 多層グラフェンについて考えてみる [8]. 逆に, 薄膜グラファイトと考えることもできる. 図 3.3 のように, AB スタックしており, 相間の結合は弱く, 結合エネルギーは 0.4 eV 程度である. また, 2層以上の構造については, AB スタックの繰り返しと見ることができ, 物理量の計算は2層グラフェンの物理量計算に帰着させることができる. 単層グラフェンでは, K と K' の両方でギャップレスの線形分散となったが, 2層グラフェンにおいても, 1組はゼロギャップで接しており, ただし, 有効質量は有限, もう1組は層間結合によってギャップが開く. $N = 2M$ 層グラフェンでは, 2層型バンドが M 個, $N = 2M + 1$ では, これに単層型バンドが1個加わる.

図 3.5 に単層から4層グラフェンについて, このようなバンド構造と, 軌道反磁性帯磁率の計算結果を示した. N が奇数になるたびに, ディラック点を持つバンドが現れ, 反磁性に大きな寄与があるが, N 偶数では有限有効質量のためこれは小さくなる. しかし, 層数が増えることで数的効果により反磁性帯磁率は増加する. 結局このような効果によって磁気浮揚に見られるような巨大な反磁性効果がグラファイトで見られているものと考えられる.

第4章

スピン間相互作用



喧嘩ゴマ

<https://www.youtube.com/watch?v=2WaU7NDOHLQ>

我々は、物質の中で磁気双極子として働く「実体」を探し、量子論ではスピン、軌道が様々な形で磁気双極子、すなわち磁気モーメントを生み出していることを見出した。これらはしかし、磁場を印可して初めて向きを揃えてマクロなモーメントを生じるものであり、等温過程で磁場を下げると一般的にモーメントは消失する。マイクロなモーメント-スピンと呼ぼう-がゼロ磁場でも揃っているということは、磁気冷凍のところでも見たように、エントロピーが著しく下がっており、これを補償するだけ内部エネルギーの下がりが必要ならなければならない。言い換えれば、スピンの揃うことでエネルギーを下げる相互作用が存在するはずである。その可能性を考えていこう*2。

4.1 交換相互作用

第1章で、古典的な相互作用、すなわち、2つの磁気双極子 μ_1, μ_2 (以降、マイクロな磁気モーメントは簡潔のため、「スピン」と呼ぶことにしよう) を考え、一方のスピンが作る磁場により、他方が影響を受けるという形の相互作用を見た。これは、双極子間を結ぶベクトルを r_{12} と書いて、

$$U(\mu_1, \mu_2, r_{12}) = \frac{\mu_0}{4\pi} \left[\frac{\mu_1 \cdot \mu_2}{r_{12}^3} - 3 \frac{(\mu_1 \cdot r_{12})(\mu_2 \cdot r_{12})}{r_{12}^5} \right] \quad (4.1)$$

と表されるのであった*3。これら2つのスピンの安定配置が、一直線に向きを揃えたものであることは、磁石だと考えての直感からもすぐに理解される。しかし、定量的には、 $\mu_{1,2}$ の大きさが、5 Bohr 磁子程度あり、間隔も1格子定数、200 pm 程度と思いきり接近していたとしても U は 2 K 程度であり、到底室温より高温でも強磁性を保つ磁性体の状態を説明することはできない。

これに対して、量子力学では、特有の効果を通して遥かに強い相互作用が生じ得ることを示したのが Heisenberg である [10]。Heisenberg の主張した直接交換相互作用については、更なる理論検証がなされ、現実の物質の強磁性の説明は素朴な直接交換相互作用では困難であることが明らかになっている。しかし、交換相互作用の基本的な考え方は現在の理解においても使用されている。まずは、この直接交換相互作用を導入しよう。

*2 「これで強磁性が説明される」と強く期待されてしまうと困るので、そう簡単には行かない、ということはお断りしておこう。

*3 式 (1.7) は、E-H 対応の表式であったため、SI 単位系に直して E-B 対応とした。

4.1.1 Heitler-London 近似

水素原子が2個結合してできる水素分子の基底状態は、結合軌道に電子が \uparrow, \downarrow ペアとして収容され、スピンの消えて軌道による反磁性が生じる(分子軌道近似, molecular orbital, MO). しかし、今、仮に水素原子間の距離が遠かった場合、結合軌道反結合軌道を考えるより、それぞれの原子の軌道、 φ_a, φ_b を考え、これらが統計性を保って多体波動関数を構成する近似(Heitler-London 近似)も考えられる. この近似による2個の電子についての波動関数は、Slater 行列式

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N}} \begin{vmatrix} \varphi_a(\mathbf{r}_1)\chi_a(s_1) & \varphi_b(\mathbf{r}_1)\chi_b(s_1) \\ \varphi_a(\mathbf{r}_2)\chi_a(s_2) & \varphi_b(\mathbf{r}_2)\chi_b(s_2) \end{vmatrix} \quad (4.2)$$

で与えられる. N は規格因子, (\mathbf{r}_i, s_i) は i 番目電子の空間・スピン座標である. ここでは、 s_i はスピンの z 成分に対応し $\pm 1/2$ の2つの値を取り得る. $\chi(s)$ が、

$$\chi(1/2) = 1, \quad \chi(-1/2) = 0 \quad (4.3)$$

の時、これはスピンの $+z$ を向いた状態であり、これを $\alpha(s)$ と書こう. 一方 $-z$ を向いた状態 $\beta(s)$ は

$$\chi(1/2) = 0, \quad \chi(-1/2) = 1 \quad (4.4)$$

と与えられる.

$$\Psi(\mathbf{r}_1, s_1; \mathbf{r}_1, s_1) = 0, \quad \Psi(\mathbf{r}_1, s_1; \mathbf{r}_2, s_2) = -\Psi(\mathbf{r}_2, s_2; \mathbf{r}_1, s_1) \quad (4.5)$$

と、Pauliの排他律が満たされている.

Ψ はスピン状態について2つの引数(χ_a, χ_b)があるので、 (α, β) のどちらかを取らせることで、 $\{\Psi_{\alpha\alpha}, \Psi_{\alpha\beta}, \Psi_{\beta\alpha}, \Psi_{\beta\beta}\}$ の4つの状態を考えることができる. これらを基底として、相互作用 Hamiltonian \mathcal{H}_{int} を考えよう. 行列要素は、例えば、 $\langle \alpha\alpha | \mathcal{H}_{\text{int}} | \alpha\alpha \rangle$ の対角要素について、4項のうち2項が生き残り、

$$\begin{aligned} \langle \alpha\alpha | \mathcal{H}_{\text{int}} | \alpha\alpha \rangle &= \sum_{s_1, s_2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \Psi_{\alpha\alpha}^* \mathcal{H}_{\text{int}} \Psi_{\alpha\alpha} \\ &= \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi_a^*(\mathbf{r}_1)\varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \mathcal{H}_{\text{int}} \varphi_a(\mathbf{r}_1)\varphi_b(\mathbf{r}_2) - \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi_a^*(\mathbf{r}_1)\varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \mathcal{H}_{\text{int}} \varphi_b(\mathbf{r}_1)\varphi_a(\mathbf{r}_2) \end{aligned} \quad (4.6)$$

のようになる. $N=2$, $\langle \varphi_a | \varphi_b \rangle = 0$ とした. (4.6)の第2項は、電子を交換した状態との間の行列要素と考えることができ、**交換積分**(exchange integral)と呼ばれるもので、(2.26)で見た $J(m_1, m_2)$ と本質的に同じものである. 第2章においては、これよりフントの規則を導いたのであったが、これから見る Heisenberg の交換相互作用も基本的には同じものである. ここでは、この第2項を J_{ab} 、第1項を K_{ab} と書こう. 4×4 の行列要素は次のようになる.

	$\alpha\alpha$	$\alpha\beta$	$\beta\alpha$	$\beta\beta$	
$\alpha\alpha$	$K_{ab} - J_{ab}$	0	0	0	
$\alpha\beta$	0	K_{ab}	$-J_{ab}$	0	
$\beta\alpha$	0	$-J_{ab}$	K_{ab}	0	
$\beta\beta$	0	0	0	$K_{ab} - J_{ab}$	(4.7)

これは、容易に対角化でき、

$$\left. \begin{array}{l} \Psi_{\alpha\alpha} \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{\alpha\beta} + \Psi_{\beta\alpha}) \\ \Psi_{\beta\beta} \end{array} \right\} (s_1 + s_2 = 1), \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_{\alpha\beta} - \Psi_{\beta\alpha}) (s_1 + s_2 = 0) \quad (4.8)$$

の4状態が固有状態である. $s_1 + s_2 = 1$ の3状態は**スピン三重項**(spin triplet), $s_1 + s_2 = 0$ の1状態は**スピン一重項**(spin singlet)と呼ばれる. 前者の固有エネルギーは、 $K_{ab} - J_{ab}$, 後者は $K_{ab} + J_{ab}$ となる. このように、スピ

ン状態によってエネルギーに差を生じる。 $J_{ab} > 0$ であれば、スピン平行状態のエネルギーが低くスピンは同じ向き(強磁性的)を向こうとし、 $J_{ab} < 0$ であれば、逆に反平行になる(反強磁性的)とする。これを、交換積分によってスピン間に相互作用が生じていると見て、**交換相互作用 (exchange interaction)** と呼ぶ。 J_{ab} という軌道状態の積分によって現れた項が、電子の満たすべき対称性の要請によってスピン間に相互作用を生じたことになる。

そこで、第2章の EPR 実験解析のために導入したスピン・ハミルトニアンと類似の、スピン演算子で書かれた有効 Hamiltonian を探す。まず、状態 a, b のスピンにそれぞれ作用するスピン演算子 $\mathbf{s}_a, \mathbf{s}_b$ を導入する (s_1, s_2 とは意味が異なるので注意)。これらは交換するので、

$$2\mathbf{s}_a \cdot \mathbf{s}_b = (\mathbf{s}_a + \mathbf{s}_b)^2 - \mathbf{s}_a^2 - \mathbf{s}_b^2 = \mathbf{S}^2 - \mathbf{s}_a^2 - \mathbf{s}_b^2 \quad (4.9)$$

である。ここで、

$$\langle \uparrow\uparrow | \mathbf{S}^2 | \uparrow\uparrow \rangle = S(S+1) = 2, \quad \mathbf{S}^2 | \uparrow\downarrow \rangle = 0, \quad (4.10)$$

$$\mathbf{s}_a^2 = \mathbf{s}_b^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) = \frac{3}{4} \quad (4.11)$$

であることを使い、演算子 $(1 + 4\mathbf{s}_a \cdot \mathbf{s}_b)/2$ を計算してみると、

$$\langle \uparrow\uparrow \rangle \rightarrow 2\mathbf{s}_a \cdot \mathbf{s}_b = 2 - 2 \times \frac{3}{4} = \frac{1}{2} \implies \frac{1}{2}(1 + 4\mathbf{s}_a \cdot \mathbf{s}_b) = +1,$$

$$\langle \uparrow\downarrow \rangle \rightarrow 2\mathbf{s}_a \cdot \mathbf{s}_b = 2 - 2 \times \frac{3}{4} = -\frac{1}{2} \implies \frac{1}{2}(1 + 4\mathbf{s}_a \cdot \mathbf{s}_b) = -1$$

となることから、有効 Hamiltonian として

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = K_{ab} - \frac{1}{2} J_{ab} (1 + 4\mathbf{s}_a \cdot \mathbf{s}_b) \quad (4.12)$$

と書けることがわかる。

以上、2原子分子に関して考えたことを更に一般に i で指定される一般のスピン \mathbf{S}_i 間の相互作用があると考え、スピン関与部分だけ形式的に取り出すことで、

ハイゼンベルク ハミルトニアン

$$\mathcal{H} = -2 \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (4.13)$$

が得られる。 $\langle i,j \rangle$ はこの相互作用を持つスピンの対を指定する指数である。スピン間相互作用を起因とする様々な現象を取り扱う上で大切な基礎の1つとなるものである。

交換積分については、特に Coulomb 斥力を扱う場合、

$$J_{ab} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \varphi_a^*(\mathbf{r}_1) \varphi_b^*(\mathbf{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \varphi_b(\mathbf{r}_1) \varphi_a(\mathbf{r}_2) \quad (4.14)$$

が常に正であることは、式(2.26)と同様に示すことができる。また、 J_{ab} は見積もり方によっては 0.1 eV に達することもあり、室温で強磁性が生じることも一応説明可能である。以上、Heitler-London 近似では Coulomb 斥力によりスピン間に強い強磁性的な相互作用が働くことがわかった。これを**直接交換相互作用 (direct exchange interaction)** という。

ただし、2原子の問題に関しては、Heitler-London 近似に対して、分子軌道法を使うと、やはり Heisenberg Hamiltonian 形式の相互作用を導けるものの、 J の符号は負、すなわち反強磁性的な相互作用になる。これは、一般的な Schrödinger 方程式において、基底状態に縮退はなく、波動関数に節がないという一般的な定理によって理解される [11]。このため、軌道部分の波動関数は対称であり、従ってスピンは反対称になる。

4.1.2 電子移動による交換相互作用

Heitler-London 近似に改良を加える方法として、電子が一方の原子に 2 個入っているような配置も状態として考慮する、というものがある。(4.2) の波動関数に対して、

$$\Psi' = \frac{1}{\sqrt{N'}} \begin{vmatrix} \varphi_a(\mathbf{r}_1)\chi_a(s_1) & \varphi_a(\mathbf{r}_1)\chi'_a(s_1) \\ \varphi_a(\mathbf{r}_2)\chi_a(s_2) & \varphi_a(\mathbf{r}_2)\chi'_a(s_2) \end{vmatrix} \quad (4.15)$$

が少し重畳される。 $\Psi \rightarrow \Psi'$ の遷移は、電子が $\varphi_b\chi_b \rightarrow \varphi_a\chi'_a$ と遷移していることを意味する。従って、このような重畳が起こるためには、 $\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi' \rangle \neq 0$ でなければならない。このためには、Pauli の排他律により、 χ_a と χ_b とは互いに逆向きのスピんでなければならない。すなわち、 \mathbf{s}_a と \mathbf{s}_b とが反平行であれば、この飛び移りによって 2 次摂動によってエネルギーは

$$W_{ab} = -\frac{1}{\Delta E} |\langle \Psi' | \mathcal{H} | \Psi \rangle|^2 \quad (4.16)$$

だけ下がる。平行であれば、この下がりはない。従って、この部分は形式的に

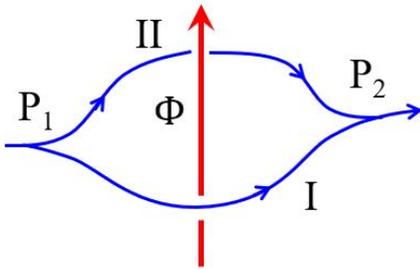
$$\frac{1}{2}(1 - 4\mathbf{s}_a \cdot \mathbf{s}_b)W_{ab} \quad (4.17)$$

のように (4.12) と同じになる。これらを合わせて、

$$\mathcal{H}'_{\text{int}} = \frac{1}{2}(-J_{ab} + W_{ab}) - 2(J_{ab} + W_{ab})\mathbf{s}_a \cdot \mathbf{s}_b \quad (4.18)$$

となる。 W_{ab} は負であるから、 $J_{ab} + W_{ab} < 0$ となれば、相互作用は反強磁性的となる。やはり、Heitler-London 近似では、強磁性側に見積もってしまうことがわかる。

付録 6A : Aharonov-Bohm 位相と Landau 準位縮退度



Landau 準位の縮退度 (面積当たりの状態数) について、講師が使っている直観的に記憶する方法を紹介しておこう。無論、各人がやりやすいように覚えれば良いので、これは一例に過ぎない。磁場が存在する場合、運動量 $\hbar\mathbf{k}$ を

$$\hbar\mathbf{k} \rightarrow \hbar\mathbf{k} + e\mathbf{A} = \hbar\left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar}\mathbf{A}\right)$$

のように変更する。これに従い、平面波 $\exp[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}]$ が空間の点 P_1 から点 P_2 に伝播する際の位相変化 θ は

$$\theta_{12} = \int_{P_1}^{P_2} \left(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar}\mathbf{A}\right) \cdot d\mathbf{r}_{(I)} = \int_{P_1}^{P_2} \mathbf{k} \cdot d\mathbf{r}_{(I)} + \frac{e}{\hbar} \int_{P_1}^{P_2} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}_{(I)} = \theta_{12}^{(k)} + \theta_{12}^{(A)} \quad (6A.1)$$

である。I と付けたのは、図で I の経路を通ることを意味する。右辺第 1 項は、通常の運動学的位相、第 2 項が磁場の影響を表すもので、**Aharonov-Bohm 位相** (Aharonov-Bohm (AB) phase) である。

経路 II では、運動学的位相は、行路差によって経路 I とは変化する。AB 位相はどうか、ということこれも変化する。このことは、点 P_2 で図のように抜けていくのではなく、 $P_2 \rightarrow P_1$ と経路 II を逆行する経路を考えることで理解される。すなわち、

$$\Delta\theta_{\text{AB}} = \frac{e}{\hbar} \left[\int_{P_1}^{P_2} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}_{(I)} + \int_{P_2}^{P_1} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}_{(II)} \right] = \frac{e}{\hbar} \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \frac{e}{\hbar} \int_S \text{rot} \mathbf{A} \cdot d\boldsymbol{\sigma} = 2\pi \frac{\Phi}{\phi_0}, \quad \phi_0 = \frac{h}{e} \quad (6A.2)$$

となる。ここで、 ϕ_0 は、**磁束量子** (flux quantum) と呼ばれる量で、 e に対する h の比という極めて覚えやすい形をしている。物理的な意味は、この磁束を取り囲むループ上を電子が 1 周伝播するとちょうど 2π だけの AB 位相がつく、というものである。丁度ループでの量子化条件に一致している点も記憶しやすいポイントである。

磁束密度 B の磁場が印可されている 2 次元系の状態数は、単位面積当たりの磁束 (すなわち B) をこの量子磁束で測った量となる。すなわち

$$N(B) = \frac{B}{h/e} = \frac{eB}{h} = \frac{eBm}{hm} = \frac{m}{\hbar^2}(\hbar\omega_c) = \frac{m}{2\pi\hbar^2}(\hbar\omega_c) \quad (6A.3)$$

であるから、1 ランダウ準位当たりの状態数 eB/h と、2 次元系の状態密度 $m/2\pi\hbar^2$ の両方を大変わり易い形で覚えることができる (・・・と講師は思うが・・・)。

付録 6B : dHvA 効果での k -スライスの寄与

dHvA 効果の原理はもちろん 1 つであるが、説明の仕方は様々である。本文のように、状態密度で見ると、 k -空間の情報が含まれていることが見えにくい。そこで、以下、文献 [12] のやり方でもう一度、説明してみよう。ここでも、バンド構造は考えず、自由電子的な等方的有効質量の電子で考える。 z 方向は自由、 xy ではランダウ量子化、も同じ (式 (3.14)) である。そこで、この系を E_F から z 方向の運動エネルギーを除いた

$$E'_F \equiv E_F - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \quad (6B.1)$$

をフェルミエネルギーとして持つランダウ量子化した 2 次元電子系が集まってできたもの、と考える。 k -空間では、各 k_z にこのような仮想的 2 次元系が対応している。

そこで、ある k_z に対して、 k -空間で厚さ δk_z の板状の領域を考える。この領域 (k -板と呼ぶ) の状態密度は、付録 6A で述べたことも使い、更に B で割って「磁束密度あたり」という量 (ξ) にすると、

$$\xi = \frac{1}{L} \frac{L}{2\pi} \delta k_z \frac{eB}{h} \frac{1}{B} = \frac{e}{4\pi^2 \hbar} \delta k_z \left(= \frac{\delta k_z}{2\pi} \frac{1}{\phi_0} \right) \quad (6B.2)$$

と書くことができる。不思議な量だが、括弧内に講師の「解釈」のようなものがわかるような式を書いておいた。 $\phi_0 \equiv h/e$ は付録 6A で導入した**磁束量子 (flux quantum)** である。絶対零度では、 $(q + 1/2)\hbar\omega_c \leq E'_F$ を満たす整数 q に対応するランダウ準位が占有されている。これを満たす最大の整数を q_{\max} と書くと、充填されたランダウ準位数は $q_{\max} + 1$ であるから、この k -板に属する電子の数は、実空間の単位面積当たり

$$n_e(k_z) = (q_{\max} + 1)\xi B \quad (6B.3)$$

である。

B を増大させていくと、 n_e は、(6B.3) により線形に増加するが、

$$q_{\max} + \frac{1}{2} = \frac{E'_F}{\hbar\omega_c} = \frac{mE'_F}{\hbar e} \frac{1}{B} \quad (6B.4)$$

を B が超えると q_{\max} の値が 1 つ減り、不連続に減少する。すなわち、 $n_e(k_z)$ は、 $1/B$ に対して周期的に振動し、その振幅 (条件 (6B.4) での下落幅) は ξB のように、 B に対して線形に増加するが、振動の中心値は磁場を印加する前の k -板内の仮想的 2 次元電子系の電子濃度 (n_{e0} とする) である。この様子を図 6B.1 に示した。この図に示したように、ランダウ準位 1 つについて、ゼロ磁場での電子状態を単位面積当たり eB/h 個ずつ (付録 6A) 割り当てた、と見ることができる。振動中、 $n_e(B) = n_{e0}$ と、電子濃度が中心値に一致する磁場では、 $(q_{\max} + 1)(eB/h)$ が n_{e0} と一致している。この時の $q_{\max} + 1$ を ν 、磁場の値を B_ν と書くと、

$$B_\nu = \frac{1}{\xi} \frac{n_{e0}}{\nu} = \frac{2\pi}{\delta k_z} \phi_0 \frac{n_{e0}}{\nu} \quad (\nu = 1, 2, \dots) \quad (6B.5)$$

である。また、 q_{\max} の値が一定値を取る、この B_ν を含む磁場領域の境界値は

$$B_{\nu\pm} = \frac{mE'_F}{\hbar e} \frac{1}{\nu \pm 1/2} \quad (6B.6)$$

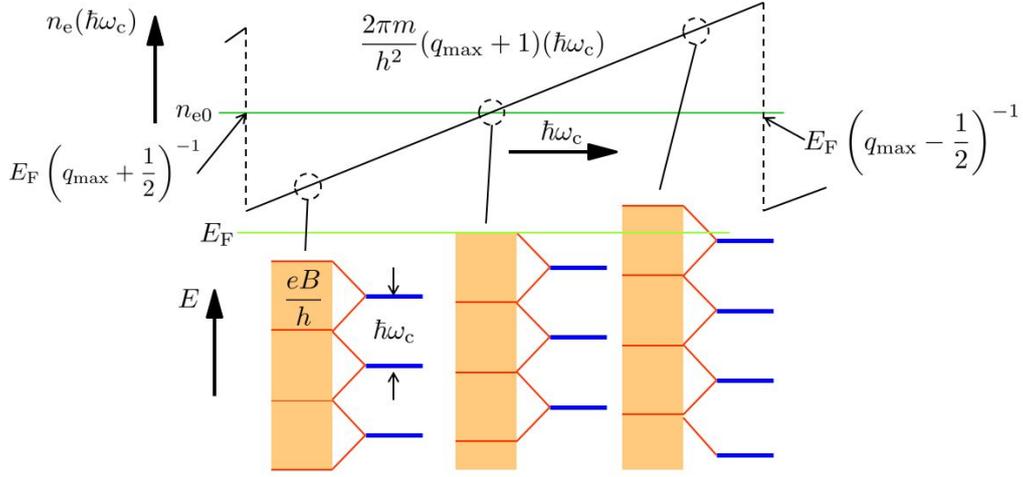


図 6B.1 磁場と共にランダウ単位間隔 $\hbar\omega_c$ が増加し、疑似 2 次元系の電子濃度が線形増加と、 q_{\max} が減少する点で下落する様子の模式図。下の図は、元の 2 次元系の連続準位で占有されている部分をオレンジで、ランダウ準位を青線で示したもの。

となる。この B_ν に対する k -板内電子のエネルギー $U_{\nu 0}$ は

$$\begin{aligned}
 U_{\nu 0} &= \xi B_\nu \hbar\omega_c \sum_{q=0}^{\nu-1} \left(q + \frac{1}{2} \right) + n_e \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} = \frac{\xi B_\nu \hbar\omega_{c\nu}}{2} \nu^2 + n_e \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \\
 &= \frac{\hbar\omega_{c\nu}}{2\xi B_\nu} n_{e0}^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} n_{e0} = \frac{h^2}{2m\delta k_z} n_{e0}^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} n_{e0} \quad (6B.7)
 \end{aligned}$$

と表せる。これは、磁場に依存せず、 E_F 以下のゼロ磁場の k -板内電子エネルギーを足し上げたものと同じであるが、磁場の区間 $[B_{\nu+}, B_{\nu-}]$ においても n_e に対する表式と考えることができる。そこで、

$$U = \frac{h^2}{2m\delta k_z} n_e^2 + n_e \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + (n_{e0} - n_e) E'_F \quad (6B.8)$$

という量を考える。右辺の最初の 2 項は上記の (6B.7) の拡張で k -板内電子エネルギーであるが、第 3 項で、 n_e の変化により、 E'_F のところで k -板外へ流出/板内へ流入してきたエネルギーを考慮している。この項のために、式 (6B.6) の磁場で n_e のジャンプが生じて、 U は連続になる。今、 E'_F を

$$E'_F = \hbar\omega_{c\nu} \nu = \hbar \frac{eB_\nu}{m} \frac{2\pi}{\delta k_z} \frac{\hbar n_{e0}}{e B_\nu} = \frac{h^2}{m} \frac{n_{e0}}{\delta k_z} \quad (6B.9)$$

と書いておくと、 U の変化分は

$$\delta U = U - U_{\nu 0} = \frac{h^2}{2m\delta k_z} (n_e^2 - n_{e0}^2) + E'_F (n_{e0} - n_e) = \frac{h^2}{2m\delta k_z} (n_e - n_{e0})^2 \quad (6B.10)$$

となり、常にゼロ以上である。

この k -板部分の電子による磁化は、

$$\delta M = -\frac{\partial U}{\partial B} = -\frac{h^2}{m\delta k_z} (n_e - n_{e0}) \frac{dn_e}{dB} \quad (6B.11)$$

である。 dn_e/dB は、式 (6B.3) より、

$$\frac{dn_e}{dB} = \nu \xi \simeq \frac{E'_F}{\hbar\omega_c} \xi = \quad (6B.12)$$

であるから、 k -板の磁化への寄与は、

$$\delta M \simeq -\frac{E'_F}{B} (n_e - n_{e0}) \quad (6B.13)$$

と求められる。分母の B が線形に上昇するのに対して、 $n_e - n_{e0}$ は激しく振動するため、これが磁化率の振動となる、というこれまでの直観的結果と同じである。

系全体の磁化の様子を見るためには、式 (6B.13) の寄与を、 k_z 全体に対して足し上げる必要がある。このためにまず、 δM を次のように B^{-1} 軸に対してフーリエ展開する。

$$\delta M = \delta k_z \sum_{p=1}^{\infty} A_p \sin px, \quad x = 2\pi \frac{E'_F}{\hbar\omega_c}. \quad (6B.14)$$

$-\pi < x\pi$ に対して、数学公式

$$x = e \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n} \sin nx \quad (6B.15)$$

を用いて、

$$\delta M = -\frac{1}{2\pi} \xi E'_F x = \frac{1}{\pi} E'_F \sum_p (-1)^p \frac{\sin px}{p} \quad (6B.16)$$

とすることができるので、展開係数を

$$A_p = \frac{1}{p\pi} E'_F (-1)^p \frac{\xi}{\delta k_z} = (-1)^p \frac{e E'_F}{4p\pi^3} \quad (6B.17)$$

と求めることができる。以上から k_z についての和は、積分

$$M = \frac{e}{4\pi^3} \sum_p \frac{(-1)^p}{p} \int_{-k_F}^{k_F} dk_z \cdot E'_F \sin \left[\frac{p\pi}{\hbar\omega_c} \left(E_F - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right) \right] \quad (6B.18)$$

の形に書くことができる。

ここで、強磁場ではあるものの、以前 $\hbar\omega_c \ll E_F$ の条件は満たされているとすれば、(6B.18) の被積分関数の内、 E'_F は区間 $[-k_F, k_F]$ で $k_z = 0$ に頂点を持つパラボラとして変化するのに対して、サイン関数部分は k_z に対して激しく正負に振動するため、 $k_z = 0$ 付近を除く領域の積分は消えてしまう。したがって積分中サイン関数の外にある E'_F は E_F で置き換える事ができる。更に公式

$$\int_0^{\infty} \cos \frac{\pi}{2} x^2 dx = \int_0^{\infty} \sin \frac{\pi}{2} x^2 dx = \frac{1}{2} \quad (6B.19)$$

を使って、(6B.18) の積分部分は

$$E_F \left(\frac{\hbar\omega_c m}{2p} \right)^{1/2} \sin \left(\frac{2\pi p E_F}{\hbar\omega_c} - \frac{\pi}{4} \right) \quad (6B.20)$$

と計算される。これより、磁化を

$$M = \frac{E_F e^{3/2} (\hbar B)^{1/2}}{4\pi^3} \sum_p \frac{(-1)^p}{p^{3/2}} \sin \left(p \frac{2\pi E_F}{\hbar\omega_c} - \frac{\pi}{4} \right) \quad (6B.21)$$

と書くことができる。

以上は、球状のフェルミ面 (等方有効質量) を持つ金属についての de Haas-van Alphen 効果であったが、ここで、 E'_F を一般のフェルミ面の場合に拡張する。一般の場合でも、球面の場合の赤道付近と同様、フェルミ面の位置の k_z に対する変化が緩くなった付近が大きな寄与をする。従って、dHvA 振動を測定しながら磁場の角度を変え、振動周期や振幅の解析をすることで、フェルミ面の情報を詳細に取ることができる。

付録 6C：グラフェンの電子状態

単層グラフェンの結晶は、図 6C.1(a) のように、炭素原子が六角格子を組んだ単純な構造をしている。図に示した菱形が単位胞で、単位格子ベクトルおよび逆格子ベクトルは、

$$\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{3}a/2 \\ a/2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ a \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_1 = \begin{pmatrix} 4\pi/\sqrt{3}a \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_2 = \begin{pmatrix} -2\pi/\sqrt{3}a \\ 2\pi/a \end{pmatrix} \quad (6C.1)$$

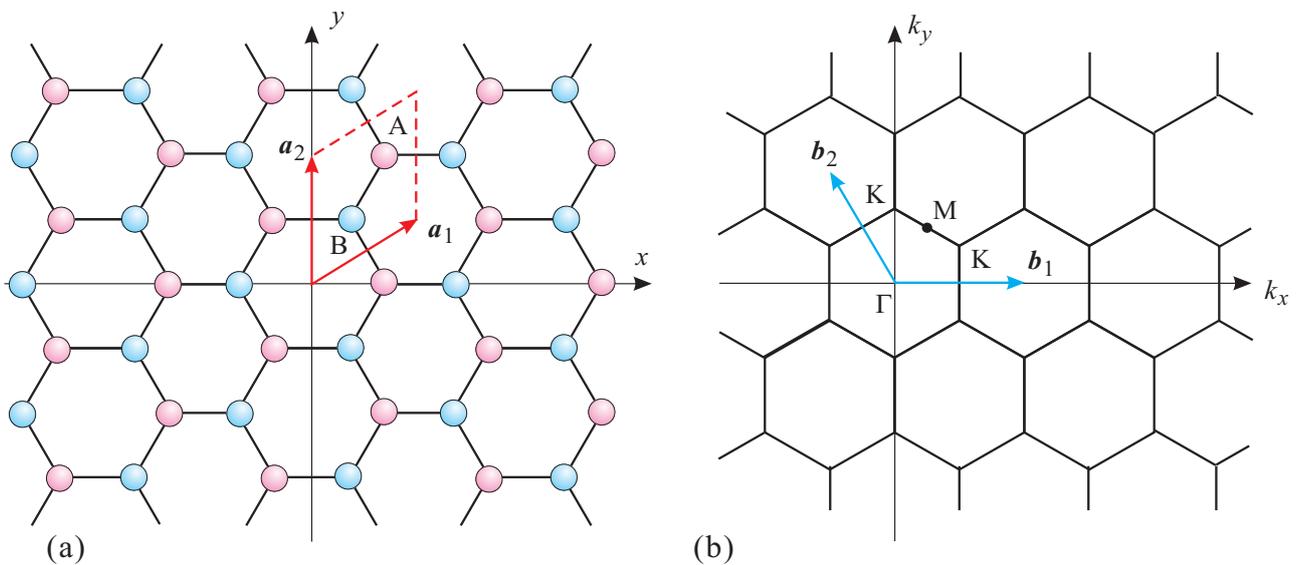


図 6C.1 (a) グラフェンの 2次元結晶構造. 炭素原子が蜂の巣的な六角格子構造を組んでいる. A 位置と B 位置の 2種類の面心平方格子を重ねたものと見こともできる. (b)(a) の逆格子. a_1, a_2 に対応する逆格子ベクトルは b_1, b_2 である. 第一ブリルアンゾーンの中心を Γ 点, 対称性の良い点としては, 図に示した K 点, M 点がある.

と書くことができる.

以下, 最も簡単な近似の下, グラフェンの電子状態を計算してみる. 大変粗い近似であるから, 実験と比べるような精度はないが, 真性グラフェンにおいて, フェルミ準位位置にディラック点があることが結晶構造から結論されることは理解できる. C 原子は IV 族で, 最外殻電子は $2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$ に詰めることになるが, 結晶構造からもわかるように, これらは 1 次結合を作ることで, sp^2 混成の σ 電子と π 電子に別れ, σ 電子は共有結合を作って六角格子を形成しており, そのエネルギー帯は低い位置にある. 従って, フェルミ準位付近で問題となるのは π 電子の方である. そこで, 六角格子上の π 電子系について Schrödinger 方程式を考える.

これを

$$\psi = \mathcal{H}\psi \tag{6C.2}$$

とし, 図 6C.1(a) のように, 格子上的サイトを A サイトと B サイトとに分け, 強束縛近似で考える. すなわち,

$$\psi = \zeta_A \psi_A + \zeta_B \psi_B, \tag{6C.3}$$

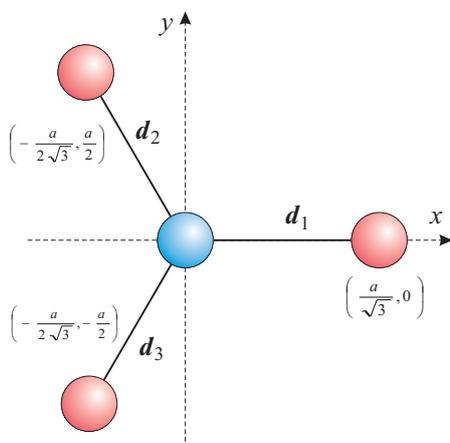


図 6C.2 3つの炭素原子最近接間結合を表すベクトル.

$$\psi_A = \sum_{j \in A} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \quad (6C.4a)$$

$$\psi_B = \sum_{j \in B} \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r}_j) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j). \quad (6C.4b)$$

$\phi(\mathbf{r})$ は π 電子の原子波動関数, \mathbf{r}_j は格子位置である. ここで各部分格子波動関数間のハミルトニアン行列要素を

$$H_{AA} = \langle \psi_A | \mathcal{H} | \psi_A \rangle, \quad H_{BB} = \langle \psi_B | \mathcal{H} | \psi_B \rangle, \quad H_{AB} = H_{BA}^* = \langle \psi_A | \mathcal{H} | \psi_B \rangle, \quad (6C.5)$$

とする. また, 系内の原子数を $2N$, すなわち

$$\langle \psi_A | \psi_A \rangle = \langle \psi_B | \psi_B \rangle = N \quad (6C.6)$$

とする. 強束縛近似で $\langle \psi_A | \psi_B \rangle = 0$ とすると, 式 (6C.3) を (6C.2) に代入してトリビアルでない (ζ_A, ζ_B) が存在する条件から, 永年方程式

$$\begin{vmatrix} H_{AA} - NE & H_{AB} \\ H_{BA} & H_{BB} - NE \end{vmatrix} = 0 \quad (6C.7)$$

が得られ, 結局

$$E = (2N)^{-1} \left(H_{AA} + H_{BB} \pm \sqrt{(H_{AA} - H_{BB})^2 + 4|H_{AB}|^2} \right) \equiv h_{AA} \pm |h_{AB}|. \quad (6C.8)$$

ただし, 対称性より, $H_{AA} = H_{BB}$ であることを用い, また, $(2N)^{-1}$ で原子あたりにした量を小文字で表した.

$$H_{AB} = \sum_{l \in A, j \in B} \exp[i\mathbf{k}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_l)] \langle \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) | \mathcal{H} | \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \rangle_r. \quad (6C.9)$$

ここで更に, \mathcal{H} の行列要素は最近接波動関数にしかない, と近似する. 計算するための中心原子を図 6C.1(a) の A と書かれた原子にとると, A から最近接原子 1, 2, 3 までの 3 つのベクトルを $\mathbf{d}_i (i = 1, 2, 3)$ とすると, 図から明らかのように,

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_1 = \frac{k_x a}{\sqrt{3}}, \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_2 = \left(-\frac{k_x}{2\sqrt{3}} + \frac{k_y}{2} \right) a, \quad \mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_3 = \left(-\frac{k_x}{2\sqrt{3}} - \frac{k_y}{2} \right) a \quad (6C.10)$$

である ($a = |\mathbf{a}_1| = |\mathbf{a}_2|$). また, $\langle \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_l) | \mathcal{H} | \phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j) \rangle_r$ の項については, 対称性から全て等しく, これを ξ と置く. 結局結晶構造から残りの共鳴積分はこの繰り返しであるから,

$$h_{AB} = \left(\sum_{j=1}^3 \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_j) \right) \xi. \quad (6C.11)$$

である.

式 (6C.10), (6C.11) を式 (6C.8) へ代入することで, 次のエネルギー表式が得られる.

$$E = h_{AA} \pm \xi \sqrt{1 + 4 \cos \frac{\sqrt{3}k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + 4 \cos^2 \frac{k_y a}{2}}. \quad (6C.12)$$

第 2 項が隣接原子共鳴積分による摂動項であるが, 逆格子空間で \mathbf{K} 点と呼ばれる

$$(k_x, k_y) = \left(0, \pm \frac{4\pi}{3a} \right), \quad \left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \pm \frac{2\pi}{3a} \right), \quad \left(-\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}, \pm \frac{2\pi}{3a} \right) \quad (6C.13)$$

でゼロとなることがわかる. $k_y = 4\pi/3a$ とすると, $k_x = 0$ (\mathbf{K} 点の 1 つ) の周りで (6C.12) は

$$E \left(k_x, \frac{4\pi}{3a} \right) \approx h_{AA} + \frac{\sqrt{3}\xi a}{2} |k_x| \quad (6C.14)$$

と表される. すなわち, \mathbf{K} 点では上側のバンドは下側にリニアな尖った形になっている. 下側も同様であるから, 結局, \mathbf{K} 点では図 6C.3 のようにディラック点と呼ばれる, エネルギーギャップと有効質量がないバンド構造が生じる.

式 (6C.12) 自身は, 1 次元結晶の強束縛近似で余弦バンドが現れるのと同様で余り現実的なものではないが, 上の議論で \mathbf{K} 点にディラック点が現れた理由を考えると, 式 (6C.11) で 2π を 3 等分する方向に等しい共鳴積分が存在することが挙げられ, このことは, 近似の精度を上げて同じ対称性が成立するため, 同じようにバンド構造に現れる. すなわち, \mathbf{K} 点は現実的にディラック点と考えて良い.

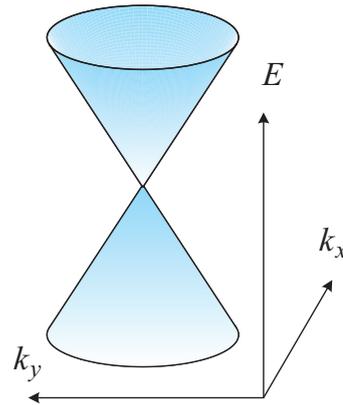
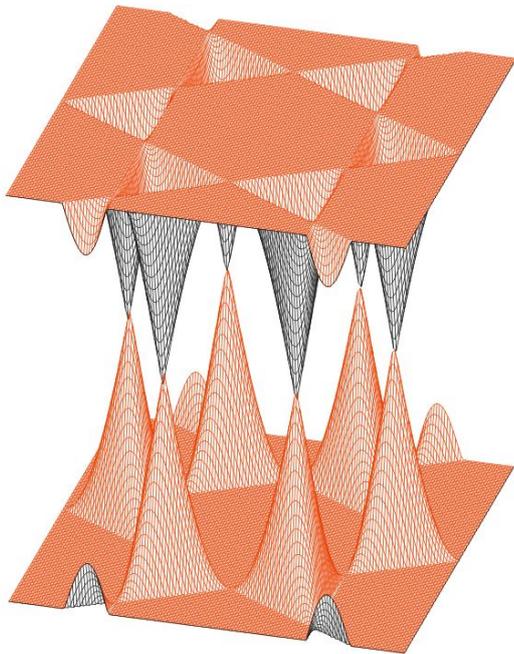


図 6C.3 左図：グラフェンのエネルギーバンド表式 (6C.12) をプロットし、K 点にコーンの頂点が一致した、ディラック点が見られる様子を示したもの。上図：ディラック・コーンを模式的に描いた。

参考文献

- [1] P M C Rourke, A F Bangura, T M Benseman, M Matusiak, J R Cooper, A Carrington, and N E Hussey. A detailed de haas-van alphen effect study of the overdoped cuprate $\text{tl}_2\text{ba}_2\text{cuo}_{6+\delta}$. *New Journal of Physics*, Vol. 12, No. 10, p. 105009, October 2010.
- [2] Hidetoshi Fukuyama. Theory of orbital magnetism of bloch electrons: Coulomb interactions. *Progress of Theoretical Physics*, Vol. 45, No. 3, pp. 704–729, March 1971.
- [3] Masao Ogata and Hidetoshi Fukuyama. Orbital magnetism of bloch electrons i. general formula. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 84, No. 12, p. 124708, December 2015.
- [4] Masao Ogata. Orbital magnetism of bloch electrons: II. application to single-band models and corrections to landau–peierls susceptibility. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 85, No. 6, p. 064709, June 2016.
- [5] Masao Ogata. Orbital magnetism of bloch electrons: III. application to graphene. *Journal of the Physical Society of Japan*, Vol. 85, No. 10, p. 104708, October 2016.
- [6] J. W. McClure. Diamagnetism of graphite. *Phys. Rev.*, Vol. 104, pp. 666–671, Nov 1956.
- [7] Bogdan Semenenko and Pablo Esquinazi. Diamagnetism of bulk graphite revised. *Magnetochemistry*, Vol. 4, No. 4, p. 52, November 2018.
- [8] 越野幹人. グラフェンにおける巨大な軌道反磁性 (最近の研究から). *日本物理学会誌*, Vol. 65, No. 1, pp. 21–25, 2010.
- [9] Mikito Koshino and Tsuneya Ando. Orbital diamagnetism in multilayer graphenes: Systematic study with the effective mass approximation. *Phys. Rev. B*, Vol. 76, p. 085425, Aug 2007.
- [10] W. Heisenberg. Mehrkörperproblem und resonanz in der quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik*, Vol. 38, No. 6-7, pp. 411–426, June 1926.
- [11] L D Landau and E. M. Lifshitz. *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory (English Edition)*. Butterworth-Heinemann, 12 1981.
- [12] Charles Kittel. *Quantum Theory of Solids 2E Rev P*. WILEY, 3 1987.