

電子物性2 第11回目

4.7 電子構造に関する実験

ドハース・ファンアルフェン効果

磁化率が磁場の逆数に対して振動する現象。この振動の周期からかけた磁場に垂直なフェルミ面の極大または極小の面積が求まる。

磁場中の伝導電子の運動

速度 \boldsymbol{v} 、磁束密度 \boldsymbol{B} で表される磁場中を運動する電子にはローレンツ力が働く

$$\mathbf{F} = (-e)(\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}) \cdots (4.1)$$

自由電子の場合、波数ベクトルを用いて

$$\mathbf{F} = \frac{\hbar d\mathbf{k}}{dt} = (-e)(\boldsymbol{v} \times \boldsymbol{B}) \cdots (4.2)$$

実空間において伝導電子は速度 \boldsymbol{v} と直角方向に力を受けるので回転運動を始める。
磁場は、運動の方向を変えるが、 \boldsymbol{v} の大きさは変えない。

逆格子空間で見ると、波数 \mathbf{k} の伝導電子は、磁場と垂直な面内の等エネルギー面上の軌道を回転運動する。(4.2)を時間で積分すると

$$\mathbf{k} - \mathbf{k}_0 = \frac{(-e)}{\hbar} (\mathbf{r} \times \boldsymbol{B}) \cdots (4.3)$$

\mathbf{k}_0 は積分定数

ボーア・ゾンマーフェルトの量子化の規則を使うと自由電子に対しては、

$$\oint \{\hbar\mathbf{k} + (-e)\mathbf{A}\} \cdot d\mathbf{r} = \oint \hbar\mathbf{k} \cdot d\mathbf{r} + (-e) \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \left(n + \frac{1}{2}\right) h \cdots (4.4)$$

をえる。 n はゼロを含む正の整数。 \mathbf{A} はベクトルポテンシャル $\text{rot } \mathbf{A} = \mathbf{B}$
積分は電子の閉じた軌道に沿って1周行う。ストークスの定理

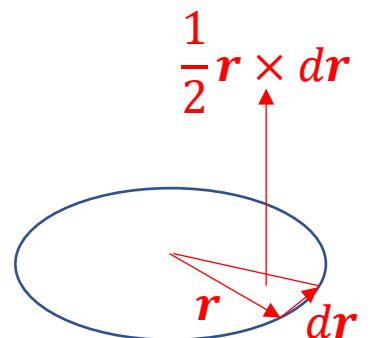
$$\oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \iint \text{rot } \mathbf{A} \cdot d\mathbf{S} = \iint \mathbf{B} \cdot d\mathbf{S} = BS = \Phi \cdots (4.5)$$

ここで、 S は実空間における電子の軌道面積であり、 Φ は磁束である。

(4.3) の \mathbf{k}_0 をゼロと置いた $\mathbf{k} = \frac{(-e)}{\hbar}(\mathbf{r} \times \mathbf{B})$ を用いて (4.4) の第一項を計算すると、

$$\oint \hbar\mathbf{k} \cdot d\mathbf{r} = (-e) \oint (\mathbf{r} \times \mathbf{B}) \cdot d\mathbf{r} = -(-e)\mathbf{B} \cdot \oint \mathbf{r} \times d\mathbf{r} = -2(-e)BS = 2eBS = 2e\Phi \cdots (4.6)$$

スカラーリー三重積の順番を変える



(4.5) と (4.6) を合わせると (4.4) は、

$$(-e)BS + 2eBS = eBS = \left(n + \frac{1}{2}\right) h = e\Phi \cdots (4.7)$$

ド・ハース・ファンアルフェン効果を考えるために、 \mathbf{k} 空間において電子が囲む軌道面積 $A(E)$ を考慮する必要性

(4.2)より、 $\frac{\hbar d\mathbf{k}}{dt} = (-e)(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) = (-e) \left(\frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{B} \right)$ だから、 \mathbf{B} に垂直な線素 Δr と Δk の間には（大きさの関係は）

$$\Delta r = \frac{\hbar}{eB} \Delta k$$

の関係がある。

逆格子空間でエネルギー E の電子が囲む軌道面積を $A(E)$ とすると、実空間での面積 S と

$$A(E) = \left(\frac{eB}{\hbar} \right)^2 S \cdots (4.8)$$

で結ばれる。

(4.8)へ(4.7)を代入すると、

$$A_n(E) = \left(\frac{eB}{\hbar} \right)^2 \times \frac{1}{eB} \left(n + \frac{1}{2} \right) h = \frac{2\pi eB}{\hbar} \left(n + \frac{1}{2} \right) \cdots (4.9)$$

を得る。

(4.9)は、逆格子空間における電子の軌道が量子化され、1つの軌道と次の軌道が囲む面積が

$$\frac{2\pi eB}{\hbar}$$

だけ異なることを示している。

磁場が z 軸方向にかけられたとすると、 xy 平面内の電子の運動にのみに影響する。



量子化条件(4.4)は、逆格子空間で磁場に垂直な xy 平面に平行な軌道面積に適用される。 xy 平面内の電子の円軌道は **主量子数 n** ($k_x, k_y \rightarrow n$: 1自由度減る) で記述される。

自由電子の球状のフェルミ面は磁場中では、 z 軸を中心軸とする共軸円筒状のフェルミ面にかわる。(図 1)

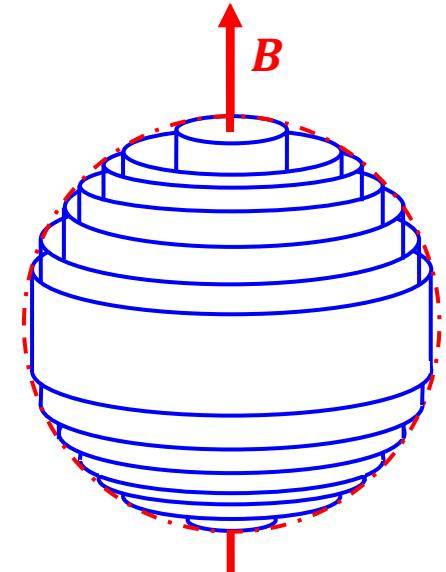


図 1

z 軸方向の **量子数 k_z** は影響を受けない。このフェルミ面を xy 平面に射影すると図 2 のように量子数 $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ に対応した同心円となる。電子はこのような離散的な準位のみを占有する。

このような共軸円筒上のエネルギー準位を **ランダウ準位** とよぶ。

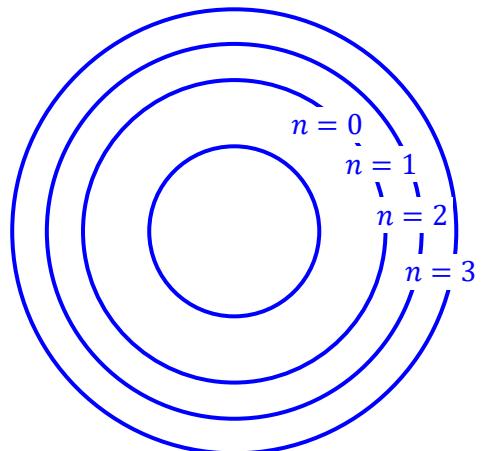


図 2

B の変化に伴う伝導電子のエネルギー分布の変化

磁場中では、 n で決められた量子化されたエネルギー準位を占有しなければならない。

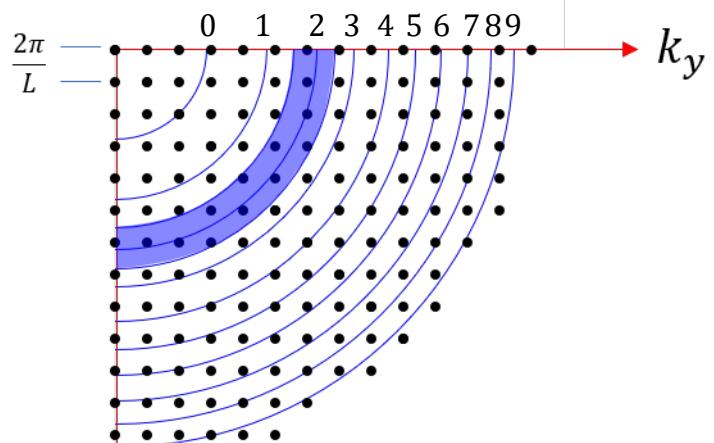
$B = 0$ の場合に比べて、エネルギーの上がる電子、下がる電子がある。
電子系全体のエネルギーはほとんど変化しないはず。

実際は磁場の関数でわずかではあるが、それは振動的な変化をする。

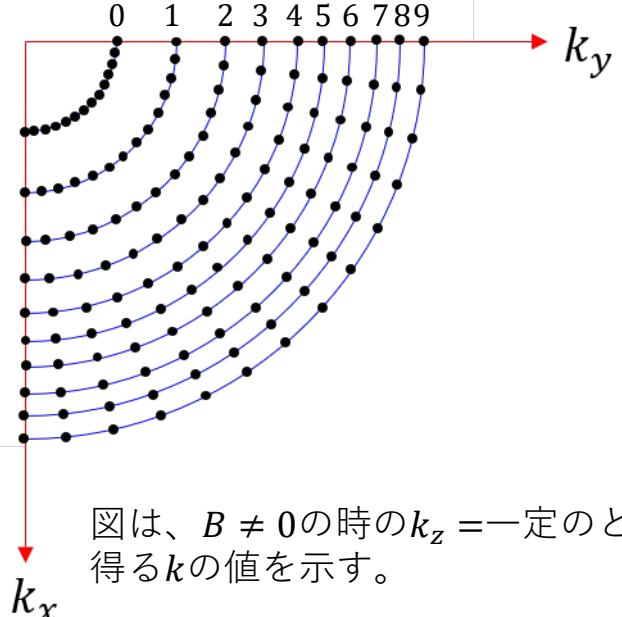
磁場が z 軸方向にかけられた場合、自由電子のエネルギー固有値は

$$\varepsilon = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \cdots (4.10)$$

と量子化される。ここで $\omega_c = \frac{eB}{m}$ (自由電子のサイクロトロン振動数) である。ランダウ準位間のエネルギー差は、磁場が増大するとともに大きくなる。



図は、 $B = 0$ の時の $k_z = \text{一定}$ のとり得る k の値を示す。線はランダウ準位を表す。青い網掛けは $n=2$ 準位に関係する面積を表す。



図は、 $B \neq 0$ の時の $k_z = \text{一定}$ のとり得る k の値を示す。

磁場がある時のランダウ準位の電子の占有の仕方

($B_1 < B_2 < B_3$ 、絶対零度とし、電子スピンは無視する。)

$B = 0$ の時、電子はフェルミ準位まで占有

$B = B_1$ の時、 k_x, k_y 平面内の軌道は量子化され、電子はランダウ準位を占有する。

隣り合う軌道間の面積は、(4.9) より

$$\Delta A_n = A_n(E) - A_{n-1}(E) = \frac{2\pi eB}{\hbar}$$

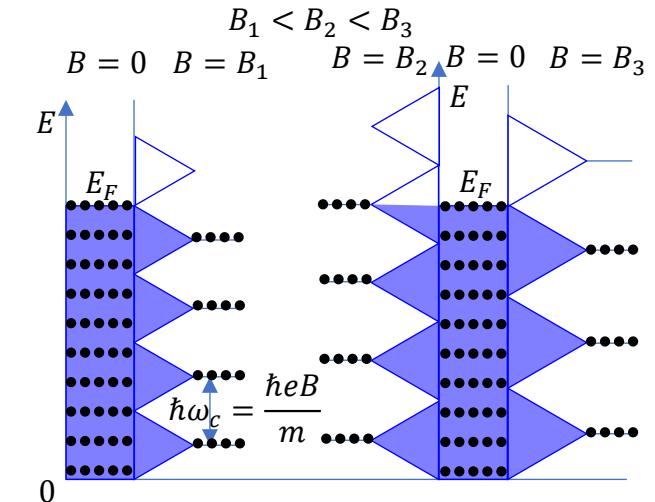
異なる。

一辺の長さが L の正方形の試料に対して $\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2$ の面積に 1 つの電子が収容されるから、1 つのランダウ準位を占有する自由電子の数 D はスピンを無視すると

$$D = \frac{2\pi eB}{\hbar} \left(\frac{L}{2\pi}\right)^2$$

である。

磁場を増加していくと、最低状態 $n = 0$ のエネルギー準位は少し上に上がる。もともと最低準位にいた電子のエネルギーはその分上がる。しかし、 $n = 1$ のレベルにいた電子のいくらかは磁場の増加により新しい $n = 0$ に入るので、その分エネルギーを下げる。エネルギー間隔が粗になる分だけ、各準位に収容される電子数は増えることになるが、フェルミ準位より低い位置に現れるランダウ準位に関する限り、磁場が変化しても電子系のエネルギーは変動しない



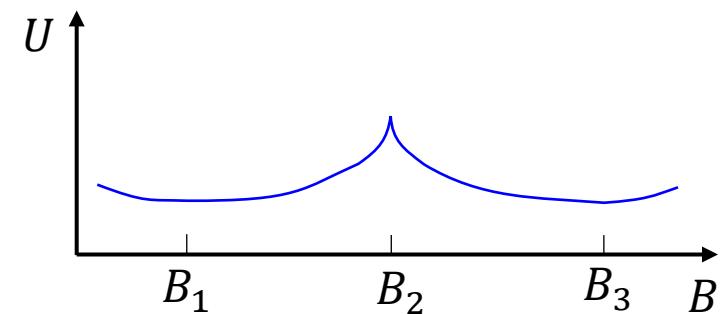
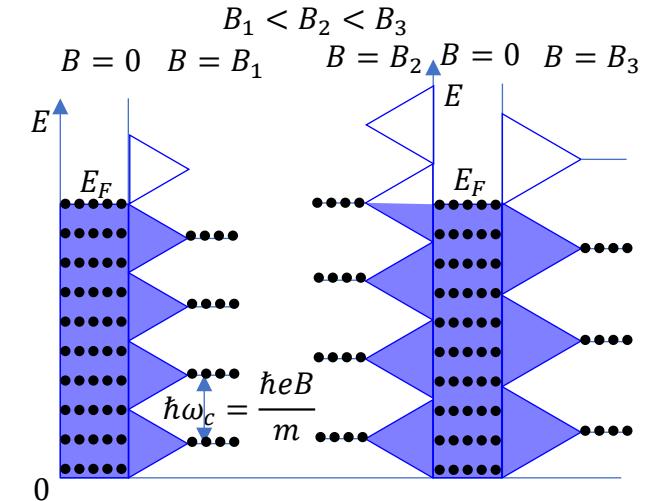
$B = B_2$ の時、磁束密度を B_1 から B_2 へ増加していくとランダウ準位は増加し、フェルミ準位に一致している。この時電子の全エネルギーは増加し最も高くなる。

$B = B_3$ の時、さらに B_2 より磁場が増加すると、下から上がってきたランダウ準位にこれらの電子は吸収され、この時点で、エネルギーが下がる。磁場を増加していくと、これが繰り返される。

すなわち、フェルミ準位付近の電子のエネルギーが磁場の関数で振動することになる。

伝導電子系の内部エネルギーがこのように磁場の関数で振動するので、種々の電子物性にこの性質が反映する。磁化率 χ は内部エネルギーの磁場微分である。磁化率は磁場の関数で振動する。これが **ドハース-ファンアルフェン効果** である。

内部エネルギーの温度微分である **比熱** も、磁場の増加とともに振動的に変動する。これは **磁気熱効果(magneto-thermal effect)** とよばれている。また、電気抵抗の振動は **ドハース-シュブニコフ効果** として知られている。



実際の測定では、

隣り合う2つのランダウ準位 $n_1 = n$ と $n_2 = n - 1$ がフェルミ準位を横切る磁場の強さをそれぞれ B_1, B_2 とすると(4.9)式より、

$$\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{1}{B_1} - \frac{1}{B_2} = \frac{2\pi e}{\hbar A(E)} \cdots (4.11)$$

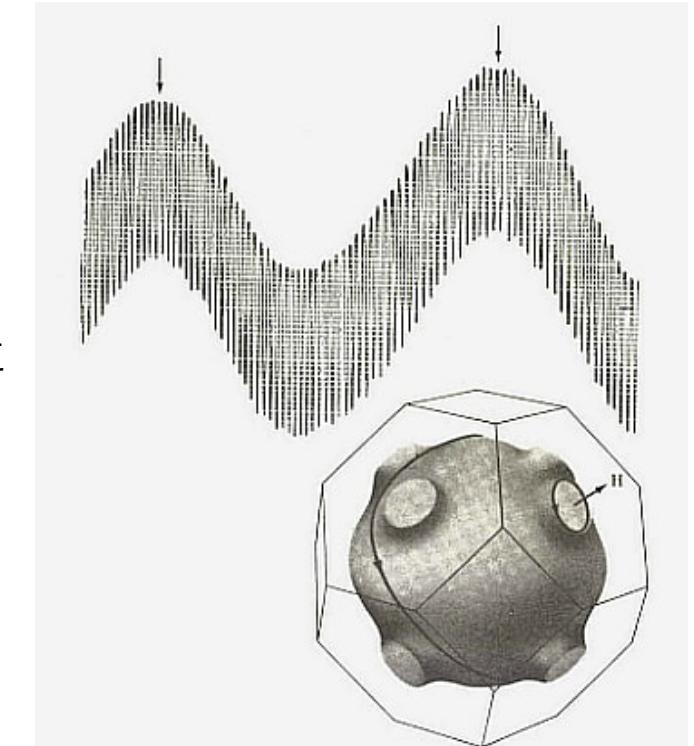
を得る。

そのため振動する磁化率を $\frac{1}{B}$ でプロットするとその周期は(4.11)で与えられ、その周期よりフェルミ面の断面積 $A(E)$ が求まる。この時、磁場に垂直なフェルミ面の切り口のうちで断面積の極大または極小が求まる。

単結晶を使い色々な方位に磁場をかけて磁化率の振動周期を測定すればフェルミ面の3次元構造が決まる。

ランダウ準位は電子が磁場中でローレンツ力を受けて回転運動することにより生じた。その回転半径は磁場が強くなるほど小さくなる。電子の回転運動を妨げるのは不純物による散乱であり、また有限温度におけるイオンの熱振動による散乱である。1回転する前に散乱されてしまうようではランダウ準位は形成されず、したがってドハース・ファンアルフェン効果は観測できない。

電子が磁場中で十分に回転運動できるためその平均自由行程が長いことが必要である。そのため、高純度の単結晶、極低温、高磁場が必要。



銀のドハース・ファンアルフェン効果