

ホール係数はバンド構造によりどう変化するか（一般的なバンド構造の場合）

2015.11.21 鈴木 実

1 はじめに

ホール係数の計算ではほとんどの場合球形の等エネルギー面を有する放物型のバンド構造を仮定している。これは多くの金属や n 形半導体の場合にはほぼ当てはまると考えて良い。しかし、p 形半導体の場合には価電子が主として p 電子で構成されることから重い正孔のバンド構造の等エネルギー面が [110] 方向あるいは [111] 方向に突出して球形から大きくずれる。つまりワープバンド構造 (warped band structure) になる。このような場合、ホール係数にはどのようにバンド構造の形が影響するのだろうか。このような場合に計算できる理論を McClure [1] が考えている。ここではその論文を follow したメモを記録しておくことにする。また、ワープバンド構造の極端な例として、Goldberg ら [2] はフェルミ面あるいは等エネルギー面が立方体の場合について、McClure 理論に基いて計算している。その結果についても計算を follow しておく。

2 McClure の理論

まず、ボルツマン-ブロッホ方程式から出発する。

$$-\frac{e}{\hbar}(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = -\frac{f - f_0}{\tau} \quad (1)$$

ここで、

$$f = f_0 - \phi \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \quad (2)$$

とすると、これまでと同様にして（たとえば 2015/9/6 のエントリー）

$$e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v} - \frac{e}{\hbar}(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{k}} + \frac{\phi}{\tau} = 0 \quad (3)$$

となる。

2.1 \mathbf{k} の閉軌道 (hodograph) を考えて ϕ を解く

これを解く一つの方法として、ここで McClure は時間という変数 s を導入している。 s の時間としての変数の意味を理解するために波数ベクトル \mathbf{k} の運動方程式を考えてみよう。電場と磁場が存在するとき、運動方程式は

$$\frac{\partial}{\partial t}(\hbar \mathbf{k}) = -e\mathbf{E} - e(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (4)$$

となる。荷電粒子の古典的な運動なら解は $\mathbf{v} = (\mathbf{E} \times \mathbf{B})/B^2$ となり、粒子は磁場と電場の両方に直角な方向に一定速度運動する。

式 (3) を解くために、

$$\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} = -\frac{e}{\hbar}(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (5)$$

と置きたい。しかし、変数を t とすると、運動方程式の t と同じになるので都合が悪い。それで、 t とほぼ同じ意味合いで変数 s を導入する。すなわち、

$$\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial s} = -\frac{e}{\hbar}(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \quad (6)$$

と変数 s を導入する。これを式 (3) に代入すると、

$$e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v} + \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial s} \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{k}} + \frac{\phi}{\tau} = 0 \quad (7)$$

したがって、

$$\frac{\partial \phi}{\partial s} + \frac{\phi}{\tau} = -e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v} \quad (8)$$

となる。これは非斉次線形微分方程式で、その解は次のとおりである¹。

$$\begin{aligned} \phi &= e^{-\int_{r'}^s \frac{1}{\tau} ds''} \left[\int_{r'}^s (-e\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}) e^{\int_{r'}^{s'} \frac{1}{\tau} ds''} ds' \right] \\ &= -e \int_{r'}^s \mathbf{E} \cdot \mathbf{v}(s') e^{-\int_{s'}^s \tau^{-1} ds''} ds' \end{aligned} \quad (9)$$

\mathbf{k} は s の周期関数、 ϕ は \mathbf{k} の一価関数、したがって、 ϕ は s の周期関数である。したがって、 ϕ も \mathbf{v} も周期関数になる。式 (9) で、 r' が有限だとすると、 ϕ の周期性に制限が課せられるので、任意の周期性を認めれば $r' = -\infty$ でないといけない。

τ は s に依存しないとする（時間変化しない）。式 (9) は次のように簡単になる。

$$\phi = -e \int_{-\infty}^s \mathbf{E} \cdot \mathbf{v}(s') e^{-(s-s')/\tau} ds' \quad (10)$$

ここで、 \mathbf{v} は s の周期関数であるので、次のようにフーリエ級数に展開する。

$$\mathbf{v} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathbf{v}_m e^{im\omega s} \quad (11)$$

\mathbf{v} は実数であるから $\mathbf{v}_m^* = \mathbf{v}_{-m}$ でなければならない。これを式 (10) に代入すると、

$$\begin{aligned} \phi &= -e \int_{-\infty}^s \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_m e^{im\omega s' + s'/\tau - s/\tau} \\ &= -e e^{-s/\tau} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_m \frac{1}{im\omega + \frac{1}{\tau}} e^{im\omega s + s/\tau} \\ &= -e\tau \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_m \frac{e^{im\omega s}}{im\omega\tau + 1} \end{aligned} \quad (12)$$

となる。

周期を T とする。 T は 1 回の周回積分により、

$$T = \frac{2\pi}{\omega} = \oint \frac{dk}{k} \quad (13)$$

¹寺澤寛一「数学概論」p.238 より

$$\frac{dy}{dx} + P(x)y = Q(x)$$

の解は

$$y = e^{-\int P(x)dx} \left[\int e^{\int P(x)dx} Q(x)dx \right]$$

である。

と表すことができる.

運動方程式の式 (5) より $\dot{\mathbf{k}} = -e\hbar^{-1}\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ であるから, \mathbf{v} の \mathbf{B} と直交する成分を v_p とすると,

$$\dot{k} = -\frac{ev_p B}{\hbar} \quad (14)$$

となる. これを式 (13) に代入すると,

$$T = \oint \frac{\hbar}{ev_p B} dk = \frac{\hbar}{eB} \oint \frac{dk}{v_p} \quad (15)$$

となる.

2.2 単一バンドにおける電流

単一バンドにおける電流を \mathbf{J} とすると,

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= -\frac{e}{(2\pi)^3} \int \mathbf{v} f d\mathbf{k} = -\frac{e}{(2\pi)^3} \int \mathbf{v} \left(-\phi \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) d\mathbf{k} \\ &= \frac{e}{(2\pi)^3} \int \mathbf{v} (-e\tau) \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_m \frac{e^{im\omega s}}{im\omega\tau + 1} \left(\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) d\mathbf{k} \\ &= -\frac{e^2}{(2\pi)^3} \int \tau \sum_{m,n=-\infty}^{\infty} \mathbf{v}_n (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_m) \frac{e^{i(m+n)\omega s}}{im\omega\tau + 1} \left(\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) d\mathbf{k} \end{aligned} \quad (16)$$

となる. ここで, 上の式の

$$\sum_{m,n=-\infty}^{\infty} \mathbf{v}_n (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_m) \frac{e^{i(m+n)\omega s}}{im\omega\tau + 1}$$

の部分に 1 周期 T について平均したものを \mathbf{M} とおく.

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} \int_0^T \sum_{m,n=-\infty}^{\infty} \mathbf{v}_n (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_m) \frac{e^{i(m+n)\omega s}}{im\omega\tau + 1} ds \\ = \frac{\omega}{2\pi} \int_0^T \sum_{m,n=-\infty}^{\infty} \mathbf{v}_n (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_m) \frac{e^{i(m+n)\omega s}}{im\omega\tau + 1} ds \\ = -\frac{\omega}{2\pi} \frac{1}{e\tau} \int_0^T \phi \mathbf{v} ds \equiv \mathbf{M} \end{aligned} \quad (17)$$

この積分は $n = -m$ のときのみ 0 でない. したがって,

$$\mathbf{J} = \frac{e^2}{(2\pi)^3} \int (-\tau \mathbf{M}) \left(\frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \right) d\mathbf{k} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{M} &= -\frac{\omega}{2\pi e\tau} \int_0^T \phi \mathbf{v} ds = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_m) \mathbf{v}_{-m} \frac{1}{im\omega\tau + 1} \\ &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} (\mathbf{v}_{-m} \circ \mathbf{v}_m) \mathbf{E} \frac{1}{im\omega\tau + 1} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} (\mathbf{v}_m^* \circ \mathbf{v}_m) \mathbf{E} \frac{1}{im\omega\tau + 1} \end{aligned} \quad (19)$$

と書くことができる. ここで, テンソル \tilde{S} を次のように定義する.

$$\mathbf{M} = \tilde{S} \mathbf{E} \quad (20)$$

$$\tilde{S} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{\mathbf{v}_m^* \circ \mathbf{v}_m}{im\omega\tau + 1} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left[\frac{(\mathbf{v}_m^* \circ \mathbf{v}_m)}{1 + (m\omega\tau)^2} - \frac{im\omega\tau}{1 + (m\omega\tau)^2} (\mathbf{v}_m^* \circ \mathbf{v}_m) \right] \quad (21)$$

テンソル \tilde{S} の大括弧第 2 項は対角項では 0 になる。また,

$$v_{x,0} = 0, \quad v_{y,0} = 0 \quad (22)$$

が成り立つ²。式 (21) のテンソルを成分ごとに示すと次のとおりである

$$S_{xx} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2|v_{x,m}|^2}{1 + (m\omega\tau)^2} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} S_{xy} &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} \left\{ -i\omega\tau \frac{mv_{x,-m}v_{y,m}}{1 + (m\omega\tau)^2} + \frac{v_{x,-m}v_{y,m}}{1 + (m\omega\tau)^2} \right\} \\ &= \sum_{m=1}^{\infty} \left\{ im\omega\tau \frac{v_{x,m}v_{y,-m} - v_{x,-m}v_{y,m}}{1 + (m\omega\tau)^2} + \frac{v_{x,-m}v_{y,m} + v_{x,m}v_{y,-m}}{1 + (m\omega\tau)^2} \right\} \end{aligned} \quad (24)$$

$$S_{zz} = v_{z,0}^2 + \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2|v_{z,m}|^2}{1 + (m\omega\tau)^2} \quad (25)$$

2.3 バンド構造を円筒座標で考える

\mathbf{k} に関する積分を hodograph に厚みを持たせて総和するという考え方をする。hodograph は k_z 一定, \mathcal{E} 一定という条件で与えられる。そのとき, 任意のバンド形状は次のフーリエ級数で与えられる。

$$\mathcal{E} = \sum_n \mathcal{E}_n(\rho, k_z) e^{in\theta} \quad (26)$$

したがって, \mathbf{v} の計算には変数を次の変換行列を使って \mathbf{k} から円筒座標に変換する。

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial k_x} \\ \frac{\partial}{\partial k_y} \\ \frac{\partial}{\partial k_z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\rho \sin\theta & \rho \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \frac{1}{\rho} \sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \frac{1}{\rho} \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \rho} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial k_z} \end{pmatrix} \quad (27)$$

したがって,

$$v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial k_x} \sum_n \mathcal{E}_n(\rho, k_z) e^{in\theta} = \frac{1}{\hbar} \sum_n \left[\frac{\partial \mathcal{E}_n}{\partial \rho} \cos\theta - \frac{in}{\rho} \mathcal{E}_n \sin\theta \right] e^{in\theta} \quad (28)$$

$$v_y = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial k_y} \sum_n \mathcal{E}_n(\rho, k_z) e^{in\theta} = \frac{1}{\hbar} \sum_n \left[\frac{\partial \mathcal{E}_n}{\partial \rho} \sin\theta + \frac{in}{\rho} \mathcal{E}_n \cos\theta \right] e^{in\theta} \quad (29)$$

² $v_{x0} = 0$ の証明

$$v_{x0} = \frac{1}{T} \int_0^T v_x ds = \frac{\omega}{2\pi} \oint v_x \frac{dk}{k}$$

\mathbf{B} は z 軸方向にあるとする。 $\hbar \mathbf{k} = -e\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ より $1/k = \hbar/ev_p B$ 。ただし, \mathbf{v}_p は \mathbf{B} と直角な成分である。 $d\mathbf{k}$ と \mathbf{B} 方向の単位ベクトルを $\mathbf{e}_{d\mathbf{k}}$ および \mathbf{e}_B , x 軸方向の単位ベクトルを \mathbf{e}_x とする。 \mathbf{v} は $d\mathbf{k}$ と \mathbf{B} に直角であるから

$$\mathbf{v}_p = v_p \mathbf{e}_{d\mathbf{k}} \times \mathbf{e}_B$$

したがって,

$$\begin{aligned} v_{x0} &= \frac{\hbar\omega}{2\pi eB} \oint \frac{v_x dk}{v_p} = \frac{\hbar\omega}{2\pi eB} \oint \frac{\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{v}_p dk}{v_p} = \frac{\hbar\omega}{2\pi eB} \oint \frac{\mathbf{e}_x \cdot (\mathbf{e}_{d\mathbf{k}} \times \mathbf{e}_B) v_p}{v_p} dk \\ &= \frac{\hbar\omega}{2\pi eB} \oint \mathbf{e}_x \cdot (d\mathbf{k} \times \mathbf{e}_B) = -\frac{\hbar\omega}{2\pi eB} \mathbf{e}_x \cdot \oint d\mathbf{k} = 0 \end{aligned}$$

である。なぜなら $\oint d\mathbf{k} = 0$ となるからである。同様に $v_{y0} = 0$ も成り立つ。

となる.

ここで,

$$\begin{aligned} g &= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar} \sum_n \left[\frac{\partial \mathcal{E}_n}{\partial \rho} - \frac{n}{\rho} \mathcal{E}_n \right] e^{i(n+1)\theta} = \frac{1}{\sqrt{2}\hbar} \sum_n \left[\frac{\partial \mathcal{E}_n}{\partial \rho} - \frac{n}{\rho} \mathcal{E}_n \right] (\cos \theta + i \sin \theta) e^{in\theta} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} (v_x + i v_y) \end{aligned} \quad (30)$$

とおく. 複素共役は

$$\begin{aligned} g^* &= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar} \sum_n \left[\frac{\partial \mathcal{E}_n}{\partial \rho} - \frac{n}{\rho} \mathcal{E}_n \right] e^{-i(n+1)\theta} = \frac{1}{\sqrt{2}\hbar} \sum_n \left[\frac{\partial \mathcal{E}_n}{\partial \rho} - \frac{n}{\rho} \mathcal{E}_n \right] (\cos \theta - i \sin \theta) e^{-in\theta} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}\hbar} \sum_n \left[\frac{\partial \mathcal{E}_n}{\partial \rho} + \frac{n}{\rho} \mathcal{E}_n \right] (\cos \theta - i \sin \theta) e^{in\theta} = \frac{1}{\sqrt{2}} (v_x - i v_y) \end{aligned} \quad (31)$$

となり, 次の関係が成り立つ.

$$v_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (g + g^*) = \frac{1}{\hbar} \sum_n \left[\frac{\partial \mathcal{E}_n}{\partial \rho} \cos \theta - \frac{in}{\rho} \mathcal{E}_n \sin \theta \right] e^{in\theta} \quad (32)$$

$$v_y = \frac{1}{\sqrt{2}i} (g - g^*) = \frac{1}{\hbar} \sum_n \left[\frac{\partial \mathcal{E}_n}{\partial \rho} \sin \theta + \frac{in}{\rho} \mathcal{E}_n \cos \theta \right] e^{in\theta} \quad (33)$$

ここで v_x と v_y を s の関数として考える. そのため, ρ を θ の周期関数として考える. ρ の関数である \mathcal{E}_n も θ の周期関数である. そうすると g は θ の周期関数となる. さらに, θ を s の関数として ωs と s の周期関数の和と考えられる. ここでは

$$\theta = \omega s$$

とおく. また, 3 回対称性や 4 回対称性などの対称性は \mathcal{E}_n から g に引き継がれるので, $\mathcal{E}_n = 0$ なら $B_n = 0$ となる. これは後でもう一度述べる.

g は次のようにフーリエ展開することができる.

$$g = \sum_n B_n e^{i(n+1)\omega s} = \sum_n B_{n-1} e^{in\omega s} \quad (34)$$

$$g^* = \sum_n B_n^* e^{-i(n+1)\omega s} = \sum_n B_{-n}^* e^{-i(-n+1)\omega s} = \sum_n B_{-n}^* e^{i(n-1)\omega s} = \sum_n B_{-n-1}^* e^{in\omega s} \quad (35)$$

この関係を用いると,

$$v_x = \frac{1}{\sqrt{2}} (g + g^*) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_n (B_{n-1} + B_{-n-1}^*) e^{in\omega s} \quad (36)$$

$$v_y = \frac{1}{\sqrt{2}i} (g - g^*) = \frac{1}{\sqrt{2}i} \sum_n (B_{n-1} - B_{-n-1}^*) e^{in\omega s} \quad (37)$$

となる. ここで, 式 (11) と, 式 (36), (37) から

$$v_{x,m} = \frac{1}{\sqrt{2}} (B_{m-1} + B_{-m-1}^*) \quad (38)$$

$$v_{y,m} = \frac{i}{\sqrt{2}} (-B_{m-1} + B_{-m-1}^*) \quad (39)$$

が得られる。これから式 (23)–式 (25) に用いられている次式がバンド構造を表す展開係数と関係付けられる。

$$\begin{aligned}
& v_{x,m}v_{y,-m} + v_{x,-m}v_{y,m} \\
&= \frac{i}{2}(B_{m-1} + B_{-m-1}^*)(-B_{-m-1} + B_{m-1}^*) + \frac{i}{2}(B_{-m-1} + B_{m-1}^*)(-B_{m-1} + B_{-m-1}^*) \\
&= i(-B_{m-1}B_{-m-1} + B_{m-1}^*B_{-m-1}^*) \tag{40}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& i(v_{x,m}v_{y,-m} - v_{x,-m}v_{y,m}) \\
&= -\frac{1}{2}(B_{m-1} + B_{-m-1}^*)(-B_{-m-1} + B_{m-1}^*) + \frac{1}{2}(B_{-m-1} + B_{m-1}^*)(-B_{m-1} + B_{-m-1}^*) \\
&= |B_{-m-1}|^2 + |B_{m-1}|^2 \tag{41}
\end{aligned}$$

2.4 バンド構造

磁場中で \mathbf{k} は磁場と直交する平面が等エネルギー面と交差する曲線上を運動する。磁場が z 軸方向にあるとすれば、 \mathbf{k} の運動する閉軌道 (hodograph) は xy 面に平行な面内にある。エネルギーバンドの対称性により、この hodograph も対称的な形状となる。

2.4.1 $k_x k_z$ 面で鏡面对称の場合

hodograph が $k_x k_z$ 面で鏡面对称になる場合を考える。この場合、次の関係が成り立つ。

$$\begin{aligned}
\theta \rightarrow -\theta \quad \text{とすると} \quad & \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_y} \rightarrow -\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_y}, \quad \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_x} \rightarrow \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_x} \\
\text{すなわち} \quad & v_y(-\theta) = -v_y(\theta), \quad v_x(-\theta) = v_x(\theta)
\end{aligned}$$

である。これから、式 (36), (37) により、 g の実部は θ の偶関数、虚部は奇関数でなければならない。式 (34) で、 $B_n = b_1 + ib_2$ とすると、

$$\begin{aligned}
B_n(\cos \theta + i \sin \theta) &= (b_1 + ib_2)(\cos \theta + i \sin \theta) \\
&= (b_1 \cos \theta - b_2 \sin \theta) + i(b_2 \cos \theta + b_1 \sin \theta)
\end{aligned}$$

となるから、 B_n の実部が even なら $b_2 = 0$ でなければならない。また、 B_n の虚部が odd なら $b_2 = 0$ でなければならない。つまり、エネルギーバンド構造が $k_x k_y$ 面で鏡面对称なら B_n は実数である。すなわち、

$$B_n = B_n^*$$

である。この関係を用いて、式 (40), (41) を式 (24) に代入すると、中括弧第 1 項は 0 となるので、

$$S_{xy} = \sum_{m=1}^{\infty} m\omega\tau \frac{B_{-m-1}^2 - B_{m-1}^2}{1 + (m\omega\tau)^2} \tag{42}$$

となる。

2.4.2 3 回対称の場合

式 (26) からわかるように、 \mathcal{E} が k_z 軸の回りの 3 回対称である場合、 n が 3 の倍数以外 $\mathcal{E}_n = 0$ である。式 (30), (31) から、 g および g' は $n+1$ が 3 の倍数プラス 1 の時のみ 0 でない。したがって、式 (30), (34) から、 B_n は n が 3 の倍数の時のみ 0 でない。したがって、 B_n は \mathcal{E}_n と連動して 0 になる。

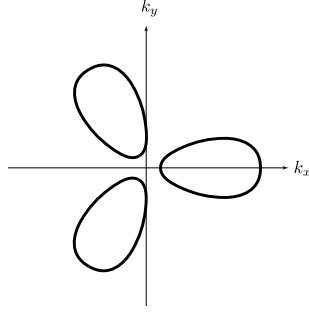


図 1: 2 回対称の hodograph が 3 回対称位置に配置されている場合

式 (23) において, B_{m-1} あるいは B_{-m-1} が 0 でないのは $m-1$ あるいは $-m-1$ が 3 の倍数のとき, すなわち, $m=1, m=2, m=4, m=5, \dots$ である. したがって, 式 (36) から

$$S_{xx} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(B_{m-1} + B_{-m-1})^2}{1 + (m\omega\tau)^2} = \frac{B_0^2}{1 + (m\omega\tau)^2} + \frac{B_{-3}^2}{1 + (2\omega\tau)^2} + \frac{B_3^2}{1 + (4\omega\tau)^2} + \dots \quad (43)$$

となる. また, 式 (42) から,

$$S_{xy} = \omega\tau \frac{B_0^2}{1 + (m\omega\tau)^2} + 2\omega\tau \frac{B_{-3}^2}{1 + (2\omega\tau)^2} + 4\omega\tau \frac{-B_3^2}{1 + (4\omega\tau)^2} + \dots \quad (44)$$

となる.

また, hodograph が複数存在する場合については, それぞれの hodograph についての平均の和を取ることになる. 図は 2 回対称の hodograph であり, k_x 軸上にある hodograph は $k_x k_z$ 面対称である. 他の 2 つは個々には $k_x k_z$ 面対称ではないが, 2 個で $k_x k_z$ 面対称になっているので, 式 (42) は成り立つ. したがって,

$$S_{xx} = \frac{B_{-2}^2 - B_0^2}{1 + (m\omega\tau)^2} + \frac{B_{-3}^2 + B_1^2}{1 + (2\omega\tau)^2} + \frac{B_{-4}^2 - B_2^2}{1 + (3\omega\tau)^2} + \dots \quad (45)$$

および

$$S_{xy} = \omega\tau \frac{B_{-2}^2 - B_0^2}{1 + (m\omega\tau)^2} + 2\omega\tau \frac{B_{-3}^2 - B_1^2}{1 + (2\omega\tau)^2} + 3\omega\tau \frac{B_{-4}^2 - B_2^2}{1 + (3\omega\tau)^2} + \dots \quad (46)$$

となる.

3 cubical なバンド構造 (エネルギー面) の場合

Goldberg らは warped band のホール係数を評価するために, warped band を少し極端化して cubical なバンドを考え McClure の理論を適用している [2]. cubical なバンドで 1 つの面が z 軸と直交し bB が z 軸方向にあるとき, hodograph は図 2 のような正方形になる. \mathbf{v} はそれぞれの辺において, 図 2 のように v_x 成分のみ, あるいは v_y 成分のみとなる. それぞれは, 図 3 のような時間による周期 T の周期的変化をする. $v_x = v_y = v$

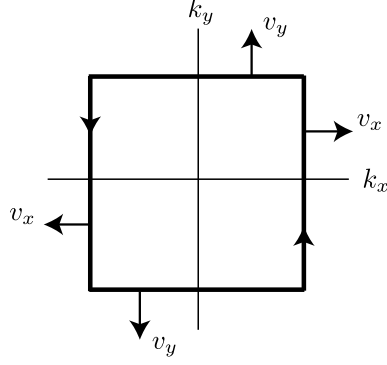


図 2: cubic なバンドの hodograph と \mathbf{v}

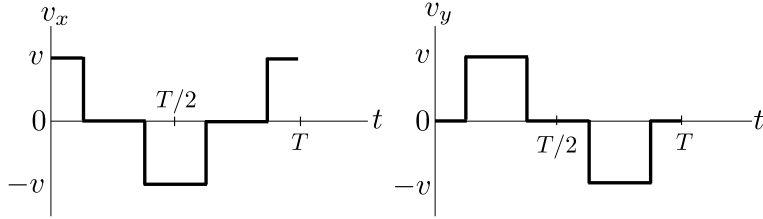


図 3: cubic なバンドの hodograph を \mathbf{k} が運動するときの v_x および v_y の時間変化

とすると、そのフーリエ級数成分は次のようになる。

$$\begin{aligned}
 v_{x,n} &= \frac{1}{T} \int_0^T v_x(t) \cos \frac{2\pi n t}{T} dt \\
 &= \frac{2v}{T} \left[\int_0^{T/8} \cos \frac{2\pi n t}{T} dt - \int_{3T/8}^{T/2} \cos \frac{2\pi n t}{T} dt \right] = \frac{v}{\pi n} \left\{ \left[\sin \frac{2\pi n t}{T} \right]_0^{T/8} - \left[\sin \frac{2\pi n t}{T} \right]_{3T/8}^{T/2} \right\} \\
 &= \frac{v}{\pi n} \left[\sin \frac{\pi n}{4} - \sin \left(\pi n - \frac{2\pi n}{4} \right) \right] = \begin{cases} 0 & (\text{n even}) \\ \frac{2v}{\pi n} \sin \frac{\pi n}{4} & (\text{n odd}) \end{cases} \quad (47)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 v_{y,n} &= \frac{i}{T} \int_0^T v_y(t) \sin \frac{2\pi n t}{T} dt \\
 &= \frac{2iv}{T} \int_{T/8}^{3T/8} \sin \frac{2\pi n t}{T} dt = \frac{iv}{\pi n} \left[-\cos \frac{2\pi n t}{T} \right]_{T/8}^{3T/8} = \frac{iv}{\pi n} \left[-\cos \left(n\pi - \frac{2\pi n}{4} \right) + \cos \frac{\pi n}{4} \right] \\
 &= \begin{cases} 0 & (\text{n even}) \\ \frac{2iv}{\pi n} \cos \frac{\pi n}{4} & (\text{n odd}) \end{cases} \quad (48)
 \end{aligned}$$

式 (47) と (48) から、 $v_{x,n}$ は n について偶、 $v_{y,n}$ は奇であることがわかる。これに注意すると、式 (24) の中括弧の中で第 2 項は 0 になり、第 1 項が残る。第 1 項で、

$$v_{x,n}v_{y,-n} - v_{x,-n}v_{y,n} = 2v_{x,n}v_{y,n} = \frac{8iv^2}{(n\pi)^2} \sin \frac{n\pi}{4} \cos \frac{n\pi}{4} = i \left(\frac{2v}{n\pi} \right)^2 \sin \frac{n\pi}{2}$$

となり, $n = 2m + 1$ とすると,

$$v_{x,m}v_{y,m} = \frac{i}{2} \left(\frac{2v}{n\pi} \right)^2 (-1)^m \quad (m = 0, 1, 2, \dots) \quad (49)$$

となる. 電流密度 \mathbf{J} は式 (18) と (20) から,

$$\mathbf{J} = -\frac{e^2}{(2\pi)^3} \int \tau \tilde{S} \mathbf{E} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} d\mathbf{k} \quad (50)$$

となり, \tilde{S} により求めることができる. \tilde{S} の成分は式 (??)-(23) より得られる. 導電率テンソル $\tilde{\sigma}$ は,

$$\tilde{\sigma} = -\frac{e^2}{(2\pi)^3} \int \tau \tilde{S} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} d\mathbf{k} \quad (51)$$

である. 成分で表すと, 式 (??), (23), (??)-(23) から,

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= -\frac{e^2}{(2\pi)^3} \int \tau \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2v_{x,m}^2}{1 + (m\omega\tau)^2} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} d\mathbf{k} \\ &= \frac{e^2}{(2\pi)^3} \int \frac{\tau}{k_B T} \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{2v}{n\pi} \right)^2 \frac{f_0}{1 + (m\omega\tau)^2} d\mathbf{k} \end{aligned} \quad (52)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} &= -\frac{e^2}{(2\pi)^3} \int \tau \sum_{m=1}^{\infty} i\omega\tau m \frac{2v_{x,m}v_{y,m}}{1 + (m\omega\tau)^2} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} d\mathbf{k} \\ &= \frac{e^2}{(2\pi)^3} \int \frac{\tau}{k_B T} \sum_{m=1}^{\infty} i\omega\tau m i \left(\frac{2v}{n\pi} \right)^2 \frac{\omega\tau}{1 + (m\omega\tau)^2} f_0 d\mathbf{k} \end{aligned} \quad (53)$$

ここで, 分布関数 f_0 による統計平均積分を次のようにとおく³.

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{\tau}{k_B T} \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{2v}{n\pi} \right)^2 \frac{f_0}{1 + (m\omega\tau)^2} d\mathbf{k} = \frac{2}{3} p \left\langle \frac{\tau}{k_B T} \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{2v}{n\pi} \right)^2 \frac{1}{1 + (m\omega\tau)^2} \right\rangle \quad (54)$$

ただし, p を正孔の濃度とし, 付加された $2/3$ は, 立方体 6 面のうち hodograph が通過する面が 4 面であることから来ている. また,

$$\mathcal{E} = \frac{1}{2} m v^2 \quad (55)$$

$$\mu_\omega = \frac{\pi \tau e}{4 m} \quad (56)$$

という関係を使うと, 式 (52) は次のようになる.

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{2}{3} \left(\frac{e^2 p}{k_B T} \right) \left\langle \tau \sum_{m=0}^{\infty} \frac{4v^2}{\pi^2 n^2 [1 + (n\omega\tau)^2]} \right\rangle \\ &= \left(\frac{64ep}{3\pi^3} \right) \left\langle \left(\frac{\mathcal{E} \mu_\omega}{k_B T} \right) \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{n^2 [1 + (n\omega\tau)^2]} \right\rangle \end{aligned} \quad (57)$$

³ A の分布関数 f_0 による平均を $\langle A \rangle$ とすると,

$$\langle A \rangle = \frac{1}{(2\pi)^3} \int A f_0 d\mathbf{k} / \frac{1}{(2\pi)^3} \int f_0 d\mathbf{k}$$

である. 一方, p を正孔濃度とすると,

$$p = \frac{1}{(2\pi)^3} \int f_0 d\mathbf{k}$$

である. したがって,

$$\frac{1}{(2\pi)^3} \int A f_0 d\mathbf{k} = p \langle A \rangle$$

となる.

同様にして,

$$\begin{aligned}\sigma_{xy} &= \frac{2}{3} \left(\frac{e^2 p}{k_B T} \right) \left\langle \tau \sum_{m=0}^{\infty} (-1)(-1)^m \frac{4v^2}{\pi^2} \frac{\omega\tau}{n^2[1+(n\omega\tau)^2]} \right\rangle \\ &= - \left(\frac{64ep}{3\pi^3} \right) \left\langle \left(\frac{\mathcal{E}\mu_\omega}{k_B T} \right) \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{\omega\tau}{n[1+(n\omega\tau)^2]} \right\rangle\end{aligned}\quad (58)$$

対象を p-Ge のような p 形半導体を考えると f_0 としてボルツマン分布を使用することができる。その時,

$$\langle \mathcal{E} \rangle = \frac{3}{2} k_B T$$

とすることができる⁴。

ここで τ がエネルギーに依存しないとする。そうすると, 式 (57) から,

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= \left(\frac{64ep}{3\pi^3} \right) \frac{\mu_\omega}{k_B T} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{n^2[1+(n\omega\tau)^2]} \langle \mathcal{E} \rangle \\ &= \frac{32ep}{\pi^3} \mu_\omega \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{n^2[1+(n\omega\tau)^2]}\end{aligned}\quad (59)$$

となる。0 磁場の場合には $\omega = 0$ であるから,

$$\sigma_{xx} = \frac{32ep}{\pi^3} \mu_\omega \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{(2m+1)^2} = \frac{32ep}{\pi^3} \mu_\omega \frac{\pi^2}{8} = \frac{4ep}{\pi} \mu_\omega \quad (60)$$

となる。ここで用いた無限級数の公式は脚注⁵ に示した。 $\sigma_{xx} = ep\mu$ とすれば,

$$\mu = \frac{4}{\pi} \mu_\omega \quad (61)$$

である。

ここで, キャリアの電荷の符号の違いがどこに現れるか考えてみよう。これまでは電子としての計算である。電子と正孔の違いは次の点に現れる。電子から正孔に変換するには次のようにすれば良い。まず, (1) 電荷の符号であるが, これは $e \rightarrow -e$ とすればよい。 (2) 分布関数が正孔に対する場合の分布関数にするなら, 式はそのままよい。 (3) 上の場合は正孔のエネルギーは $\mathcal{E} > 0$ である。 (4) 上の条件下では $\partial\mathcal{E}/\partial k$ は変わらないのでそのままよい。したがって, v も同じ。 (5) ω , μ がある場合は implicit に e が含まれているので, 符号を変える。 (6) f_0 が電子の分布関数の場合には $\mathcal{E} < 0$ となり, 上の (3)(4) は符号が変わる。 f_0 はボルツマン分布関数ではなく, フェルミ・ディラック分布関数に戻って考える必要がある。

4

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{E} \rangle &= \int \mathcal{E} e^{-\mathcal{E}/k_B T} (d\mathbf{k}/4\pi^3) / \int e^{-\mathcal{E}/k_B T} (d\mathbf{k}/4\pi^3) = \int \mathcal{E}^{3/2} e^{-\mathcal{E}/k_B T} d\mathcal{E} / \int \mathcal{E}^{1/2} e^{-\mathcal{E}/k_B T} d\mathcal{E} \\ &= \Gamma(5/2)(k_B T)^{5/2} / \Gamma(3/2)(k_B T)^{3/2} = \frac{3}{2} k_B T\end{aligned}$$

⁵無限級数の和は, 岩波数学公式 II の p.41 より, 以下のとおりである。

$$\begin{aligned}\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^2} &= \frac{\pi^2}{8} \\ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^4} &= \frac{\pi^4}{96} \\ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^6} &= \frac{\pi^6}{960}\end{aligned}$$

ということで, σ_{xx} に関して含まれているのは e^2 なので符号は変わらない. 次の σ_{xy} を考えてみよう. 今度
は e , μ_ω , μ_ω があつて, e^3 が含まれているので, 符号が変わる. したがって, 正孔を考えれば次のようになる.

$$\sigma_{xy} = \frac{32ep}{\pi^3} \mu_\omega \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \frac{\omega\tau}{n[1 + (n\omega\tau)^2]} \quad (62)$$

弱磁場を考え, B の 2 次以上の項を無視すると,

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} &= \frac{32ep}{\pi^3} \mu_\omega \omega\tau \left(1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{5} - \frac{1}{7} + \frac{1}{9} - \frac{1}{11} + \dots \right) \\ &= \frac{32ep}{\pi^3} \mu_\omega \frac{\pi e B}{4m} \tau \frac{\pi}{4} = \frac{32ep}{\pi^3} \frac{\pi}{4} \mu_\omega^2 B \end{aligned} \quad (63)$$

となる⁶.

$$\rho_{yx} = \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \simeq \frac{\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2}$$

であるから, これに上の 2 式を代入すると

$$\rho_{yx} = \frac{1}{2ep} B \quad (64)$$

となる. これからホール因子は

$$r_H = \frac{1}{2} \quad (65)$$

となる. これから正孔のエネルギー面が cubical な場合, ホール因子は通常の 1 より大きい場合に比べて約半分以下になることがこの計算モデルの結論となる.

参考文献

- [1] J. W. McClure, Phys. Rev. **101**, 1642 (1956).
[2] C. Goldberg, E. N. Adams, and R. E. Davis, Phys. Rev. **105**, 865 (1957).

⁶次の無限級数の和の公式を用いた (岩波数学公式 II の p.41).

$$\sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{2m+1} 1 - \frac{1}{3} + \frac{1}{5} - \frac{1}{7} + \dots = \frac{\pi}{4}$$