平成 13 年 12 月 21 日

松村 武\*

物質の電気伝導,ホール効果,熱伝導,熱電気効果などを総称して輸送現象と呼ぶ.我々の実験室で は電気伝導とホール効果の測定を磁場中で行っているが,実験結果を解釈するうえで基本となる考え 方の導入部分を紹介する.主な部分は Ziman の教科書からの抜粋であるから,詳しくはそれを参照 していただきたい.本稿の目的は概観を述べることである.輸送現象の測定原理そのものは単純であ るが,得られたデータを具体的に何らかの物理量と直接結びつけて解釈するのは極めて困難である. 一方で,あらゆる情報を含んでいるともいえる.ミクロな物理との結びつけは個々の問題であり,専 門的な論文で扱われるものである.

## 1 Boltzman 方程式

物質中の電子は電場や磁場や温度勾配によって作用を受けている.結晶中の電子は波数 k で特徴づけられる Bloch 関数で表現され,あるエネルギー  $\varepsilon$  を持っている.つまりバンドを形成しているわけで,これが伝導電子の基底状 態である.[2]電子に対するポテンシャルが完全に周期的であれば,  $(k, \varepsilon)$ の Bloch 状態が固有状態であり,電子 は永久にこの状態にとどまる.しかし周期性が崩れるともはや  $(k, \varepsilon)$ の Bloch 状態は固有状態ではなくなる.不 純物や格子振動(フォノン),磁気モーメントやスピン波などとの相互作用がその原因である.これらによって伝 導電子は散乱される.電子が散乱されるということを量子力学的に言うと,ある状態  $(k, \varepsilon)$ から別の状態  $(k', \varepsilon')$ へ遷移するということである.上に列挙した相互作用を状態  $(k, \varepsilon)$ に対する摂動と考え,遷移確率を計算すること で電気抵抗率が得られる.

また物質中の電子は電場や磁場や温度勾配によって作用を受ける.この外場による作用と散乱の結果として,ある定常状態が達成される.その状態を表現するのには,空間の点rの近傍で,状態kにある電子の局所的な濃度を表す分布関数 $f_k(r)$ を考えるのがよい.これは熱平衡状態ではフェルミ分布関数で表される.この関数 $f_k(r)$ が時間的にどのように変化するかを調べることで $f_k(r)$ が従うべき方程式,Boltzman 方程式が導かれる.

(i) 領域 r へ入ってくる電子もあれば出てゆく電子もある.状態 k にある電子の速度を  $v_k$  とすれば,時間 t の間にこの電子は  $tv_k$  だけ移動する. Liouville の定理によれば, [3] 位相空間の中で占められる体積は不変であるから,時刻 t で r の近傍にある電子の数は,時刻 0 で  $r - tv_k$  の近傍にある電子の数に等しい. すなわち,

$$f_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r},t) = f_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}-t\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}},0) .$$
(1)

従って,拡散による分布関数の変化率は次式で与えられる.

$$\frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}}{\partial t}\Big]_{\text{diff.}} = \frac{f_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r},\Delta t) - f(\boldsymbol{r},0)}{\Delta t} \\
= \frac{f_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}-\Delta t\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}},0) - f(\boldsymbol{r},0)}{\Delta t} \\
= -\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \cdot \frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}}{\partial \boldsymbol{r}} = -\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \cdot \nabla f_{\boldsymbol{k}} .$$
(2)

(ii) 電場と磁場によって電子の k ベクトルは

$$\dot{\boldsymbol{k}} = -\frac{e}{\hbar} \left( \boldsymbol{E} + \frac{1}{c} \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{H} \right)$$
(3)

<sup>\*</sup>東北大学大学院理学研究科物理学専攻 E-mail: tmatsu@iiyo.phys.tohoku.ac.jp

の割合で時間変化する.素電荷 e は正で定義されている.この割合を k 空間の中の電子の速度とみなせば,

$$f_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r},t) = f_{\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}t}(\boldsymbol{r},0) \tag{4}$$

が成り立つ.従って分布関数は電場と磁場によって,

$$\frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}}{\partial t}\Big]_{\text{field.}} = -\dot{\boldsymbol{k}} \cdot \frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}}{\partial \boldsymbol{k}} = \frac{e}{\hbar} \left( \boldsymbol{E} + \frac{1}{c} \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{H} \right) \cdot \frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}}{\partial \boldsymbol{k}}$$
(5)

の割合で変化する.ここで $\partial/\partial k$ はk空間における勾配のことである.

(iii) 散乱の効果ははるかに複雑であるから、ここでは弾性散乱だけを考えることにする、この散乱による  $f_k$ の 変化率は次式で与えられる、

$$\frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}}{\partial t}\bigg]_{\text{scatt.}} = \int \{f_{\boldsymbol{k}'}(1-f_{\boldsymbol{k}}) - f_{\boldsymbol{k}}(1-f_{\boldsymbol{k}'})\}W_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}d\boldsymbol{k}'$$
(6)

{ } 内第2項はkからk'への散乱を表している.負符号がついているのはこの散乱により $f_k$ が減少するからである.さらにこの散乱確率は始状態kに電子が存在する確率 $f_k$ と終状態k'が空いている確率 $(1 - f_{k'})$ との積にも比例する.そしてkからk'への基本的な遷移確率 $W_{k,k'}dk'$ がそれにかかってくる.{ } 内第1項はk'からkへの散乱を表す. $W_{k,k'} = W_{k',k}$ (微視的可逆性の原理)を仮定すると上式のようになる.

Boltzman 方程式の言うところは、いかなる  $r \ge k$ においても  $f_k(r)$ の正味の変化率は 0 であるということである、すなわち、

$$\frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}}{\partial t}\Big]_{\text{scatt.}} + \frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}}{\partial t}\Big]_{\text{field.}} + \frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}}{\partial t}\Big]_{\text{diff.}} = 0$$
(7)

この状態は定常状態であって平衡状態ではないことに注意しよう.平衡状態とは外場と温度勾配がないときに実現される状態のことであり,フェルミ分布関数

$$f_{\boldsymbol{k}}^{0} = \frac{1}{\exp\{(\varepsilon_{\boldsymbol{k}} - \mu)/k_{\mathrm{B}}T\} + 1}$$
(8)

がそれにあたる.

次に,定常状態の分布は平衡状態の分布からそれほど大きくずれるものではないと考えて,

$$g_{\boldsymbol{k}} = f_{\boldsymbol{k}} - f_{\boldsymbol{k}}^0 \tag{9}$$

と書くことにする.さらに,温度が場所によって異なる場合も考慮に入れるために,各点において温度 $T(\mathbf{r})$ が定義されるとして,

$$g_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = f_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) - f_{\boldsymbol{k}}^0(T(\boldsymbol{r}))$$
(10)

と書く . *µ* は化学ポテンシャルで, これも温度の関数であるから場所に依存する . Boltzman 方程式 (7) に (2) と (5) を代入すると,

$$-\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \cdot \frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}}{\partial \boldsymbol{r}} + \frac{e}{\hbar} \left( \boldsymbol{E} + \frac{1}{c} \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{H} \right) \cdot \frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}}{\partial \boldsymbol{k}} = - \left. \frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}}{\partial t} \right]_{\text{scatt.}}, \qquad (11)$$

さらに (9) を使うと,

$$-\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \cdot \frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}^{0}}{\partial T} \nabla T + \frac{e}{\hbar} \left( \boldsymbol{E} + \frac{1}{c} \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{H} \right) \cdot \frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}^{0}}{\partial \boldsymbol{k}} = -\frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}}{\partial t} \bigg]_{\text{scatt.}} + \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \cdot \frac{\partial g_{\boldsymbol{k}}}{\partial \boldsymbol{r}} - \frac{e}{\hbar} \left( \boldsymbol{E} + \frac{1}{c} \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{H} \right) \cdot \frac{\partial g_{\boldsymbol{k}}^{0}}{\partial \boldsymbol{k}}$$

となる.(8)より,

$$\frac{\partial f_{\mathbf{k}}^{0}}{\partial T} = \frac{e^{(\varepsilon_{k}-\mu)/k_{\mathrm{B}}T}}{\{e^{(\varepsilon_{k}-\mu)/k_{\mathrm{B}}T}+1\}^{2}} \left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}-\mu}{k_{\mathrm{B}}T^{2}} + \frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}\frac{\partial\mu}{\partial T}\right) = \left(-\frac{\partial f_{\mathbf{k}}^{0}}{\partial\varepsilon_{\mathbf{k}}}\right) \left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}-\mu}{k_{\mathrm{B}}T} + \frac{\partial\mu}{\partial T}\right) \,.$$

また,

$$\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} = rac{1}{\hbar} rac{\partial arepsilon_{\boldsymbol{k}}}{\partial \boldsymbol{k}}$$

の関係を使って,

$$\frac{\partial f^0_{\boldsymbol{k}}}{\partial \boldsymbol{k}} = -\frac{e^{(\varepsilon_k - \mu)/k_{\rm B}T}}{\{e^{(\varepsilon_k - \mu)/k_{\rm B}T} + 1\}^2} \frac{1}{k_{\rm B}T} \frac{\partial \varepsilon_{\boldsymbol{k}}}{\partial \boldsymbol{k}} = \left(\frac{\partial f^0_{\boldsymbol{k}}}{\partial \varepsilon}\right) \hbar \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \; .$$

従って (12) は,

$$\left(\frac{\partial f^{0}}{\partial \varepsilon_{\boldsymbol{k}}}\right)\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}}\cdot\left\{\frac{\varepsilon_{\boldsymbol{k}}-\mu}{T}\nabla T+e\boldsymbol{E}+\nabla\mu\right\}=-\frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}}{\partial t}\Big]_{\text{scatt.}}+\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}}\cdot\frac{\partial g_{\boldsymbol{k}}}{\partial \boldsymbol{r}}-\frac{e}{\hbar c}(\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}}\times\boldsymbol{H})\cdot\frac{\partial g_{\boldsymbol{k}}}{\partial \boldsymbol{k}}$$
(12)

となる.これが線形化された Boltzman 方程式である.  $(E \cdot \partial g_k / \partial k)$ の項は省略した.これは  $E^2$ の大きさであって,オームの法則からのずれを与えるものである. (12)の左辺は電場と温度勾配,そしてエネルギーバンドの分散関係で決まるものであり,それが右辺で表されるように,分布関数の平衡分布からのずれを与えるというわけである. 何らかの具体的なモデルについてこの Boltzman 方程式を解くことで,輸送現象に関わる物理量を計算することができるが,極めて高度な理論的テクニックを要するものであるから,計算の内容については以下ではあまり深くは立ち入らないことにする.

## 2 電気伝導度

#### 2.1 伝導度テンソルの導出

無限に広がった媒質が一定の温度に保たれて,電場だけがかけられているとする.温度や分布関数の r 依存性 がなくなるので,Boltzman 方程式 (12) は次のようになる.

$$\left( -\frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}^{0}}{\partial \varepsilon_{\boldsymbol{k}}} \right) \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \cdot (-e) \boldsymbol{E} = -\frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}}{\partial t} \Big]_{\text{scatt.}}$$

$$= \int (f_{\boldsymbol{k}} - f_{\boldsymbol{k}'}) W_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} d\boldsymbol{k}'$$

$$= \int (g_{\boldsymbol{k}} - g_{\boldsymbol{k}'}) W_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} d\boldsymbol{k}'$$

$$(13)$$

ここで現象論的な仮定

$$-\frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}}{\partial t}\bigg]_{\text{scatt.}} = \frac{1}{\tau}g_{\boldsymbol{k}} \tag{14}$$

を設ける.auは緩和時間である.この式が意味するのは,電場を切った後,平衡状態からのずれ $g_{m k}$ が

$$g_{\boldsymbol{k}}(t) = g_{\boldsymbol{k}}(0)e^{-t/\tau} \tag{15}$$

に従って減衰するということである.最もらしい仮定に見えるが,これがどのような条件で成り立つものなのか については Ref. [1] を参照されたい.ここでは $\tau$  はk に依存しないと仮定したが,もちろん一般的には,k に依 存する異方的な緩和時間  $\tau_k$  を考える必要がある.

(14) を (13) に代入すると,

$$g_{\boldsymbol{k}} = \left(-\frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}^{0}}{\partial \varepsilon_{\boldsymbol{k}}}\right) \tau \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \cdot (-e)\boldsymbol{E}$$
(16)

となり,電流密度は次のように書ける.

$$j = -2 \int e \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} f_{\boldsymbol{k}} d\boldsymbol{k}$$

$$= -2 \int e \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} g_{\boldsymbol{k}} d\boldsymbol{k} \qquad \left( \int \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} f_{\boldsymbol{k}}^{0} d\boldsymbol{k} = 0 \right)$$

$$= \frac{2}{8\pi^{3}} \iint e^{2} \tau \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} (\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \cdot \boldsymbol{E}) \left( -\frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}^{0}}{\partial \varepsilon_{\boldsymbol{k}}} \right) \frac{dS}{\hbar v_{\boldsymbol{k}}} d\varepsilon_{\boldsymbol{k}} .$$
(17)

ここで第2式から第3式に移るときに k 空間の体積積分を定エネルギー面上の表面積分とエネルギー積分とに 変換した.この変換はフォノンや電子の状態密度を求めるときに出てくる方法である.[2] 金属の場合には関数  $(-\partial f_{k}^{0}/\partial \varepsilon_{k})$ はフェルミ準位のところでデルタ関数的に約 $k_{\rm B}$ の幅の鋭いピークを持つ.そこでエネルギーについて積分してしまうと、フェルミ面上の表面積分だけが残って、

$$\boldsymbol{j} = \frac{e^2 \tau}{4\pi^3 \hbar} \int \frac{\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} dS_{\mathrm{F}}}{\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}}} \cdot \boldsymbol{E}$$
(18)

となる.これを

$$\boldsymbol{j} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{E} \tag{19}$$

と比較すると,電気伝導度を表すテンソルは次のようになる.

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{e^2 \tau}{4\pi^3 \hbar} \int \frac{\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} dS_{\mathrm{F}}}{\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}}} \cdot \boldsymbol{E} .$$
<sup>(20)</sup>

ここで vv は

$$oldsymbol{vv} = \left(egin{array}{cccc} v_x v_x & v_x v_y & v_x v_z \ v_y v_x & v_y v_y & v_y v_z \ v_z v_x & v_z v_y & v_z v_z \end{array}
ight)$$

で表されるテンソルである.

結晶が立方対称性を持つときは,伝導度テンソルはスカラーで書ける. $v_x^2 = v_y^2 = v_z^2 = v^2/3$ であるから,

$$\sigma = \frac{e^2 \tau}{12\pi^3 \hbar} \int v dS_{\rm F} = \frac{e^2}{12\pi^3 \hbar} \int \Lambda dS_{\rm F}$$
<sup>(21)</sup>

と表される.ここで平均自由行程 (mean free path)

$$\Lambda = \tau v \tag{22}$$

を定義した.おおざっぱな現象論をいくつか適用したが,これが電気伝導度に対する基本的な式である. 自由電子モデルをこれに当てはめてみよう.自由電子モデルでは,フェルミ準位上の電子の速度は

$$v_{\rm F} = \frac{\hbar}{m} (3\pi^2 n)^{1/3} \tag{23}$$

で表される.n は電子密度である.また, $v_{\rm F}$  に対応するフェルミ波数は $k_{\rm F} = mv_{\rm F}/\hbar$ であるから,フェルミ面の面積は $S_{\rm F} = 4\pi k_{\rm F}^2$ である.これらを(21)に代入すると,電気伝導度

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m} \tag{24}$$

が得られる.

#### **2.2** 運動学的な議論

分布関数  $f_k$ の形を調べてみよう.  $f_k^0$ を微分すれば解るように,  $g_k$ が大きいのはフェルミ準位近傍だけである. k空間において電子が電場によって加速される側へは少数の電子が加えられ,同じ数の電子が反対側から差し引かれる.図1にその様子を示す.(9)と(16)から数学的には

$$f_{\boldsymbol{k}} = f_{\boldsymbol{k}}^{0} + \left(-\frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}^{0}}{\partial \varepsilon_{\boldsymbol{k}}}\right) \tau \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \cdot (-e)\boldsymbol{E}$$
$$= f_{\boldsymbol{k}}^{0} - \frac{\partial f_{\boldsymbol{k}}^{0}}{\partial \varepsilon_{\boldsymbol{k}}} \frac{\partial \varepsilon_{\boldsymbol{k}}}{\partial \boldsymbol{k}} \cdot \frac{(-e)\tau \boldsymbol{E}}{\hbar}$$
$$= f_{\boldsymbol{k}+e\tau\boldsymbol{E}/\hbar}^{0}$$
(25)

であるから,フェルミ面全体が k 空間の中で, eTE/h だけ変位するかのように見える.しかしそれは正しい言い方ではない.フェルミ球の内側の深いところにあるバンドの底の状態は,パウリ原理のために,電場からはほと



図 1: (a) 変位したフェルミ面. (b) 変位したフェルミ分布. Ref. [1], 図 122 より転載.電場の向きは左向きと考えればよい.

んど変化をうけない.移動先の電子状態がすでに占められているからである.あくまで,フェルミ準位近傍の電子状態の占有数が増減するのである.

とはいっても、すべての電子状態が k 空間で変位するという見方は分かり易くてよい.このようなとらえ方を 運動学の方法と呼ぶが、この考え方で少し進んでみよう.(25)から、電子状態は k 空間内で  $e\tau E$  だけ変位すると 考えられる.このとき、 $d\varepsilon_k = \hbar v_k \cdot dk$ の関係より、エネルギーは  $e\tau v_k \cdot E$  だけ増加すると考えることができる. これを古典的な考え方でいうと、電子が速度  $v_k$  で電場 E の中を平均時間  $\tau$  だけ動いたときに電子が獲得するエ ネルギーだということである、電子を古典粒子と考えると、ある不純物と衝突してから、次にまた衝突するまで の間に電場によって加速されるので、電場方向に平均移動速度  $\delta v$  が生ずる、平均時間  $\tau$  の間加速されて平均エネ ルギー $e\tau\delta v \cdot E$  を得るとすると、そのときの平均移動速度  $\delta v$  は

$$\delta \boldsymbol{v} = \frac{e\tau}{m} \boldsymbol{E} \tag{26}$$

である.電子濃度を n とすると,このときの電流密度は

$$\boldsymbol{j} = ne\delta \boldsymbol{v} = \frac{ne^2\tau}{m}\boldsymbol{E}$$
(27)

で与えられる.従って,電気伝導度は

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$$

となり,自由電子モデルに対する値(24)に一致する.

この式を見る限りでは電気伝導度は電子密度 n に比例しているので,金属の電気伝導度が高いのは伝導電子数 が多いからであるという見方をしがちであるが,その見方はあまり正しくないことは前にも述べたとおりである. やはり,電気伝導度はフェルミ準位近傍の電子だけに依存しているのであって,金属中の電子の総数とはあまり関 係がない.金属の電気伝導度が高いのは,フェルミ準位近傍の少数の電子によって運ばれる正味の電流が大きい からである,というのがより正確な言い方であろう.

運動学的な式 (2.2) は半導体の場合に適当である.この場合には n は自由なキャリアの数と考えてよい.電子やホールが電場で加速されて平均速度 v を得るとき,

$$|v| = \mu |E| \tag{28}$$

と書き, $\mu$ を易動度 (mobility) と呼ぶ. $\mu$  は電子に対してもホールに対しても正の符号と定義する.そうすると (26) と (2.2) から,

$$\mu = \frac{e\tau}{2} \tag{29}$$

$$\sigma = ne\mu \tag{30}$$



図 2: 試料と磁場方向の関係. H と書いたのは外部磁場. 試料中では磁束密度 B となる.

が得られる.電子とホールの2種類のキャリアがあるときは

$$\sigma = n_e e \mu_e + n_h e \mu_h$$

(31)

のように,それぞれが独立に電流に寄与する.

2.3 熱伝導と熱起電力

電気伝導度の導出では試料中の温度勾配を考えなかった.電子についての Boltzman 方程式 (12) には温度勾配 も含まれており,これを考慮すると伝導電子によって熱伝導と熱起電力が発生することが説明できる.詳しくは Ziman の教科書 (Ref. [1]) を参照されたい.この場合もいえることは,熱伝導や熱起電力の原因となっている電子 はフェルミ準位近傍の電子であるということである.

# 3 磁気抵抗とホール効果

## 3.1 運動方程式から伝導度テンソルを導く

運動学的な考え方で磁気抵抗(磁場中での電気抵抗)とホール効果について考えてみよう.まずは緩和時間を  $\tau$ ,平均速度を vとして,自由電子に対する運動方程式を立てる.

$$m\left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau}\right)\boldsymbol{v} = -e\left(\boldsymbol{E} + \frac{1}{c}\boldsymbol{v} \times B\right)$$
(32)

 $\boldsymbol{B}$ は試料中の磁束密度である .  $\boldsymbol{B}=(0,\ 0,\ B)$ とすると ,

$$m\left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau}\right)v_x = -e\left(E_x + \frac{B}{c}v_y\right) \tag{33}$$

$$m\left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau}\right)v_y = -e\left(E_y - \frac{B}{c}v_x\right)$$
(34)

$$m\left(\frac{d}{dt} + \frac{1}{\tau}\right)v_z = -eE_z . \tag{35}$$

ここで,

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_0 e^{-i\omega t} , \qquad \boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}_0 e^{-i\omega t}$$
(36)

とすると , それぞれ(33) , (34) , (35) より ,

$$\begin{aligned} \{(1 - i\omega\tau)^2 + \omega_c^2\tau^2\}v_x^0 &= -e\tau(1 - i\omega\tau)E_x^0/m + \omega_c e\tau^2 E_y^0/m \\ \{(1 - i\omega\tau)^2 + \omega_c^2\tau^2\}v_y^0 &= -\omega_c e\tau^2 E_x^0/m - e\tau(1 - i\omega\tau)E_y^0/m \\ m(1 - i\omega\tau)v_z^0 &= -e\tau E_z^0 \end{aligned}$$

となる.ここで

$$\omega_{\rm c} = \frac{eB}{mc} \tag{37}$$

は電子のサイクロトロン振動数である.電流密度,電子の速度,電気伝導度テンソル,そして電場との関係は

$$\begin{pmatrix} j_x \\ j_y \\ j_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -nev_x \\ -nev_y \\ -nev_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & \sigma_{xz} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & \sigma_{yz} \\ \sigma_{zx} & \sigma_{zy} & \sigma_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}$$
(38)

であるから,電気伝導度は

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{ne^2\tau}{m} \cdot \frac{(1-i\omega\tau)}{(\omega_c^2 - \omega^2)\tau^2 + 1 - 2i\omega\tau}$$
(39)

$$\sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = -\frac{ne^2\tau}{m} \cdot \frac{\omega_c\tau}{(\omega_c^2 - \omega^2)\tau^2 + 1 - 2i\omega\tau}$$
(40)

$$\sigma_{zz} = \frac{ne^2\tau}{m} \cdot \frac{1+i\omega\tau}{1+\omega^2\tau^2} \tag{41}$$

となる.

### 3.2 磁気抵抗とホール効果

 $\omega \gg \omega_c, 1/\tau$ の場合は光反射の解析などで使われる Drude モデルに相当し,プラズマ振動数  $\omega_p = 4\pi n e^2/m$ が出てきたりするが,我々がここで興味があるのは直流の  $\omega = 0$ の場合である. $\omega = 0$ のとき,電気伝導度テンソルは

$$\sigma = \frac{\sigma_0}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \begin{pmatrix} 1 & -\omega_c \tau & 0 \\ \omega_c \tau & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + \omega_c^2 \tau^2 \end{pmatrix}$$
(42)

となる.ここで

$$\sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m} \tag{43}$$

は磁場が0のときの電気伝導度である.電流をx方向に流すことにすると, $j_y = 0$ とならなければならないから, (38) と (42) より,

$$E_y = -\omega_c \tau E_x \tag{44}$$

$$j_x = \frac{\sigma_0}{1 + \omega_c^2 \tau^2} (E_x - \omega_c \tau E_y) = \sigma_0 E_x \tag{45}$$

の関係が導かれる.磁場と電流の両方に垂直な y 方向に電場が生じることがわかる.この電圧をホール (Hall) 電 圧と呼ぶ.x 方向は磁場に垂直な電流方向であり,この方向の電気抵抗の磁場中での変化率  $(\rho(H) - \rho(0))/\rho(0)$  を 横磁気抵抗というが,でてこないことがわかる.磁場と電流が平行な場合の縦磁気抵抗もでないことが  $j_z$  につい ての電気伝導度をみればすぐにわかる.磁場をかけるとローレンツ力によって電子の軌道が曲げられるので,横 磁気抵抗は正に増大しそうであるが,ホール電圧によってローレンツ力をちょうど打ち消すような逆向きの力が 加わるために,結果的に横磁気抵抗は生じなくなっているのである. $E_x/j_x$  や  $E_z/j_z$  が,それぞれ横と縦の,普 通の電気抵抗率であるのに対し,y 方向に生じるホール電圧を x 方向に流す電流で割った  $E_y/j_x$  をホール抵抗率 と呼ぶ.今の場合は

$$\frac{E_y}{j_x} = -\frac{\omega_c \tau}{\sigma_0} = -\frac{B}{nec} = R_{\rm H}B \tag{46}$$

であり,磁場に対する比例係数をホール係数という.

易動度 (mobility) $\mu$  は次のようにして求められる.電気抵抗率を $\rho$ とすると,

$$\sigma = ne\mu = 1/\rho \tag{47}$$

より,

$$\mu = \frac{1}{ne\rho} . \tag{48}$$

ホール係数が $R_{\rm H} = -1/nec$ であることから,

$$\mu = -\frac{R_{\rm H}c}{\rho} \,. \tag{49}$$

したがって,電気抵抗率とホール係数が得られれば易動度を求めることができる.

## 3.3 ホール抵抗率,ホール係数,ホール電圧,易動度の値

まず注意しておくが,本稿で扱っている式はすべて Gauss 単位系である.ところが電気抵抗やホール係数には アンペア,ボルト,オームのような SI 単位系を用いるのが普通であるので,本小節だけは SI 単位系に変換したものを用いる.

ー番単純な金属の例として,ほとんど自由電子モデルが適用できるナトリウムについて計算してみよう.Naは bcc構造で,格子定数は 4.225 Å であり,単位格子あたり 2 個の Na 原子がある.3s 電子 1 個がほとんど自由電 子として伝導電子になっているから,電子濃度は 2/(4.225 × 10<sup>-8</sup>)<sup>3</sup> = 2.652 × 10<sup>22</sup> [cm<sup>-3</sup>] である.したがって, ホール係数は

$$R_{\rm H} = -\frac{1}{ne} = -\frac{1}{(2.652 \times 10^{22}) \times (1.6 \times 10^{-19})} = -2.35 \times 10^{-4} \; [\rm{cm}^3/\rm{Coul.}]$$

である.ちなみに cgs-Gauss 単位系を用いると,

$$R_{\rm H} = -\frac{1}{nec} = -\frac{1}{(2.652 \times 10^{22}) \times (4.8 \times 10^{-10}) \times (3 \times 10^{10})} = -2.62 \times 10^{-24} \ [\rm{cm}^2 \cdot \rm{s/esu}]$$

である.

具体的な測定について考えてみよう. 図 2 において試料の z 方向の厚さを t [cm], y 方向の幅を w [cm] とする. 磁束密度 B [T] で x 方向に電流 I [A] を流したとき, y 方向にホール電圧  $V_{\rm H}$  [V] が現れたとすると,

$$E_y = \frac{V_{\rm H}}{w} \, [{\rm V/cm}] , \qquad j_x = \frac{I}{tw} \, [{\rm A/cm}^2]$$

である.したがってホール抵抗率は

$$\rho_{\rm H} \equiv \frac{E_y}{j_x} = \frac{tw}{I} \cdot \frac{V_{\rm H}}{w} = \frac{t[\rm cm] \ V_{\rm H}[\rm V]}{I[\rm A]} \ [\Omega \cdot \rm cm]$$

となり,ホール電圧は電流に比例し,試料の厚さに反比例することがわかる.次に  $R_{\rm H} = \rho_{\rm H}/B$ がホール係数であるが,この単位は  $[\frac{V.cm}{A.T}]$ であり,あまり標準的な単位ではない. $[T] = [\frac{N}{A.m}]$ ,[V] = [J/Coul.]であるから,標準的な単位  $[cm^3/Coul.]$ にするには  $\rho_{\rm H}/B$  に  $10^4$ をかけなければならない.つまり

$$R_{\rm H} = \frac{\rho_{\rm H}[\Omega \cdot \rm cm]}{B[\rm T]} \times 10^4 \; [\rm cm^3/Coul.]$$

として求められる.ホール電圧を逆算すると,

$$V_{\rm H} = \frac{R_{\rm H} [{\rm cm}^3/{\rm Coul.}] \ B[{\rm T}] \ I[{\rm A}]}{t[{\rm cm}]} \times 10^{-4} \ [{\rm V}]$$

となる.したがって,例えばNaでt = 0.1 [mm],B = 1 [T],I = 100 [mA]とすると,

$$V_{\rm H} = \frac{(-2.35 \times 10^{-4}) \times 1 \times 0.1}{0.01} \times 10^{-4} = -2.35 \times 10^{-7} \ [\rm V] = -0.235 \ [\mu \rm V]$$
  
$$\rho_{\rm H} = \frac{0.01 \times (-2.35 \times 10^{-7})}{0.1} = -2.35 \times 10^{-8} \ [\Omega \cdot \rm cm]$$

となる.ホール電圧 0.235µV というのは極めて測定が難しい小さな電圧である.100mA という電流も測定に用いる電流としては十分に大きく,上限に近い.また,0.1mm という厚さも試料整形を手で行うときの限界に近い薄さである.磁場を強くすれば何とか測定できるかというところだろうか.

問題はホール電圧を測定するための端子を手で試料に取り付ける際に,図2のように  $j_x$  と完全に垂直な方向に付けることは期待できない点にある.このために x 方向に電流を流したとき,たとえゼロ磁場であっても,ホール電圧の端子間に通常の電気抵抗の成分による電圧(オームドロップ)が必ず生じる.例えば厚さ t [cm],幅 w [cm]の試料にホール電圧端子が x 方向に l [cm] だけずれて取り付けられているとしよう.このときホール電圧端子間を結ぶ直線と電流方向とのなす角を  $90 - \theta$  とすれば,  $\tan \theta = l/w$  である.試料の電気抵抗率が  $\rho$  [ $\Omega$ ·cm] ならば,ホール電圧端子がついている区間の抵抗は  $R = \rho l/tw = (\rho/t) \tan \theta$  [ $\Omega$ ] となる.従って電流 I [A] を流したときのオームドロップは

$$V_{\rm o} = IR = \frac{\rho}{t} \cdot I \tan \theta = V_{\rm H} \cdot \frac{\rho}{\rho_{\rm H}} \cdot \tan \theta ~[V]$$

である.Naの場合で上と同じ条件で  $\theta = 1^{\circ}$ とすると, $V_{o} = 0.17 [\mu V]$ となり,ホール電圧とそれほど変わらなくなってしまう.

この電圧は磁場の向きを反転させることで原理的には消去できる.実際の実験も通常は電流反転と磁場反転を 組み合わせた合計4回の電圧測定を行うが,それで正しいデータが出てくるためには,温度などの他の条件が測 定中に全く変化しないということが必要である.測定中に温度が少し変化して電気抵抗 ρ が変化すると,磁場反 転で正しいデータを得ることはできなくなってくる.

 $V_{\rm o}$ に対して $V_{\rm H}$ の割合を大きくするためには、 $\theta$ を小さく、磁場を強く、である. $V_{\rm H}$ そのものを大きくするためには磁場を強く、試料を薄く、である.試料を薄くしても $V_{\rm o}$ と $V_{\rm H}$ の比は変わらないではないかと思うかもしれない.確かにそうだが、実験の手順としては試料整形が先でホール電圧端子の取り付けが後であるから、試料を薄くする努力をした後で $\theta$ を小さくする努力をすることになる. $\theta$ を小さくしても $V_{\rm H}$ の大きさは変わらず、 $V_{\rm o}$ が小さくなるだけであるから、やはり試料を薄くする意義は大きい.電流を増やすと $V_{\rm H}$ と $V_{\rm o}$ の両方が大きくなるが、バックグラウンドの電気ノイズに対するS/N比が上がる.ただ発熱も大きくなるので、実験者が適当な電流値を探しだす必要がある.磁場は $\rho_{\rm H}=R_{\rm H}B$ の比例関係が成り立つ限り強い方がよい.

最後に易動度 (mobility) は

$$\mu = \frac{1}{n[\text{cm}^{-3}] \ e[\text{Coul.}] \ \rho[\Omega \cdot \text{cm}]}$$
$$= -\frac{R_{\text{H}}[\text{cm}^{3}/\text{Coul.}]}{\rho[\Omega \cdot \text{cm}]} \quad [\frac{\text{cm}^{2}}{\text{Vs}}]$$

から求められる.Na は単純な金属であるから,最低温度で例えば  $ho=1~[\mu\Omega\cdot {
m cm}]$ とすると

$$\mu = \frac{2.35 \times 10^{-4}}{1 \times 10^{-6}} = 235 \ [\frac{\mathrm{cm}^2}{\mathrm{V} \cdot \mathrm{s}}]$$

となる.いろいろな半導体についてのキャリアの易動度が Ref. [2] に掲載されている.

#### 3.4 cgs-Gauss 単位系と SI 単位系の間の換算

本稿は特に記されていない限りすべて cgs-Gauss 単位系を用いている.物理の計算をするには Gauss 単位系が 最も分かり易く,筋が通っているからであるが,抵抗率などの実測値と比較するためには,SI単位系に変換する 必要がある.そこで,必要な換算係数を簡単にまとめておく.

- 電気抵抗率 cgs-Gauss 単位系では電気抵抗率の単位は [s],電気伝導度の単位は  $[s^{-1}]$ である.1 [s] は SI 単位系 では  $9 \times 10^{11}$  [ $\Omega$ ·cm] に相当する.
- 磁場 cgs-Gauss 単位系では磁場の単位は [Gauss]=[√erg/cm<sup>3</sup>] である.SI 単位系での磁場の単位は [Tesla]=[N·A<sup>-1</sup>·m<sup>-1</sup>] である.1 [G] は 10<sup>-4</sup> [T] に相当する.ちなみに Gauss 単位系では磁場と電場の単位

が同じで直接大きさの比較ができ,非常に分かり易い.磁束密度と電束密度の単位も [G] であり,感覚的に 非常に納得がいくものである.

素電荷 cgs-Gauss 単位系では  $e = 4.8 \times 10^{-10}$  [esu], SI 単位系では  $e = 1.6 \times 10^{-19}$  [Coulomb] である.

- ホール係数 cgs-Gauss 単位系ではホール係数の単位は  $[cm^2 \cdot s/esu]$  である. SI 単位系ではホール係数の単位は  $[cm^3/Coul.]$  である. 1  $[cm^2 \cdot s/esu]$  は  $9 \times 10^{19}$   $[cm^3/Coul.]$  に相当する.
- 易動度 cgs-Gauss 単位系では易動度の単位は [cm<sup>3</sup>⋅esu<sup>-1</sup>⋅s<sup>-1</sup>] である.SI 単位系では易動度の単位は [cm<sup>2</sup>⋅V<sup>-1</sup>⋅s<sup>-1</sup>] である.1 [cm<sup>3</sup>⋅esu<sup>-1</sup>⋅s<sup>-1</sup>] は 1/300 [cm<sup>2</sup>⋅V<sup>-1</sup>⋅s<sup>-1</sup>] に相当する.

### 3.5 電子とホールの2種類のキャリアがあるとき

ここまではキャリアが電子の1種類だけの場合を考えてきたが,電子とホールの2種類のキャリアがある場合 を考えよう.キャリアを特徴づけるパラメータとして今我々が用いているのは有効質量と緩和時間と電荷の符号で あるから,以下のモデルは有効質量と緩和時間が異なる2種類の電子のようなケースにも応用が可能である.

#### 3.5.1 一般的な場合

電子に対する有効質量を  $m_{\rm e}$ ,緩和時間を  $\tau_{\rm e}$ ,ホールに対する有効質量を  $m_{\rm h}$ ,緩和時間を  $\tau_{\rm h}$ とする. (42)より,電子とホールに対する電気伝導度テンソルは次のように書ける.

$$\sigma_{\rm e} = \frac{\sigma_{\rm e}^{0}}{1 + \omega_{\rm ce}^{2} \tau_{\rm e}^{2}} \begin{pmatrix} 1 & -\omega_{\rm ce} \tau_{\rm e} & 0 \\ \omega_{\rm ce} \tau_{\rm e} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + \omega_{\rm ce}^{2} \tau_{\rm e}^{2} \end{pmatrix}$$
(50)

$$\sigma_{\rm h} = \frac{\sigma_{\rm h}^0}{1 + \omega_{\rm ch}^2 \tau_{\rm h}^2} \begin{pmatrix} 1 & \omega_{\rm ch} \tau_{\rm h} & 0 \\ -\omega_{\rm ch} \tau_{\rm h} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + \omega_{\rm ch}^2 \tau_{\rm h}^2 \end{pmatrix} .$$
(51)

非対角要素の符号が電子とホールとで逆になっているのは,電荷の符号の違いによる.素電荷 e は正で定義されている.ここで次の関係が成り立っている.

$$\sigma_{\rm e}^0 = \frac{ne^2 \tau_{\rm e}}{m_{\rm e}} = ne\mu_{\rm e} , \quad \mu_{\rm e} = \frac{e\tau_{\rm e}}{m_{\rm e}} , \quad \omega_{\rm ce} = \frac{eB}{m_{\rm e}c}$$
(52)

$$\sigma_{\rm h}^0 = \frac{p e^2 \tau_{\rm h}}{m_{\rm h}} = p e \mu_{\rm h} , \quad \mu_{\rm h} = \frac{e \tau_{\rm h}}{m_{\rm h}} , \quad \omega_{\rm ch} = \frac{e B}{m_{\rm h} c}$$
(53)

 $j_y = 0$ を計算すると,

$$j_{y} = \left(\frac{\sigma_{\rm e}^{0}\omega_{\rm ce}\tau_{\rm e}}{1+\omega_{\rm ce}^{2}\tau_{\rm e}^{2}} - \frac{\sigma_{\rm h}^{0}\omega_{\rm ch}\tau_{\rm h}}{1+\omega_{\rm ch}^{2}\tau_{\rm h}^{2}}\right)E_{x} + \left(\frac{\sigma_{\rm e}^{0}}{1+\omega_{\rm ce}^{2}\tau_{\rm e}^{2}} + \frac{\sigma_{\rm h}^{0}}{1+\omega_{\rm ch}^{2}\tau_{\rm h}^{2}}\right)E_{y}$$
$$= \alpha E_{x} + \beta E_{y} \equiv 0$$
(54)

ここで第1式での  $E_x$  の係数と  $E_y$  の係数をそれぞれ  $\alpha$  と  $\beta$  とおいた.これより,

$$E_y = -\frac{\alpha}{\beta} E_x \tag{55}$$

$$j_x = \beta E_x - \alpha E_y$$
$$\alpha^2 + \beta^2$$

$$= \frac{\alpha + \beta}{\beta} E_x \tag{56}$$

$$= -\frac{\alpha^2 + \beta^2}{\alpha} E_y \tag{57}$$

が導かれるので,ホール抵抗率と x 方向の電気抵抗率はそれぞれ (57) と (56) より,

$$\rho_{\rm H} = \frac{E_y}{j_x} = -\frac{\alpha^2 + \beta^2}{\alpha} \tag{58}$$

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{\alpha^2 + \beta^2}{\beta} \tag{59}$$

となる.

### 3.5.2 $\omega_{c}\tau \ll 1$ のとき(弱磁場)

 $\alpha$  と $\beta$ において  $\omega_{c}^{2}\tau^{2}$ を無視し,濃度と易動度を用いて記述すると,

$$\alpha \simeq \frac{eB}{c}(n\mu_{\rm e}^2 - p\mu_{\rm h}^2) \tag{60}$$

$$\beta \simeq e(n\mu_{\rm e} + p\mu_{\rm h})$$
 (61)

$$\alpha^2 + \beta^2 \simeq e^2 (n\mu_{\rm e} + p\mu_{\rm h})^2 \tag{62}$$

となる.ただし $\alpha^2+\beta^2$ では $\alpha^2$ を $B^2$ がかかっているという理由で無視した.これらを(55)と(58)と(59)に代入すると,

$$E_y \simeq -\frac{B}{c} \cdot \frac{n\mu_e^2 - p\mu_h^2}{n\mu_e + p\mu_h} E_x$$
(63)

$$\rho_{\rm H} \simeq -\frac{B}{ec} \cdot \frac{n\mu_{\rm e}^2 - p\mu_{\rm h}^2}{(n\mu_{\rm e} + p\mu_{\rm h})^2} \tag{64}$$

$$\rho \simeq \frac{1}{ne\mu_{\rm e} + pe\mu_{\rm h}} \tag{65}$$

が得られる.

3.5.3  $\omega_{c} \tau \gg 1$ のとき(強磁場)

 $\alpha \ge \beta$ において分母の1を無視すると,

$$\alpha \simeq \frac{ec}{B}(n-p) \tag{66}$$

$$\beta \simeq \frac{ec}{B} \left( \frac{n}{\omega_{\rm ce} \tau_{\rm e}} + \frac{p}{\omega_{\rm ch} \tau_{\rm h}} \right) \tag{67}$$

$$\alpha^2 + \beta^2 \simeq \frac{e^2 c^2}{B^2} \left\{ \left( \frac{n}{\omega_{\rm ce} \tau_{\rm e}} + \frac{p}{\omega_{\rm ch} \tau_{\rm h}} \right)^2 + (n-p)^2 \right\}$$
(68)

となる.これらを(55)と(58)と(59)に代入すると,

$$E_y \simeq -\frac{n-p}{\left(\frac{n}{\omega_{\rm ce}\tau_{\rm e}} + \frac{p}{\omega_{\rm ch}\tau_{\rm h}}\right)} E_x \tag{69}$$

$$\rho_{\rm H} \simeq -\frac{B}{ec} \cdot \frac{n-p}{\left(\frac{n}{\omega_{\rm ce}\tau_{\rm e}} + \frac{p}{\omega_{\rm ch}\tau_{\rm h}}\right)^2 + (n-p)^2}$$
(70)

$$\rho \simeq \frac{B}{ec} \cdot \frac{\left(\frac{n}{\omega_{ce}\tau_{e}} + \frac{p}{\omega_{ch}\tau_{h}}\right)}{\left(\frac{n}{\omega_{ce}\tau_{e}} + \frac{p}{\omega_{ch}\tau_{h}}\right)^{2} + (n-p)^{2}}$$
(71)

が得られる.電子の数とホールの数が等しいときホール電圧は0になり,また横磁気抵抗は B<sup>2</sup>に比例して増大することがわかる.図3にこれらの式を用いた計算結果の例を示す.横磁気抵抗は B<sup>2</sup>で増大するが, n と p が等しくないので,強磁場の極限では飽和する.



図 3: ホール抵抗率  $\rho_{\rm H} \ \mathcal{L}x$ 方向の電気抵抗率  $\rho$ の計算結果 .  $n = 3 \times 10^{22} \ [{\rm cm}^{-3}], p = 2 \times 10^{22} \ [{\rm cm}^{-3}], \mu_{\rm e} = 500 \ [\frac{{\rm cm}^2}{{\rm V} \cdot {\rm s}}], \mu_{\rm h} = 300 \ [\frac{{\rm cm}^2}{{\rm V} \cdot {\rm s}}], t = 0.1 \ [{\rm mm}], I = 100 \ [{\rm mA}] \ \mathcal{L}$ した . 実線は (58) と (59) を用いて計算した厳密な値,破線は弱磁場の近似結果,一点鎖線は強磁場の近似結果である.

# 参考文献

- [1] J. M. Ziman: Principles of the Theory of Solids, 2nd ed., 固体物性論の基礎, 丸善.
- [2] C. Kittel: Introduction to Solid State Physics, Wiley.
- [3] 市村浩: 統計力学, 裳華房.