異方的ボルツマン-ブロッホ方程式の一般解について

2015.9.21　　鈴木　実

1　はじめに

電子のエネルギー $\mathscr{E}$ が $\mathbf{k}$ 空間で異方的な場合を考える．一様な静電場と静磁場（および温度勾配）が存在している場合でかつ緩和時間近似が成り立つ場合でも，ジョーンズ-ツェナーの方法 (Jones-Zener method) を用いれば漸近解ではあるが一般式を得ることができる．これは「固体物性と電気伝導」でも述べているが [1], ここでは演算子を導入する部分について補足する．また，電流を求める計算の場合を考えた時に，一般的な異方的エネルギーを有する場合から，対称性が少しずつ高くなって，最終的に等方的になった場合に，異方的な解が等方的なボルツマン-ブロッホ方程式の厳密解に一致するということを確認することができる．このことは少し煩瑣であって，印刷されたものはないのでこれをメモしておこう．

対称性としては，最初に $\mathscr{E}$ が k_x，k_y，k_z の偶関数であることを考える．これは反転対称性のない結晶を除けば一般的である．この仮定を考えることにより，$\mathbf{k}$ 空間における積分は積分変数 $\mathbf{k}$ に関して被積分関数が奇（odd）になれば積分値が 0 になるので式が簡単になる．

次に，立方対称性を取り入れる．これによって，積分変数を交換したときに式が不変であれば積分値が変わらないので，被積分関数の部分項の変数交換して式を整理することが可能となる．

また，異方的な場合の具体的な例として，

$$\mathscr{E} = \frac{\hbar^2}{2m_1}k_1^2 + \frac{\hbar^2}{2m_3}k_3^2 + \frac{\hbar^2}{2m_3}k_3^2 \tag{1}$$

という定エネルギー面が楕円体のエネルギーを考える．この式および以下では下付き添字 1,2,3 は x，y，z を表すことにする．添字として x，y，z を使うのはベクトル表記の場合には便利で直感的であって良いが，テンソルを使わなければいけない場合には少し不便である．もともとベクトル積を用いるようなベクトル表記が可能なのは 3 次元の場合のみであって，次元が増えればテンソルを用いなければならないし，複雑な場合の成分を考える場合にはベクトル表記は不便である．ここでは後でテンソル表記を使うので，下付き添字として x，y，z と 1,2,3 を併用する．

最後に等方的な場合になるが，定エネルギーが球形かつ k 依存性が放物形のエネルギーの場合を扱う．式 (1) で $m_1 = m_2 = m_3 = m$ の場合に相当する．

緩和時間 τ は $\mathscr{E}$ のみに依存する場合を考える．反転対称性が成り立つ場合には，$\partial\tau/\partial k_i = (\partial\tau/\partial k_i)(\mathscr{E}\tau/\mathscr{E}k_i) = (\partial\tau/\partial\mathscr{E})(\hbar^2/m)k_i$ となって奇となるから積分値が 0 になるので，定数として扱う．

2　ジョーンズ-ツェナーの方法

2.1　微分演算子 $\widetilde{\mathbf{\Psi}}$

出発点となるボルツマン-ブロッホ方程式は

$$\mathbf{P}\cdot\mathbf{v} + \frac{e}{\hbar}(\mathbf{v}\times\mathbf{B})\cdot\frac{\partial\phi}{\partial\mathbf{k}} = \frac{\phi}{\tau} \tag{2}$$

である．（ここまでの計算は例えば 2015.9.6 のエントリー参照）ただし，

$$f = f_0 - \phi\frac{\partial f_0}{\partial\mathscr{E}} \tag{3}$$

$$\mathbf{P} = -e\mathbf{E} + T\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}\frac{\mathscr{E} - \mu}{T} \tag{4}$$

である．温度が空間的に均一なら，

$$\mathbf{P} = -e\mathbf{E} \tag{5}$$

として良い．$\mathbf{v} = (1/\hbar)\partial\mathscr{E}/\partial\mathbf{k}$ として，式 (2) を少し変形すると，

$$\frac{\tau}{\hbar}\mathbf{P} \cdot \frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}} - \frac{e\tau}{\hbar^2}(\mathbf{B} \times \frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}) \cdot \frac{\partial\phi}{\partial\mathbf{k}} = \phi \tag{6}$$

となる．ここで，

$$\widetilde{\Psi} = \frac{e\tau}{\hbar^2}(\mathbf{B} \times \frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}) \cdot \frac{\partial}{\partial\mathbf{k}} \tag{7}$$

を演算子として定義する．([1] では $\widetilde{\Omega}$ とおいた.) この演算子は次のように定義してももちろん差し支えない．

$$\widetilde{\Psi} = \frac{e\tau}{\hbar^2}\mathbf{B} \cdot (\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}} \times \frac{\partial}{\partial\mathbf{k}}) \tag{8}$$

あるいは，

$$\widetilde{\Psi} = -\frac{e\tau}{\hbar^2}\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}} \cdot (\mathbf{B} \times \frac{\partial}{\partial\mathbf{k}}) \tag{9}$$

としてもよい．演算子 $\widetilde{\Psi}$ を用いると，式 (6) は次のように表される．

$$\frac{\tau}{\hbar}\mathbf{P} \cdot \frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}} - \widetilde{\Psi}\phi = \phi \tag{10}$$

これから

$$(1 + \widetilde{\Psi})\phi = \frac{\tau}{\hbar}\mathbf{P} \cdot \frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}} \tag{11}$$

となる．

ここで，演算子 $(1 + \widetilde{\Psi})^{-1}$ を考えてみよう．これを形式的に二項展開した式は次のようになる．

$$S = 1 - \widetilde{\Psi} + \widetilde{\Psi}^2 - \widetilde{\Psi}^3 + \cdots \tag{12}$$

$(1 + \widetilde{\Psi})^{-1}$ が実際に式 (12) のように掛けるか否かは S を ϕ に作用させた時に ϕ の変数の任意の値に対して収束することが確かめられればよい．S を ϕ に作用させると，

$$S\phi = \phi - \widetilde{\Psi}\phi + \widetilde{\Psi}^2\phi - \widetilde{\Psi}^3\phi + \cdots \tag{13}$$

である．これに $-\widetilde{\Psi}$ を作用させると，

$$-\widetilde{\Psi}S\phi = -\widetilde{\Psi}\phi + \widetilde{\Psi}^2\phi - \widetilde{\Psi}^3\phi + \cdots \tag{14}$$

となる．この式の両辺に ϕ を加えると右辺は S になることにより，

$$(1 + \widetilde{\Psi})S\phi = \phi \tag{15}$$

となる．つまり，この式は S が $(1 + \widetilde{\Psi})$ の逆演算子であることを示している．すなわち，

$$(1 + \widetilde{\Psi})^{-1} = 1 - \widetilde{\Psi} + \widetilde{\Psi}^2 - \widetilde{\Psi}^3 + \cdots \tag{16}$$

である．式 (13) 右辺の収束の確認には，右辺の級数を $n - 1$ 個までの有限級数として両辺に $-\widetilde{\Psi}$ を作用してから辺々差し引くことにより，

$$(1 + \widetilde{\Psi})S\phi = \phi - (-1)^n\widetilde{\Psi}^n \tag{17}$$

となるが，$n \to \infty$ で $\widetilde{\Psi}^n$ が 0 になればよい．あるいはある正の整数よりも大きい n において，

$$|\widetilde{\Psi}^{n+1}| < |\widetilde{\Psi}^n| \tag{18}$$

が成り立てば良い．

結局，収束可能な条件の下で式 (16) が成り立つので，式 (11) は次のように書くことができる．

$$\phi = \frac{1}{\hbar}(1 - \widetilde{\Psi} + \widetilde{\Psi}^2 - \widetilde{\Psi}^3 + \cdots)\tau\mathbf{P}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}} \tag{19}$$

これがジョーンズ-ツェナーの方法である．通常 $\widetilde{\Psi}^2$ の項まで考慮すれば十分である．

電場と磁場のみの場合には

$$\phi = -\frac{e}{\hbar}(1 - \widetilde{\Psi} + \widetilde{\Psi}^2 - \widetilde{\Psi}^3 + \cdots)\tau\mathbf{E}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}} \tag{20}$$

となる．この式は $\mathscr{E}$ が $\mathbf{k}$ 空間で異方的な場合にも成り立つ．式 (20) を式 (8) の $\widetilde{\Psi}$ を用いて，B の 2 次の項までベクトル表記すると次のようになる．

$$\phi = -\frac{e}{\hbar}\left[1 - \frac{e}{\hbar^2}\tau\mathbf{B}\cdot(\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}\times\frac{\partial}{\partial\mathbf{k}})\left(1 - \frac{e}{\hbar^2}\tau\mathbf{B}\cdot(\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}\times\frac{\partial}{\partial\mathbf{k}})\right)\right]\tau\mathbf{E}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}} \tag{21}$$

2.2 逐次法による解法

式 (10) を次のように漸化式に書き直す．

$$\phi_n = \frac{\tau}{\hbar}\mathbf{P}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}} - \widetilde{\Psi}\phi_{n-1} \tag{22}$$

もし，ϕ_n が収束すれば，収束値は式 (10) の解である．初期値を $\phi_0 = (\tau/\hbar)\mathbf{P}\cdot(\partial\mathscr{E}\partial\mathbf{k})$ とすると，

$$\phi_n = \frac{\tau}{\hbar}\mathbf{P}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}} - \widetilde{\Psi}\left(\frac{\tau}{\hbar}\mathbf{P}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}} - \widetilde{\Psi}\left(\frac{\tau}{\hbar}\mathbf{P}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}} - \cdots - \widetilde{\Psi}\left(\frac{\tau}{\hbar}\mathbf{P}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}\right)\right)\right) \tag{23}$$

となる．これを続ければ式 (19) が得られる．

3 輸送係数のテンソル表記とベクトル表記

式 (3) を用いて電流密度 $\mathbf{J}$ は次の式で計算できる．

$$\mathbf{J} = -\frac{e}{4\pi^3}\int \mathbf{v}f\mathrm{d}\mathbf{k} = \frac{e}{4\pi^3\hbar}\int\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}\phi\frac{\partial f_0}{\partial\mathscr{E}}\mathrm{d}\mathbf{k} \tag{24}$$

式 (20) の ϕ を代入すると，$\widetilde{\Psi}$ の 2 次の項までとって，

$$\begin{aligned}\mathbf{J} = &-\frac{e^2}{4\pi^3\hbar^2}\int\frac{\partial f_0}{\partial\mathscr{E}}\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}(1 - \widetilde{\Psi} + \widetilde{\Psi}^2)\tau\mathbf{E}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}\mathrm{d}\mathbf{k} = -\frac{e^2}{4\pi^3\hbar^2}\int\frac{\partial f_0}{\partial\mathscr{E}}\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}\\ &\times\left[\tau\mathbf{E}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar^2}\tau\mathbf{B}\cdot(\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}\times\frac{\partial}{\partial\mathbf{k}})(\tau\mathbf{E}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}) + \frac{e^2}{\hbar^4}\tau\mathbf{B}\cdot(\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}\times\frac{\partial}{\partial\mathbf{k}})[\tau\mathbf{B}\cdot(\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}\times\frac{\partial}{\partial\mathbf{k}})](\tau\mathbf{E}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}})\right]\mathrm{d}\mathbf{k}\end{aligned} \tag{25}$$

となる．この式を見れば，第 2 項以降は成分が直接見えないために計算の手順も見えにくい．ここで，Wilson[2]，Seitz[3]，あるいは Davis[4] のように演算子 $\mathbf{\Omega}$ を次のように定義すれば式の構造が少し見えやすくなる．

$$\mathbf{\Omega} = \frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}\times\frac{\partial}{\partial\mathbf{k}} \tag{26}$$

そうすると，式 (25) は次のように簡単になる．

$$\mathbf{J} = -\frac{e^2}{4\pi^3\hbar^2}\int\frac{\partial f_0}{\partial\mathscr{E}}\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}\left[\tau\mathbf{E}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar^2}\tau\mathbf{B}\cdot\mathbf{\Omega}(\tau\mathbf{E}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}) + \frac{e^2}{\hbar^4}\tau\mathbf{B}\cdot\mathbf{\Omega}[\tau\mathbf{B}\cdot\mathbf{\Omega}(\tau\mathbf{E}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}})]\right]\mathrm{d}\mathbf{k} \tag{27}$$

一方，このような場合にはテンソルで表記すれば簡潔になると同時に成分による計算の過程がわかりやすくなる．まず全体を

$$J_i = \sigma_{ik}E_k + \sigma_{ikl}E_kB_l + \sigma_{iklm}E_kB_lB_m \tag{28}$$

とすることができて，それぞれの係数は

$$\sigma_{ik} = -\frac{e^2}{4\pi^3\hbar^2}\int \tau\frac{\partial f_0}{\partial \mathscr{E}}\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial k_i}\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial k_k}\mathrm{d}\mathbf{k} \tag{29}$$

$$\sigma_{ikl} = \frac{e^3}{4\pi^3\hbar^4}\int \tau\frac{\partial f_0}{\partial \mathscr{E}}\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial k_i}\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial k_r}\frac{\partial}{\partial k_s}(\tau\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial k_k})\epsilon_{lrs}\mathrm{d}\mathbf{k} \tag{30}$$

$$\sigma_{iklm} = -\frac{e^4}{4\pi^3\hbar^6}\int \tau\frac{\partial f_0}{\partial \mathscr{E}}\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial k_i}\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial k_r}\frac{\partial}{\partial k_s}\left[\tau\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial k_t}\frac{\partial}{\partial k_u}(\tau\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial k_k})\right]\epsilon_{mtu}\epsilon_{lrs}\mathrm{d}\mathbf{k} \tag{31}$$

となる．ここで，ϵ_{mtu} と ϵ_{lrs} は交代演算子であり，123 と偶置換の場合は 1，奇置換の場合は -1，それ以外は 0 である．また，添字にはアインシュタインの縮約が使われる．

式 (25) で磁場に依存しない項を $\mathbf{J}_0$ とすると，

$$\mathbf{J}_0 = -\frac{e^2}{4\pi^3\hbar^2}\int \frac{\partial f_0}{\partial \mathscr{E}}\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial \mathbf{k}}\tau\mathbf{E}\cdot\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial \mathbf{k}}\mathrm{d}\mathbf{k} \tag{32}$$

となる．これから磁場のないときの導電率テンソル $\widetilde{\sigma}_0$ は dyad を使って次のようにベクトル表記することができる．

$$\widetilde{\sigma}_0 = -\frac{e^2}{4\pi^3\hbar^2}\int \tau\frac{\partial f_0}{\partial \mathscr{E}}\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial \mathbf{k}}\circ\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial \mathbf{k}}\mathrm{d}\mathbf{k} \tag{33}$$

3.1 反転対称性，立方対称性，ゼロ磁場導電率

反転対称性がある場合，k_i による微分は奇関数となるので，いずれかの k_i に関してそのような関数が奇数個存在すれば parity が奇 (odd) となって積分して 0 になる．したがって反転対称性がある場合，ゼロ磁場導電率の式 (33) は $i=k$ の時のみ 0 でない．すなわち，

$$\sigma_{0i} = -\frac{e^2}{4\pi^3\hbar^2}\int \tau\frac{\partial f_0}{\partial \mathscr{E}}\left(\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial k_i}\right)^2\mathrm{d}\mathbf{k} \tag{34}$$

となる．

立方対称性がある場合，式 (34) で積分変数 k_i のうちの 2 個を交換しても積分値は変わらない．したがって，式 (34) は全ての i について等しく，これを σ_0 とおけば

$$\mathbf{J}_0 = \sigma_0\mathbf{E} \tag{35}$$

$$\sigma_0 = -\frac{e^2}{4\pi^3\hbar^2}\int \tau\frac{\partial f_0}{\partial \mathscr{E}}\left(\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial k_i}\right)^2\mathrm{d}\mathbf{k} \tag{36}$$

となる．

4 ホール導電率

式 (25) からホール導電率の部分 $\mathbf{J}_1$ を抜き出してベクトル表示で表せば，

$$\mathbf{J}_1 = \frac{e^3}{4\pi^3\hbar^4}\int \frac{\partial f_0}{\partial \mathscr{E}}\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial \mathbf{k}}\tau\mathbf{B}\cdot\mathbf{\Omega}(\tau\mathbf{E}\cdot\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial \mathbf{k}})\mathrm{d}\mathbf{k} \tag{37}$$

となる．成分毎の計算をする場合には，式 (30) を用いても式 (37) を用いても同じであり，好きな表現を用いれば良い．

ここでは式 (30) から，定数を除き，被積分項のみを取り出して考えよう．ここでも反転対称性があるとする．ホール導電率に関係する σ_{ikl} や磁気抵抗に関係する σ_{iklm} はすべての k_i に関して $\partial/\partial k_i$ が偶数個ある場合 (parity が偶) のみ 0 でない．

以上のことを念頭に置き，$\sigma_{ikl}E_kB_l$ の x 成分 $(i=1)$ を被積分関数の部分のみ書き下すと次のようになる．

$$\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\left[B_1\left(\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_2}\frac{\partial}{\partial k_3}-\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_3}\frac{\partial}{\partial k_2}\right)+B_2\left(\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_3}\frac{\partial}{\partial k_1}-\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\frac{\partial}{\partial k_3}\right)+B_3\left(\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\frac{\partial}{\partial k_2}-\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_2}\frac{\partial}{\partial k_1}\right)\right] \times\left(E_1\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}+E_2\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_2}+E_3\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_3}\right) \tag{38}$$

ここで展開した時に parity が奇になって 0 になるものを除くと次の項が残る．

$$\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\left[B_2\left(\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_3}\frac{\partial}{\partial k_1}-\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\frac{\partial}{\partial k_3}\right)E_3\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_3}+B_3\left(\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\frac{\partial}{\partial k_2}-\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_2}\frac{\partial}{\partial k_1}\right)E_2\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_2}\right] \tag{39}$$

他の成分についても同様の計算で求めることができる．結果は，添字 1, 2, 3 を cyclic に巡回置換した場合と同じである．

4.1 立方対称の場合

ここで，立方対称性を考えよう．座標軸が立方対称の主軸を向いているとして，そうすると，2 つの k_i を交換しても積分値は変わらないから，式 (39) の大括弧の第 1 項で，添字 2 と 3 を交換すると，積分は

$$-\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\left[\left(\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\frac{\partial}{\partial k_2}-\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_2}\frac{\partial}{\partial k_1}\right)\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_2}\right](B_2E_3-B_3E_2) \tag{40}$$

と等しくなる．他の成分についても同様であるから（123 を cyclic に巡回置換する），それぞれ次のようになる．

$$-\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_2}\left[\left(\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_2}\frac{\partial}{\partial k_3}-\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_3}\frac{\partial}{\partial k_2}\right)\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_3}\right](B_3E_1-B_1E_3) \tag{41}$$

$$-\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_3}\left[\left(\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_3}\frac{\partial}{\partial k_1}-\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\frac{\partial}{\partial k_3}\right)\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\right](B_1E_2-B_2E_1) \tag{42}$$

式 (40) から式 (42) で $(B_iE_j-B_jE_i)$ の係数の部分の被積分部分は，123 を cyclic に置換すると同じになることからわかるように，3 つの式係数は積分してお互いに等しい．したがって，式 (40) の全ての成分に関して等しく，$(B_2E_3-B_3E_2)$ の係数を α とすると，

$$\mathbf{J}_1 = \alpha(\mathbf{B}\times\mathbf{E}) \tag{43}$$

$$\alpha = -\frac{e^3}{4\pi^3\hbar^4}\int\frac{\partial f_0}{\partial\mathscr{E}}\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\tau\Omega_3(\tau\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_2})\mathrm{d}\mathbf{k} \tag{44}$$

となる．

4.2 楕円体形エネルギーの場合

立方対称ではないが，式 (1) のようなエネルギー構造の場合，立方対称性が成り立たない式 (39) に式 (1) を代入して，

$$\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\left[-B_2E_3\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\frac{\partial^2\mathscr{E}}{\partial k_3^2}+B_3E_2\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\frac{\partial^2\mathscr{E}}{\partial k_2^2}\right]=-\hbar^2\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\left[(B_2E_3\frac{1}{m_3}-B_3E_2\frac{1}{m_2})\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\right] \tag{45}$$

となる．他の成分についても同様にすれば次式が得られる．(添字 123 を cyclic に変えれば良い．)

$$-\hbar^2\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_2}\left[(B_3E_1\frac{1}{m_1}-B_1E_3\frac{1}{m_3})\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_2}\right] \tag{46}$$

$$-\hbar^2\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_3}\left[(B_1E_2\frac{1}{m_2}-B_2E_1\frac{1}{m_1})\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_3}\right] \tag{47}$$

となる．立方対称性がある場合，$m_1 = m_2 = m_3 = m$ で，かつ $\int(\partial\mathscr{E}/\partial k_1)^2\mathrm{d}\mathbf{k} = \int(\partial\mathscr{E}/\partial k_2)^2\mathrm{d}\mathbf{k} = \int(\partial\mathscr{E}/\partial k_3)^2\mathrm{d}\mathbf{k}$，$\int k_1^2\mathrm{d}\mathbf{k} = \int \quad k_2^2\mathrm{d}\mathbf{k} = \int k_3^2\mathrm{d}\mathbf{k}$ であるから，被積分関数は次のようにベクトル表記することができる．

$$-\frac{\hbar^2}{m}\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\left[(\mathbf{B}\times\mathbf{E})\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\right] = -\frac{\hbar^6}{m^3}k_1\left[(\mathbf{B}\times\mathbf{E})k_1\right] \tag{48}$$

ただし，式 (1) において $m_1 = m_2 = m_3 = m$ であれば球対称であるから，等方的な場合に相当する．つまり，等方的な場合には式 (48) のようなベクトル表記が可能である．ホール電流部分を $\sigma_1(\mathbf{B}\times\mathbf{E})$ と表すとホール導電率 σ_1 は次のようになる．

$$\sigma_1 = -\frac{e^3\hbar^2}{4\pi^3m^3}\int\tau^2k_1^2\frac{\partial f_0}{\partial\mathscr{E}}\mathrm{d}\mathbf{k} \tag{49}$$

となる．

$\widetilde{\Psi}$ に式 (9) を用いた場合，式 (23) よりホール導電率の部分は次のように表すことができる．

$$\mathbf{J}_1 = -\frac{e^3}{4\pi^3\hbar^4}\int\tau\frac{\partial f_0}{\partial\mathscr{E}}\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}\cdot(\mathbf{B}\times\frac{\partial}{\partial\mathbf{k}})(\tau\mathbf{E}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}})\mathrm{d}\mathbf{k} \tag{50}$$

ここで等方的な $\mathscr{E}$，すなわち式 (1) と $m_1 = m_2 = m_3 = m$ を仮定すると，$\partial\mathscr{E}/\partial\mathbf{k}$ は $(\hbar^2/m)\mathbf{k}$ に置き換わることがすぐわかるので，

$$\mathbf{J}_1 = -\frac{e^3}{4\pi^3m^2}\int\tau^2\frac{\partial f_0}{\partial\mathscr{E}}\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{B}\times\mathbf{E})\mathrm{d}\mathbf{k} \tag{51}$$

となり同じ結果が得られる．

5 磁気導電率

異方的な場合の磁気導電率は式 (31) で与えられる．あるいはベクトル表記の場合，$\mathbf{\Omega}$ を用いて式 (25) から該当する部分 $\mathbf{J}_2$ を抜き出せば，

$$\mathbf{J}_2 = \frac{e^4}{4\pi^3\hbar^6}\int\frac{\partial f_0}{\partial\mathscr{E}}\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}}\left[\tau\mathbf{B}\cdot\mathbf{\Omega}[\tau\mathbf{B}\cdot\mathbf{\Omega}(\tau\mathbf{E}\cdot\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial\mathbf{k}})]\right]\mathrm{d}\mathbf{k} \tag{52}$$

となる．簡単のために，$\partial\mathscr{E}/\partial k_i = \partial_i$ と略記し，かつ，係数と τ および $\partial f_0/\partial\mathscr{E}$ を除いた被積分項の x 成分のみを書き下すと，

$$\partial_1(B_1\Omega_1+B_2\Omega_2+B_3\Omega_3)(B_1\Omega_1+B_2\Omega_2+B_3\Omega_3)(E_1\partial_1+E_2\partial_2+E_3\partial_3) \tag{53}$$

となる．ここで，反転対称性が成り立つとすると，式 (48) で parity が奇の項は積分して 0 になるので，偶の項だけを考えれば良い．Ω_i が式 (53) の各成分で表されることに注意して，k_i の各変数に関して上の式で parity が偶の項は

$$\begin{aligned}&\partial_1(B_1^2\Omega_1^2E_1\partial_1+B_1B_2\Omega_1\Omega_2E_2\partial_2+B_1B_3\Omega_1\Omega_3E_3\partial_3)\\&\qquad+\partial_1(B_2B_1\Omega_2\Omega_1E_2\partial_2+B_2^2\Omega_2^2E_1\partial_1)+\partial_1(B_3B_1\Omega_3\Omega_1E_3\partial_3+B_3^2\Omega_3^2E_1\partial_1)\end{aligned} \tag{54}$$

となることがわかる．テンソル形式を用いても同じ結果が得られる．これを整理すると次の 5 項のみが 0 でないことがわかる．

$$\begin{aligned}&\partial_1\Omega_1^2\partial_1 B_1^2 E_1+\partial_1\Omega_2^2\partial_1 B_2^2 E_1+\partial_1\Omega_3^2\partial_1 B_3^2 E_1\\&\qquad+\partial_1(\Omega_1\Omega_2\partial_2+\Omega_2\Omega_1\partial_2)B_1B_2E_2+\partial_1(\Omega_1\Omega_3\partial_3+\Omega_3\Omega_1\partial_3)B_1B_3E_3\end{aligned} \tag{55}$$

y 成分と z についても同様で，添字の 1, 2, 3 を cyclic に循環させて得られる．これは直接 parity を調べて確認することができる．

5.1 立方対称の場合

立方対称の場合，2 つの変数を置換しても積分値は変わらない．したがって，式 (55) の第 2 項 $B_2^2E_1$ の係数と第 3 項 $B_3^2E_1$ の係数とは積分の後等しくなる．一方，第 1 項の係数とは等しくならない．同様に，第 4 項 $B_1B_2E_2$ の係数と第 5 項 $B_1B_3E_3$ の係数とは積分の後等しくなる．そうすると式 (55) は次のように整理される．

$$(\partial_1\Omega_1^2\partial_1)B_1^2E_1+(\partial_1\Omega_3^2\partial_1)(B_2^2+B_3^2)E_1+(\partial_1[\Omega_1\Omega_2+\Omega_2\Omega_1]\partial_2)B_1(B_2E_2+B_3E_3) \tag{56}$$

もう少し整理すると，

$$\begin{aligned}&(\partial_1\Omega_1^2\partial_1)B_1^2E_1+(\partial_1\Omega_3^2\partial_1)\mathbf{B}^2E_1-(\partial_1\Omega_3^2\partial_1)B_1^2E_1+(\partial_1[\Omega_1\Omega_2+\Omega_2\Omega_1]\partial_2)B_1(\mathbf{B}\cdot\mathbf{E})\\&\qquad-(\partial_1[\Omega_1\Omega_2+\Omega_2\Omega_1]\partial_2)B_1^2E_1\end{aligned} \tag{57}$$

となる．y 成分，z 成分も添字を cyclic に循環して得られ，したがって，それぞれの係数は積分して等しい．

式 (57) を次のようなベクトル表記で表すことを考えよう．

$$\mathbf{J}_2=\beta\mathbf{B}^2\mathbf{E}+\gamma\mathbf{B}(\mathbf{B}\cdot\mathbf{E})+\delta\widetilde{H}\mathbf{E} \tag{58}$$

ただし，

$$\widetilde{H}=\begin{pmatrix}B_1^2&0&0\\0&B_2^2&0\\0&0&B_3^2\end{pmatrix} \tag{59}$$

である．式 (57) はこの式の x 成分であるから，その係数 β，γ，δ は式 (57) と比較することにより，次のように表すことができる．[1]

$$\beta=\frac{e^4}{4\pi^3\hbar^6}\int\frac{\partial f_0}{\partial\mathscr{E}}\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\tau\Omega_3[\tau\Omega_3(\tau\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1})]\mathrm{d}\mathbf{k} \tag{60}$$

$$\gamma=\frac{e^4}{4\pi^3\hbar^6}\int\frac{\partial f_0}{\partial\mathscr{E}}\left[\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\tau\Omega_1[\tau\Omega_2(\tau\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_2})]+\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\tau\Omega_2[\tau\Omega_1(\tau\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_2})]\right]\mathrm{d}\mathbf{k} \tag{61}$$

$$\beta+\gamma+\delta=\frac{e^4}{4\pi^3\hbar^6}\int\frac{\partial f_0}{\partial\mathscr{E}}\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\tau\Omega_1[\tau\Omega_1(\tau\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1})]\mathrm{d}\mathbf{k} \tag{62}$$

ここで，$\mathbf{J}=\mathbf{J}_0+\mathbf{J}_1+\mathbf{J}_2$ であるから，全部をまとめると，立方対称性が成り立つ場合は，次のように表すことができることがわかる．

$$\mathbf{J}=\sigma_0\mathbf{E}+\alpha\mathbf{B}\times\mathbf{E}+\beta\mathbf{B}^2\mathbf{E}+\gamma\mathbf{B}(\mathbf{B}\cdot\mathbf{E})+\delta\widetilde{H}\mathbf{E} \tag{63}$$

係数の σ_0，α，β，γ，δ はそれぞれ式 (36)，式 (44)，式 (60)，式 (61)，式 (62) で与えられる．

等方的で $\mathscr{E}$ が放物的な自由電子の場合，式 (56) の第 1 項は 0 になる．これは電流方向の磁場成分の磁気抵抗がないことを意味するから，自由電子の場合には縦磁気抵抗がないことを示す．逆に，エネルギー $\mathscr{E}$ に異方性があれば縦磁気抵抗効果が現れる．

[1] 式 (61) に対応する Wilson[2] の式 (8.551.9)(p.226) の添字は一部誤りがある．また，p.225 には $(H_x,0,H_z)$ とあるが，(H_x,H_y,H_z) の誤りである．

5.2　楕円体形エネルギーの場合

磁場の 2 乗に比例する磁気導電率は σ_{iklm} に現れる．式 (1) を仮定すると，(i) 各 k_i について $\partial/\partial k_i$ が偶数個ある場合のみ 0 でない，(ii) $i \neq j$ のとき，$\partial\mathscr{E}^2/\partial k_i\partial k_j = 0$，(iii) $\partial\mathscr{E}^2/\partial k_i^2 = \hbar^2/m_i$ が成り立つ．これから，0 にならない $\sigma_{iklm}E_kB_lB_m$ の E_1 を含む項 $(k=1)$ を $\partial\mathscr{E}/\partial k_1$ を除いて表してみる．手順としては次のようになる．最初に $k=1$ を固定すると，$u=1$ 以外は 0 となる．そうするとと，$l=2, t=3$ または $l=3, t=2$ 以外は 0 となる．$t=3$ の場合は $s=3$ 以外は 0 になる．以下同様に繰り返せば 0 とならない項が以下のように残る．$\partial\mathscr{E}/\partial k_i \equiv \partial_i$ と略記する．

$$(-\partial_1 B_2^2 + \partial_2 B_1 B_2)\frac{\hbar^4}{m_3 m_1}E_1 + (-\partial_1 B_3^2 + \partial_3 B_1 B_3)\frac{\hbar^4}{m_2 m_1}E_1 \tag{64}$$

同様に E_2 を含む項 $(k=2)$ と E_3 を含む項 $(k=3)$ はそれぞれ

$$(\partial_1 B_2 B_1 - \partial_2 B_1^2)\frac{\hbar^4}{m_3 m_2}E_2 + (-\partial_2 B_3^2 + \partial_3 B_2 B_3)\frac{\hbar^4}{m_1 m_2}E_2 \tag{65}$$

$$(\partial_1 B_3 B_1 - \partial_3 B_1^2)\frac{\hbar^4}{m_2 m_3}E_3 + (\partial_2 B_3 B_2 - \partial_3 B_2^2)\frac{\hbar^4}{m_1 m_3}E_3 \tag{66}$$

となる．

x 成分の場合 $(i=1)$，これに ∂_1 が掛けられて積分される．そのとき式 (64)，(65)，(66) に ∂_1 を掛けた後で 0 にならないで残る項は

$$-\partial_1^2 B_2^2\frac{\hbar^4}{m_3 m_1}E_1 - \partial_1^2 B_3^2\frac{\hbar^4}{m_2 m_1}E_1 + \partial_1^2 B_2 B_1\frac{\hbar^4}{m_3 m_2}E_2 + \partial_1^2 B_3 B_1\frac{\hbar^4}{m_2 m_3}E_3 \tag{67}$$

である．これを整理すると，

$$\frac{\hbar^4\partial_1^2}{m_1 m_2 m_3}[m_1 B_1(E_2 B_2 + E_3 B_3) - E_1(m_2 B_2^2 + m_3 B_3^2)] \tag{68}$$

となる．これはまた

$$\frac{\hbar^4\partial_1^2}{m_1 m_2 m_3}[m_1 B_1(\mathbf{E}\cdot\mathbf{B}) - E_1(m_1^2 B_1^2 + m_2 B_2^2 + m_3 B_3^2)] \tag{69}$$

と書くことができる．

y 成分，z 成分に関しても同様に得ることができる．この結果は添字 1,2,3 を cyclic に巡回置換することによっても得られ，それぞれ

$$\frac{\hbar^4\partial_2^2}{m_1 m_2 m_3}[m_2 B_2(\mathbf{E}\cdot\mathbf{B}) - E_2(m_1 B_1^2 + m_2 B_2^2 + m_3 B_3^2)] \tag{70}$$

$$\frac{\hbar^4\partial_3^2}{m_1 m_2 m_3}[m_3 B_3(\mathbf{E}\cdot\mathbf{B}) - E_3(m_1 B_1^2 + m_2 B_2^2 + m_3 B_3^2)] \tag{71}$$

となる．ここで，

$$\widetilde{M} = \begin{pmatrix} m_1 & 0 & 0 \\ 0 & m_2 & 0 \\ 0 & 0 & m_3 \end{pmatrix}, \quad \widetilde{M}^{-1} = \begin{pmatrix} m_1^{-1} & 0 & 0 \\ 0 & m_2^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & m_3^{-1} \end{pmatrix} \tag{72}$$

とおくと，

$$\mathbf{J}_2 = \frac{e^4\hbar^2}{4\pi^3 m_1 m_2 m_3}\int \tau^3\frac{\partial f_0}{\partial\mathscr{E}}k_1^2 \mathrm{d}\mathbf{k}\left(\widetilde{M}^{-1}\right)^2\left[\widetilde{M}\mathbf{B}(\mathbf{B}\cdot\mathbf{E}) - (\mathbf{B}\cdot\widetilde{M}\mathbf{B})\mathbf{E}\right] \tag{73}$$

とベクトル表示できる．

この結果から，楕円体形のエネルギー面の場合，電流が主軸方向（x，y，z 軸方向）にあるとき，電流に平行な磁場成分による縦磁気抵抗効果は現れないことがわかる．

電流が主軸方向ではない場合，式 (73) には B^2 に比例する負の電流密度が生じ，正の縦磁気抵抗効果が出現する．磁気抵抗効果は電流と磁場の方向に依存し，有効質量の差によって顕著な異方性を示す．

5.3　放物形エネルギーの場合

$m_1 = m_2 = m_3 = m$ の場合，すなわち自由電子のような放物形のエネルギーを有する場合，式 (64)，(65)，(66) の和は整理すると以下のようになる．

$$\frac{\hbar^4}{m^2}[(E_1B_1 + E_2B_2 + E_3B_3)(B_1\partial_1 + B_2\partial_2 + B_3\partial_3)] - (B_1^2 + B_2^2 + B_3^2)(E_1\partial_1 + E_2\partial_2 + E_3\partial_3) \tag{74}$$

この式は y 成分 $(i = 2)$ と z 成分 $(i = 3)$ に関しても同じである．

x 成分について ∂_1 を掛けてから，積分して 0 にならない項は次のようになる．

$$\frac{\hbar^4}{m^2}\partial_1^2[(E_1B_1 + E_2B_2 + E_3B_3)B_1 - (B_1^2 + B_2^2 + B_3^2)E_1] \tag{75}$$

となり，式 (69) で $m_1 = m_2 = m_3 = m$ とした場合と一致する．y 成分と z 成分を含めてベクトル表示すれば

$$\frac{\hbar^4}{m^2}\left(\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_1}\right)^2\left[\mathbf{B}(\mathbf{B}\cdot\mathbf{E}) - \mathbf{B}^2\mathbf{E}\right] \tag{76}$$

となる．すなわち，

$$\mathbf{J}_2 = \frac{e^4\hbar^2}{4\pi^3m^4}\int\tau^3\frac{\partial f_0}{\partial\mathscr{E}}k_1^2\mathrm{d}\mathbf{k}\ \left[\mathbf{B}(\mathbf{B}\cdot\mathbf{E}) - \mathbf{B}^2\mathbf{E}\right] \tag{77}$$

である．

放物形エネルギーの場合，式 (77) は 0 となり，縦磁気抵抗効果は見られない．

また，式 (60)–(63) には

$$\beta = -\gamma, \quad \delta = 0 \tag{78}$$

という関係が加わる．

等方的な場合の一般解として与えられる ϕ には式 (77) の大括弧内第 2 項が現れていないように見える．これは全体の係数として $(1 + \mu^2B^2)$ が付してあるためで，これを展開して B^2 のオーダーの項を比較すれば同じ式になることがわかる．

参考文献

[1] 「固体物性と電気伝導」森北出版，(2014).

[2] A. H. Wilson, *The Theory of Metals*, Cambridge University Press (1965).

[3] F. Seitz, Phys. Rev. **79**, 372 (1950).

[4] L. Davis, Jr., Phys. Rev. **56**, 93 (1939).