

立方対称エネルギー帯の場合のホール係数 (p-Ge や p-Si の場合)

2015.11.11 鈴木 実

1 はじめに

電子が放物的な球対称エネルギー帯を有する場合、衝突時間 τ がエネルギーの中乗なら導電率とホール係数は解析的に求めることができる。エネルギーが異方的になればこれらの輸送特性は解析的にはもはや求めることはできず、数値的に計算する必要がある。ただし、エネルギー帯の立方対称性が満たされていて、エネルギーが波数ベクトルの関数として表現される場合には、導電率とホール係数の計算式が得られ、立方対称性を示す異方的エネルギーの数値的モデルのパラメータ (A, B, C) を決めれば簡単に導電率やホール係数を求めることができる。この計算式は Lax と Madroides [1] によって求められたが、途中の計算はほとんど示されず、結果だけが与えられている。その計算をフォローしたところ、かなりの計算量が必要であることがわかり、確かに途中の計算を論文に載せることは難しいことであろうと思われた。ここでは、その具体的な計算がどのようなものであったのかをメモしておこう。また、この論文の計算をフォローすることでしかわからないようないくつかのミスプリントが見つかったので、それもメモしておこう。

具体的には、Si あるいは Ge の価電子帯の正孔のエネルギーの場合を対象としている。導電体に比べて、価電子帯は warp したエネルギー構造を持っている。特に、重い正孔のエネルギー構造は大きく warp している。図 1 は Si の価電子帯の正孔のエネルギーを 3次元で描画したものである。計算に使用したパラメータは Si のものを使用しているが、その立方対称エネルギー \mathcal{E} との関係は次の節で示される。このように、等エネルギー面が球面からずれることによって、導電率テンソルには非対角成分が現れ、ホール係数にも異方的なエネルギーの影響が現れる。

2 立方対称エネルギーのモデル

Dresselhaus らが示した立方対称性を有する Ge や Si の等エネルギー面を表す解析モデルは次のように表される。

$$\mathcal{E} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \{Ak^2 \pm [B^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_z^2k_x^2)]^{1/2}\} \quad (1)$$

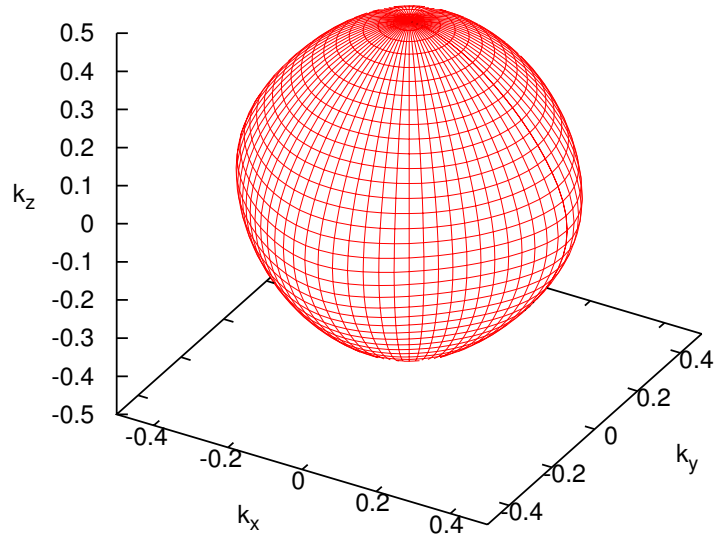
この式を見ると、 Ak^2 からずれる部分、つまり球対称からずれる部分は $(k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_z^2k_x^2)$ である。あるいは、 B と C が球対称からのずれを表すパラメータであって、最終的な計算はこれらのパラメータからなる定数による無限級数で表される。したがって、級数が早く収束するためには、大括弧内の変動部分 $(k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_z^2k_x^2)$ からその中間値を引いておき、それを ak^4 という形で足しておけば、中乗の形をとる変数の絶対値が小さくなり、収束が速くなる。具体的には次のようにおく。

$$\mathcal{E} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \{Ak^2 \pm [B^2k^4 + aC^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_z^2k_x^2 - ak^4)]^{1/2}\} \quad (2)$$

a は $(k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_z^2k_x^2)/k^4$ の中間値で与えられるが、それは後で示す。ここで、

$$B'^2 = B^2 + aC^2 \quad (3)$$

warped band light hole



warped band heavy hole

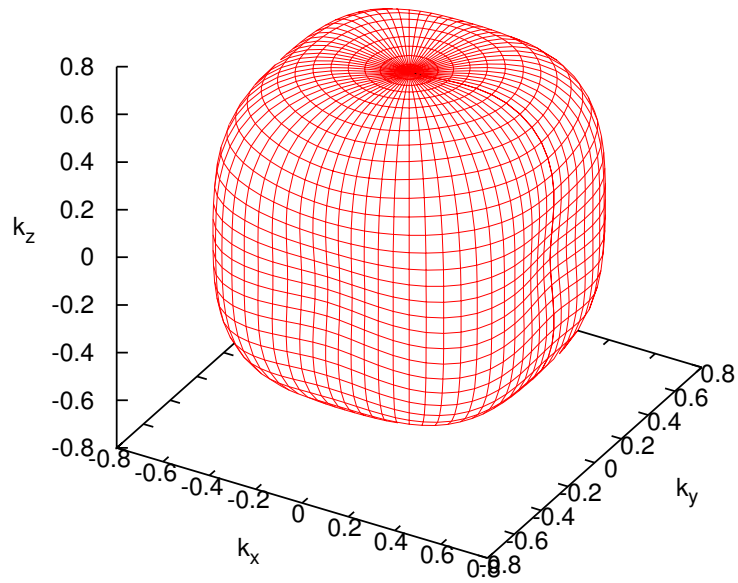


図 1: 軽い正孔 (左図) と重い正孔 (右図) の等エネルギー面. 波数は $0.1(2\pi/a_0)$ を単位として, エネルギーがバンドの頂上から 51.0 meV 低い場合を表す. Si の価電子帯の場合で, 格子定数は $a_0 = 5.43 \text{ \AA}$, パラメータの値は $A = 4.1$, $B = 1.4$, $C = 3.7$ である.

とおくと,

$$\begin{aligned}
\mathcal{E} &= -\frac{\hbar^2}{2m_0} \{Ak^2 \pm [B'^2 k^4 + C^2(k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2 - ak^4)]^{1/2}\} \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[Ak^2 \pm B'k^2 \left(1 + \frac{C^2}{B'^2} \frac{k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2 - ak^4}{k^2} \right)^{1/2} \right] \\
&\simeq -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[Ak^2 \pm B'k^2 \pm \frac{C^2}{2B'} \left(\frac{k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2 - ak^4}{k^4} \right) \right] \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m_0} (A \pm B')k^2 \left[1 \pm \frac{C^2}{2B'(A \pm B')} \left(\frac{k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2}{k^4} - a \right) \right] \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m_0} (A \pm B')k^2 \left[1 - \gamma \left(\frac{k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2}{k^4} - a \right) \right] \\
&= -g(\theta, \phi)k^2 k_B T
\end{aligned} \tag{4}$$

と整理変形できる。ただし,

$$\gamma = \mp \frac{C^2}{2B'(A \pm B')} \tag{5}$$

$$g(\theta, \phi) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{A \pm B'}{k_B T} \left[1 - \gamma \left(\frac{k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2}{k^4} - a \right) \right] \tag{6}$$

とおいた。

ここで, a の値を決めておこう。後のホール係数や導電率の計算では式 (6) の

$$\gamma \left(\frac{k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2}{k^4} - a \right) \tag{7}$$

の部分の中乗が展開項になるから, 式 (6) の絶対値が小さいほうが収束が速くなる。それには a を大括弧内第 1 項の最小値と最大値の中間の値にすれば良い。大括弧内第 1 項を ψ とおき, 極座標表示すると,

$$\psi = \frac{k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2}{k^4} = \cos^2 \phi \sin^2 \phi \sin^4 \theta + \sin^2 \theta \cos^2 \theta \tag{8}$$

となる。

$$\frac{\partial \psi}{\partial \phi} = \sin 2\phi \cos 2\phi \sin^4 \theta = 0$$

より, ϕ は $\phi = 0$ で極小, $\phi = \pi/4$ で極大となる。 $\phi = \pi/4$ を式 (8) に代入すると,

$$\psi = \frac{1}{4} \sin^4 \theta + \sin^2 \theta \cos^2 \theta \tag{9}$$

となるから,

$$\frac{\partial \psi}{\partial \theta} = \sin \theta \cos \theta (3 \cos^2 \theta - 1) = 0$$

より, ψ が最大となるのは $3 \cos^2 \theta - 1 = 0$ の時である。これを式 (9) に代入することにより, ψ の最大値は $1/3$, 最小値は 0 であることがわかる。これより, $a = 1/6$ となることがわかる。

具体的な a を用い, 式 (6) を極座標表示で書き換えると,

$$g(\theta, \phi) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{A \pm B'}{k_B T} \left[1 - \gamma \left(\cos^2 \phi \sin^2 \phi \sin^4 \theta + \sin^2 \theta \cos^2 \theta - \frac{1}{6} \right) \right] \tag{10}$$

となる。このままでも良いが, 論文 [1] ではこれを整理変形して次のような違う表現にしている。

$$g(\theta, \phi) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{A \pm B'}{k_B T} \left\{ 1 + \frac{1}{2} \gamma [\sin^4 \theta (\cos^4 \phi + \sin^4 \phi) + \cos^4 \theta - \frac{2}{3}] \right\} \tag{11}$$

式 (10) から式 (11) への変形は脚注に示す通りである。¹ ここで、

$$q = -\frac{1}{2}[\sin^4 \theta (\cos^4 \phi + \sin^4 \phi) + \cos^4 \theta - \frac{2}{3}] \quad (12)$$

とおけば、

$$g(\theta, \phi) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{A \pm B'}{k_B T} (1 - \gamma q) \quad (13)$$

と書ける。

3 正孔の濃度

正孔のエネルギー \mathcal{E} はバンド頂上から測った値とする。式 (1) は正確には電子のエネルギーで、したがって負である。バンド頂上のエネルギーを \mathcal{E}_v 、フェルミエネルギーを \mathcal{E}_F とする。 \mathcal{E} に正孔がある確率、すなわち電子が存在しない確率 $f(\mathcal{E})$ は、 $\mathcal{E} + \mathcal{E}_v < \mathcal{E}_F$ であることを注意して、

$$1 - f_0(\mathcal{E}) = 1 - \frac{1}{e^{(\mathcal{E} + \mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} + 1} = \frac{e^{(\mathcal{E} + \mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T}}{e^{(\mathcal{E} + \mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} + 1} \simeq e^{(\mathcal{E} + \mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} \quad (14)$$

である。したがって、正孔の濃度 p は

$$\begin{aligned} p &= \int (1 - f_0) \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} = \frac{1}{4\pi^3} \int e^{(\mathcal{E} + \mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} d\mathbf{k} = \frac{e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T}}{4\pi^3} \int e^{\mathcal{E}/k_B T} d\mathbf{k} \\ &\simeq \frac{e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T}}{4\pi^3} \int e^{-g(\theta, \phi)k^2/k_B T} k^2 \sin \theta dk d\theta d\phi \\ &= \frac{1}{2} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T}}{4\pi^3} \int [g(\theta, \phi)]^{-3/2} \sin \theta d\theta d\phi \end{aligned} \quad (15)$$

となる。²

これを積分するために、 $g^{-3/2}$ を二項展開すると、

$$[g(\theta, \phi)]^{-3/2} = \left[\frac{\hbar^2 (A \pm B')}{2m_0 k_B T} \right]^{-3/2} \left(1 - \frac{3}{2} \gamma q + \frac{15}{8} \gamma^2 q^2 - \frac{35}{16} \gamma^3 q^3 + \dots \right) \quad (16)$$

これを式 (15) に代入すると、

$$p = \frac{e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T}}{16\pi^{5/2}} \left[\frac{2m_0 k_B T}{\hbar^2 (A \pm B')} \right]^{3/2} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \left(1 - \frac{3}{2} \gamma q + \frac{15}{8} \gamma^2 q^2 - \frac{35}{16} \gamma^3 q^3 + \dots \right) \sin \theta d\theta d\phi \quad (17)$$

1

$$\cos^2 \phi \sin^2 \phi = \frac{1}{4} [(\cos^2 \phi + \sin^2 \phi)^2 - (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi)^2] = \frac{1}{4} [1 - (\cos^2 \phi - \sin^2 \phi)^2] = \frac{1}{4} [1 - \cos^4 \phi + 2 \cos^2 \phi \sin^2 \phi - \sin^4 \phi^2]$$

両辺を 2 倍してから移項すると、

$$\cos^2 \phi \sin^2 \phi = \frac{1}{2} (1 - \cos^4 \phi - \sin^4 \phi)$$

となる。同様に

$$\cos^2 \theta \sin^2 \theta = \frac{1}{2} (1 - \cos^4 \theta - \sin^4 \theta)$$

も成り立つ。これを式 (10) に代入すると式 (11) が得られる。

²次の積分公式を用いる。

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2a} \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

となる. これを項別に積分すると次式を得る. (\hbar が h に変わっていることに要注意.)

$$p = \frac{1}{2\pi} \frac{(2\pi m_0 k_B T)^{3/2}}{h^3} e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} (A \pm B')^{-3/2} \int (1 - \frac{3}{2}\gamma q + \frac{15}{8}\gamma^2 q^2 - \frac{35}{16}\gamma^3 q^3 + \dots) \sin\theta d\theta d\phi \quad (18)$$

$$= 2 \frac{(2\pi m_0 k_B T)^{3/2}}{h^3} e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} (A \pm B')^{-3/2} (1 + \frac{1}{20}\gamma + \frac{165}{10080}\gamma^2 + \frac{15715}{17297280}\gamma^3 + \dots) \quad (19)$$

$$= 2 \frac{(2\pi m_0 k_B T)^{3/2}}{h^3} e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} (A \pm B')^{-3/2} (1 + 0.05\gamma + 0.01636905\gamma^2 + 0.00090852\gamma^3 + \dots) \quad (20)$$

この式は論文 [1] の Eq.(10) である計算の詳細は後に記す. 論文の γ^2 の係数の小数点5桁はミスプリントである. 式 (15) が論文の Eq.(8), 式 (16) が Eq.(9) となっており, 式 (20) に至る煩瑣な計算は省略されている. この計算は煩瑣ではあるが, 後に記すホール係数の計算の煩雑さに比べれば大したことではない.

4 導電率

導電率の計算は

$$J_i = -\sigma_{ij} E_j + \sigma_{ijl} E_j B_l + \sigma_{ijlm} E_j B_l B_m + \sigma_{ijlmn} E_j B_l B_m B_n + \dots \quad (21)$$

として,

$$\sigma_{ij} = \frac{e^2}{4\pi^3 \hbar^2} \int \tau \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_i} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_j} d\mathbf{k} \quad (22)$$

で与えられる (例えば 2015.9.21 の式 (29) を参照.) この計算は, 正孔の濃度と比較しても, はるかに複雑かつ煩雑であるが, 論文では, 簡単に正孔濃度と同様に計算できるとのみ書いてあって結果の式しか示されていない. 実はこれから記す計算量を見ればとても論文に記述できないことがわかる. ここではその計算過程をメモしておこう.

立方対称であるから, $i \neq j$ のとき $\sigma_{ij} = 0$ となり, $\sigma_{11} = \sigma_{22} = \sigma_{33}$ である. したがって, $i = j = x$ の場合を計算すればよい.

計算には式 (11) が入ってくるので, k_i に関する偏微分を球座標にかんする偏微分に変換する必要がある. その変換は,

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial k_x} \\ \frac{\partial}{\partial k_y} \\ \frac{\partial}{\partial k_z} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \frac{\partial k}{\partial k_x} & \frac{\partial \theta}{\partial k_x} & \frac{\partial \phi}{\partial k_x} \\ \frac{\partial k}{\partial k_y} & \frac{\partial \theta}{\partial k_y} & \frac{\partial \phi}{\partial k_y} \\ \frac{\partial k}{\partial k_z} & \frac{\partial \theta}{\partial k_z} & \frac{\partial \phi}{\partial k_z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial k} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial \phi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial k_x}{\partial k} & \frac{\partial k_y}{\partial k} & \frac{\partial k_z}{\partial k} \\ \frac{\partial \theta}{\partial k} & \frac{\partial \theta}{\partial k} & \frac{\partial \theta}{\partial k} \\ \frac{\partial \phi}{\partial k} & \frac{\partial \phi}{\partial k} & \frac{\partial \phi}{\partial k} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial k} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial \phi} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \cos \phi \sin \theta & \frac{1}{k} \cos \phi \cos \theta & -\frac{\sin \phi}{k \sin \theta} \\ \sin \phi \sin \theta & \frac{1}{k} \sin \phi \cos \theta & \frac{\cos \phi}{k \sin \theta} \\ \cos \theta & -\frac{1}{k} \sin \theta & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial k} \\ \frac{\partial}{\partial \theta} \\ \frac{\partial}{\partial \phi} \end{pmatrix} \quad (23) \end{aligned}$$

を使う。ここで式が煩瑣になるのを避けるために、次の G と G_0 を用いる。

$$\mathcal{E} = -g(\theta, \phi)k^2k_B T = -G_0k^2(1 + \gamma q)k_B T = Gk^2(1 + \gamma q) \quad (24)$$

$$g = G_0(1 + \gamma q) \quad (25)$$

$$G_0 = \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{A \pm B'}{k_B T} \quad (26)$$

$$G = -G_0k_B T \quad (27)$$

そうすると、

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k} = -2kG_0(1 + \gamma q)k_B T \quad (28)$$

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \theta} = -k^2G_0\gamma \frac{\partial q}{\partial \theta} k_B T \quad (29)$$

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \phi} = -k^2G_0\gamma \frac{\partial q}{\partial \phi} k_B T \quad (30)$$

$$(31)$$

である。立方対称性から σ_{ij} の式で $(\partial \mathcal{E}/\mathbf{k}_i)^2$ は $(\partial \mathcal{E}/\mathbf{k}_x)^2$, $(\partial \mathcal{E}/\mathbf{k}_y)^2$, $(\partial \mathcal{E}/\mathbf{k}_z)^2$ のいずれでも良いから、式が簡単な $(\partial \mathcal{E}/\mathbf{k}_z)^2$ を計算することにしよう。

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_z} = \cos \theta \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k} - \frac{\sin \theta}{k} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \theta} \quad (32)$$

$$= -G_0k_B T k [2 \cos \theta (1 + \gamma q) + \gamma \sin \theta \frac{\partial q}{\partial \theta}] \quad (33)$$

$$= -G_0k_B T k Q \quad (34)$$

ただし、

$$Q = 2 \cos \theta (1 + \gamma q) + \gamma \sin \theta \frac{\partial q}{\partial \theta} \quad (35)$$

である。以上の式と、 $f_0 = 1 - e^{(\mathcal{E} + \mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T}$, $\tau = l|\mathcal{E}|^{-\lambda}$ などを式(22)に代入すると、

$$\sigma_{ii} = \frac{e^2 l}{4\pi^3 \hbar} G_0^2 k_B T e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} \int e^{-gk^2} \mathcal{E}^{-\lambda} k^2 Q^2 k^2 d\Omega \quad (36)$$

となる。 $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$ である。ここで、 $gk^2 = t$ と変数変換すると、 $\mathcal{E} = -tk_B T$ などとなり、積分は

$$\sigma_{ii} = \frac{e^2 l}{8\pi^3 \hbar^2} G_0^2 (k_B T)^{1-\lambda} e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} \int e^{-t} t^{3/2-\lambda} g^{-5/2} Q^2 dt d\Omega \quad (37)$$

$$= \frac{e^2 l}{8\pi^3 \hbar^2} G_0^{-1/2} (k_B T)^{1-\lambda} e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} \int \Gamma(5/2 - \lambda) (1 + \gamma q)^{-5/2} Q^2 d\Omega \quad (38)$$

$$= \frac{e^2 l}{8\pi^3 \hbar^2} \left[\frac{\hbar^2}{2m_0} (A \pm B') \right]^{-1/2} (k_B T)^{3/2-\lambda} e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} \Gamma(5/2 - \lambda) \int (1 + \gamma q)^{-5/2} Q^2 d\Omega \quad (39)$$

$$= \frac{e^2 l}{8\pi^3 \hbar^3} (2m_0 k_B T)^{3/2} \frac{1}{2m_0} e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} \Gamma(5/2 - \lambda) (k_B T)^{-\lambda} (A \pm B')^{-1/2} I \quad (40)$$

となる。ただし、

$$\begin{aligned} I &= \int (1 + \gamma q)^{-5/2} Q^2 d\Omega = \int (1 + \gamma q)^{-5/2} \left[2 \cos \theta (1 + \gamma q) + \gamma \sin \theta \frac{\partial q}{\partial \theta} \right]^2 d\Omega \\ &= \int \left[4 \cos^2 \theta (1 + \gamma q)^{-1/2} + 4 \sin \theta \cos \theta \gamma (1 + \gamma q)^{-3/2} \frac{\partial q}{\partial \theta} + \gamma^2 \sin^2 \theta \left(\frac{\partial q}{\partial \theta} \right)^2 (1 + \gamma q)^{-5/2} \right] d\Omega \end{aligned} \quad (41)$$

である。最終的にこの積分 I を計算して γ の冪級数にすればよい。

I を計算するために、まず $(1 + \gamma q)^{-5/2}$ を二項展開しておく。

$$(1 + \gamma q)^{-1/2} = 1 - \frac{1}{2}(\gamma q) + \frac{3}{8}(\gamma q)^2 - \frac{5}{16}(\gamma q)^3 + \frac{35}{128}(\gamma q)^4 - \frac{63}{256}(\gamma q)^5 + \dots \quad (42)$$

$$(1 + \gamma q)^{-3/2} = 1 - \frac{3}{2}(\gamma q) + \frac{15}{8}(\gamma q)^2 - \frac{35}{16}(\gamma q)^3 + \frac{315}{128}(\gamma q)^4 - \frac{693}{256}(\gamma q)^5 + \dots \quad (43)$$

$$(1 + \gamma q)^{-5/2} = 1 - \frac{5}{2}(\gamma q) + \frac{35}{8}(\gamma q)^2 - \frac{105}{16}(\gamma q)^3 + \frac{1155}{128}(\gamma q)^4 - \frac{3003}{256}(\gamma q)^5 + \dots \quad (44)$$

これを式 (45) に代入し、 γ の巾乗にすると、 $I = \sum S_i \gamma^i$ の係数 S_i は次のようになる。

$$S_0 = 4 \cos^2 \theta \quad (45)$$

$$S_1 = 4 \cos^2 \theta \left(-\frac{1}{2} \right) q + 4 \sin \theta \cos \theta \frac{\partial q}{\partial \theta} \quad (46)$$

$$S_2 = 4 \cos^2 \theta \left(\frac{3}{8} \right) q^2 + 4 \sin \theta \cos \theta \left(-\frac{3}{2} \right) q \frac{\partial q}{\partial \theta} + \sin^2 \theta \left(\frac{\partial q}{\partial \theta} \right)^2 \quad (47)$$

$$S_3 = 4 \cos^2 \theta \left(-\frac{5}{16} \right) q^3 + 4 \sin \theta \cos \theta \left(\frac{15}{8} \right) q^2 \frac{\partial q}{\partial \theta} + \sin^2 \theta \left(\frac{\partial q}{\partial \theta} \right)^2 \left(-\frac{5}{2} \right) q \quad (48)$$

$$S_4 = 4 \cos^2 \theta \left(\frac{35}{128} \right) q^4 + 4 \sin \theta \cos \theta \left(-\frac{35}{16} \right) q^3 \frac{\partial q}{\partial \theta} + \sin^2 \theta \left(\frac{\partial q}{\partial \theta} \right)^2 \left(\frac{35}{8} \right) q^2 \quad (49)$$

$$S_5 = 4 \cos^2 \theta \left(-\frac{63}{256} \right) q^5 + 4 \sin \theta \cos \theta \left(\frac{35}{128} \right) q^4 \frac{\partial q}{\partial \theta} + \sin^2 \theta \left(\frac{\partial q}{\partial \theta} \right)^2 \left(-\frac{105}{16} \right) q^3 \quad (50)$$

この S_i を積分すると次の導電率に関する表式が得られる。計算の詳細は後に示す。

$$\begin{aligned} \sigma_{ii} &= \frac{e^2 l}{8\pi^3 \hbar^3} (2m_0 k_B T)^{3/2} \frac{1}{2m_0} e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} \Gamma(5/2 - \lambda) (k_B T)^{-\lambda} (A \pm B')^{-1/2} \\ &\times \left(\frac{16}{3} \pi + \frac{8}{90} \pi \gamma + \frac{139}{630} \pi \gamma^2 + \frac{3137}{648648} \pi \gamma^3 + \frac{370445}{75613824} \pi \gamma^4 + \frac{215119}{1915550208} \pi \gamma^5 + \dots \right) \end{aligned} \quad (51)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{2\pi m_0 k_B T}{\hbar^2} \right)^{3/2} e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} \frac{e^2 l}{m_0} \Gamma(5/2 - \lambda) (k_B T)^{-\lambda} (A \pm B')^{-1/2} \\ &\times \left(1 + \frac{1}{60} \gamma + \frac{139}{3360} \gamma^2 + \frac{3137}{3459456} \gamma^3 + \frac{370445}{403273728} \gamma^4 + \frac{215119}{10216267776} \gamma^5 + \dots \right) \end{aligned} \quad (52)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{8}{3\sqrt{\pi}} \left(\frac{2\pi m_0 k_B T}{\hbar^2} \right)^{3/2} e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} \frac{e^2 l}{m_0} \Gamma(5/2 - \lambda) (k_B T)^{-\lambda} (A \pm B')^{-1/2} \\ &\times (1 + 0.01666667\gamma + 0.04136905\gamma^2 + 0.00090679\gamma^3 + 0.0009185944\gamma^4 + 0.0000210565\gamma^5 + \dots) \end{aligned} \quad (53)$$

この最後の式は論文の Eq.(11) である。論文の γ^4 の係数の小数点第 6 桁はミスプリントである。

5 ホール係数

ホール係数はテンソル形式を用いて次式で与えられる (例えば 2015.9.21 の式 (30) を参照.)

$$\sigma_{ikl} = \frac{e^3}{4\pi^3 \hbar^4} \int \tau \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_i} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_r} \frac{\partial}{\partial k_s} \left(\tau \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_k} \right) \epsilon_{lrs} d\mathbf{k} \quad (54)$$

立方対称であるので、 $\partial \mathcal{E} / \partial k_i$ は奇関数となり、 $i = 1$ 、 $k = 2$ とすれば、 $l = 1$ と $l = 2$ の場合は式 (54) の積分は 0 になる。 $l = 3$ のみ 0 にならずに残り、 $r = 1$ 、 $s = 2$ または $r = 2$ 、 $s = 1$ となる。したがって、

$$\sigma_{123} = \frac{e^3}{4\pi^3 \hbar^4} \int \tau \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_1} \left(\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_1} \frac{\partial}{\partial k_2} - \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_2} \frac{\partial}{\partial k_1} \right) \left(\tau \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_2} \right) d\mathbf{k} \quad (55)$$

となる。立方対称であるから、1, 2, 3 を cyclic に変えても積分は変わらない。そこで、

$$\sigma_{231} = \frac{e^3}{4\pi^3 \hbar^4} \int \tau \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_2} \left(\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_2} \frac{\partial}{\partial k_3} - \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_3} \frac{\partial}{\partial k_2} \right) \left(\tau \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_3} \right) dk \quad (56)$$

を考えよう。これは、極座標にした場合、 $\partial/\partial k_z$ が最も簡単で計算が楽になると考えられるからである。

\mathcal{E} が極座標で表されているので、上の式を極座標に変換する。まず、

$$\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_y} \frac{\partial}{\partial k_z} - \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_z} \frac{\partial}{\partial k_y} \quad (57)$$

から計算しよう。式(23)より、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_y} \frac{\partial}{\partial k_z} &= \left(\sin \phi \sin \theta \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k} + \frac{1}{k} \sin \phi \sin \theta \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi}{k \sin \theta} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \phi} \right) \left(\cos \theta \frac{\partial}{\partial k} - \frac{1}{k} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) \\ \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_z} \frac{\partial}{\partial k_y} &= \left(\cos \theta \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k} - \frac{1}{k} \sin \theta \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \theta} \right) \left(\sin \phi \sin \theta \frac{\partial}{\partial k} + \frac{1}{k} \sin \phi \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi}{k \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \right) \end{aligned}$$

となるので、式(57)で、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k} \frac{\partial}{\partial k} \text{の係数} &= 0 & \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k} \frac{\partial}{\partial \theta} \text{の係数} &= -\frac{1}{k} \sin \phi \\ \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial k} \text{の係数} &= \frac{1}{k} \sin \phi & \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \text{の係数} &= 0 \\ \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial k} \text{の係数} &= \frac{1}{k} \cot \theta \cos \phi & \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \phi} \frac{\partial}{\partial \theta} \text{の係数} &= -\frac{1}{k^2} \cos \phi \\ \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k} \frac{\partial}{\partial \phi} \text{の係数} &= \frac{1}{k} \cot \theta \cos \phi & \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \text{の係数} &= -\frac{1}{k^2} \cos \phi \end{aligned}$$

以上の式および式(??)に式(??)を代入すると、

$$\begin{aligned} &\left(\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_y} \frac{\partial}{\partial k_z} - \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_z} \frac{\partial}{\partial k_y} \right) \left(\tau \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_z} \right) \\ &= G^2 k \tau \gamma \left(\sin \phi \frac{\partial q}{\partial \theta} + \cot \theta \cos \phi \frac{\partial q}{\partial \phi} \right) \left[2 \cos \theta + \gamma \left(2q \cos \theta - \sin \theta \frac{\partial q}{\partial \theta} \right) \right] \\ &+ G^2 k \tau \left[-2 \sin \phi (1 + \gamma q) - \gamma \frac{\partial q}{\partial \theta} \cos \phi \right] \left[-2 \sin \theta + \gamma \left(-2q \sin \theta + \frac{\partial q}{\partial \theta} \cos \theta - \frac{\partial^2 q}{\partial \theta^2} \sin \theta \right) \right] \\ &+ G^2 k \tau \gamma \left[2 \cot \theta \cos \phi + \gamma \left(2q \cot \theta \cos \phi - \cos \phi \frac{\partial q}{\partial \theta} \right) \right] \left(2 \cos \theta \frac{\partial q}{\partial \phi} - \sin \theta \frac{\partial^2 q}{\partial \phi \partial \theta} \right) \quad (58) \end{aligned}$$

$$= G^2 k \tau (b_0 + b_1 \gamma + b_2 \gamma^2) \quad (59)$$

となる。ただし、

$$b_0 = 4 \sin \phi \sin \theta \quad (60)$$

$$b_1 = 8q \sin \phi \sin \theta + 2 \frac{\partial q}{\partial \theta} \cos \phi \sin \theta + 6 \frac{\partial q}{\partial \phi} \cos \phi \cos \theta \cot \theta + 2 \frac{\partial^2 q}{\partial \theta^2} \sin \phi \sin \theta - 2 \frac{\partial^2 q}{\partial \phi \partial \theta} \cos \phi \cos \theta \quad (61)$$

$$\begin{aligned} b_2 &= \left(\frac{\partial q}{\partial \theta} \sin \phi + \frac{\partial q}{\partial \phi} \cos \phi \cot \theta \right) \left(2q \cos \theta - \frac{\partial q}{\partial \theta} \sin \theta \right) + \left(2q \sin \phi + \frac{\partial q}{\partial \theta} \cos \phi \right) \left(2q \sin \theta - \frac{\partial q}{\partial \theta} \cos \theta + \frac{\partial^2 q}{\partial \theta^2} \sin \theta \right) \\ &+ \left(2q \cos \phi \cot \theta - \frac{\partial q}{\partial \theta} \cos \phi \right) \left(2 \frac{\partial q}{\partial \phi} \cos \theta - \frac{\partial^2 q}{\partial \phi \partial \theta} \sin \theta \right) \quad (62) \end{aligned}$$

である。また、

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k_y} &= \sin \phi \sin \theta \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial k} + \frac{1}{k} \sin \phi \cos \theta \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi}{k \sin \theta} \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \phi} \\ &= 2Gk \sin \phi \sin \theta + Gk \gamma \left(2q \sin \phi \sin \theta + \sin \phi \cos \theta \frac{\partial q}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi}{\sin \theta} \frac{\partial q}{\partial \phi} \right) \quad (63) \end{aligned}$$

$$= Gk(a_0 + a_1 \gamma) \quad (64)$$

ただし,

$$a_0 = 2 \sin \phi \sin \theta \quad (65)$$

$$a_1 = 2q \sin \phi \sin \theta + \sin \phi \cos \theta \frac{\partial q}{\partial \theta} + \frac{\cos \phi}{\sin \theta} \frac{\partial q}{\partial \phi} \quad (66)$$

である. 以上の式を用いると式 (56) は

$$\sigma_{231} = -\frac{e^3}{4\pi^3 \hbar^4} \int \frac{\tau}{k_B T} e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} e^{\mathcal{E}/k_B T} G^3 k^2 \tau (a_0 + a_1 \gamma) (b_0 + b_1 \gamma + b_2 \gamma^2) d\mathbf{k} \quad (67)$$

$$= -\frac{e^3}{4\pi^3 \hbar^4 k_B T} e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} \int \tau^2 e^{-gk^2} G^3 k^2 \tau Z(\theta, \phi) d\mathbf{k} \quad (68)$$

$$(69)$$

となる. ここで,

$$Z(\theta, \phi) = (a_0 + a_1 \gamma)(b_0 + b_1 \gamma + b_2 \gamma^2) \quad (70)$$

とおいた. さらに,

$$gk^2 = t \quad (71)$$

とおくと,

$$\sigma_{231} = -\frac{e^3 l^2}{4\pi^3 \hbar^4 k_B T} e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} \int (tk_B T)^{-2\lambda} e^{-t} (-G_0 k_B T)^3 (t/g)^2 \frac{1}{2} (gt)^{-1/2} Z(\theta, \phi) dt \sin \theta d\theta d\phi \quad (72)$$

$$= \frac{e^3 l^2}{4\pi^3 \hbar^4 k_B T} e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} \int t^{3/2-2\lambda} e^{-t} (k_B T)^{3-2\lambda} g^{-5/2} G_0^3 \frac{1}{2} Z(\theta, \phi) dt \sin \theta d\theta d\phi \quad (73)$$

$$= \frac{e^3 l^2}{8\pi^3 \hbar^4} e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} (k_B T)^{2-2\lambda} \Gamma\left(\frac{5}{2} - 2\lambda\right) \int (1 + \gamma q)^{-5/2} G_0^{1/2} Z(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi \quad (74)$$

$$= \frac{e^3 l^2}{8\pi^3 \hbar^3} e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} (k_B T)^{3/2-2\lambda} \Gamma\left(\frac{5}{2} - 2\lambda\right) \frac{(A \pm B')^{1/2}}{(2m_0)^{1/2}} \int (1 + \gamma q)^{-5/2} Z(\theta, \phi) \sin \theta d\theta d\phi \quad (75)$$

$$= \frac{e^3 l^2}{h^3 (2m_0)^{1/2}} e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} (k_B T)^{3/2-2\lambda} \Gamma\left(\frac{5}{2} - 2\lambda\right) (A \pm B')^{1/2} \times \int \left[\left(1 - \frac{5}{2} \gamma q + \frac{35}{8} \gamma^2 q^2 - \frac{105}{16} \gamma^3 q^3 + \frac{1155}{128} \gamma^4 q^4 \dots\right) (a_0 + a_1 \gamma)(b_0 + b_1 \gamma + b_2 \gamma^2) \right] \sin \theta d\theta d\phi \quad (76)$$

となり, 残りは γ の冪級数になり, その係数は θ と ϕ に関する積分である. 積分計算の詳細は後に記すとして, 結果は次のようになる.

$$\sigma_{231} = \frac{32\pi}{3} \frac{e^3 l^2}{h^3 (2m_0)^{1/2}} e^{(\mathcal{E}_v - \mathcal{E}_F)/k_B T} (k_B T)^{3/2-2\lambda} \Gamma\left(\frac{5}{2} - 2\lambda\right) (A \pm B')^{1/2} (1 - 0.01667\gamma + 0.017956\gamma^2 - 0.0069857\gamma^3 + 0.0012610\gamma^4 \dots) \quad (77)$$

この式は論文 [1] の Eq.(12) である. このように, エネルギーが立方対称性を有する場合の導電率, ホール係数は異方性のパラメータが知られれば計算できる.

6 正孔の濃度の式 (18) の積分計算

積分の項のみを示す.

- γ^0 の係数

$$I_0 = \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \sin \theta d\theta d\phi = 4\pi$$

- γ^1 の係数

$$I_1 = -\frac{3}{2} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} q \sin \theta d\theta d\phi$$

まず, $w = \cos^4 \phi + \sin^4 \phi$ を次のように整理する.

$$w = \cos^4 \phi + \sin^4 \phi = \left(\frac{1 + \cos 2\phi}{2} \right)^2 + \left(\frac{1 - \cos 2\phi}{2} \right)^2 = \frac{1}{2}(1 + \cos^2 2\phi) = \frac{1}{4}(3 + \cos 4\phi) \quad (78)$$

したがって,

$$\int_0^{2\pi} w d\phi = \frac{3}{4} 2\pi$$

である. $\cos \theta = z$ とおき, 係数を除いた q の積分を計算する.

$$\begin{aligned} \int q d\theta d\phi &= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \left[w \sin^4 \theta + \cos^4 \theta - \frac{2}{3} \right] \sin \theta d\theta d\phi = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \left[\frac{3}{4}(1-z^2)^2 + z^4 - \frac{2}{3} \right] 2\pi dz \\ &= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \left[\frac{7}{4}z^4 - \frac{3}{2}z^2 + \frac{1}{12} \right] 2\pi dz = \frac{1}{2} \left[\frac{7}{10} - 1 + \frac{1}{6} \right] 2\pi = -\frac{2}{15}\pi \end{aligned}$$

したがって,

$$I_1 = \frac{-3}{2} \frac{-2}{15} \pi = \frac{1}{20} 4\pi$$

となる.

- γ^2 の係数

まず,

$$\int_0^{2\pi} w^2 d\phi = \int_0^{2\pi} \frac{1}{32} (19 + 12 \cos 4\phi + \cos 8\phi) d\phi = \frac{19}{32} 2\pi$$

となる. したがって,

$$\begin{aligned} \int q^2 d\theta d\phi &= \frac{1}{4} \int_{-1}^1 \left[w \sin^4 \theta + \cos^4 \theta - \frac{2}{3} \right]^2 \sin \theta d\theta d\phi \\ &= \frac{1}{4} \int_{-1}^1 \left[\frac{19}{32}(1-z^2)^4 + 2\frac{3}{4}(z^4 - \frac{2}{3})(1-z^2)^2 + (z^2 - \frac{2}{3})^2 \right] 2\pi dz \\ &= \frac{1}{4} \int_{-1}^1 \left[\frac{99}{16}z^8 - \frac{43}{4}z^6 + \frac{131}{24}z^4 - \frac{3}{4}z^2 + \frac{11}{144} \right] 2\pi dz \\ &= \frac{11}{315} \pi = \frac{11}{1260} 4\pi \end{aligned}$$

となる. これより,

$$I_2 = \frac{15}{8} \frac{11}{1260} \pi = \frac{165}{10080} 4\pi$$

が得られる.

- γ^3 の係数

これまでと同様に, まず,

$$\int_0^{2\pi} w^3 d\phi = \int_0^{2\pi} \frac{1}{128} (63 + 55 \cos 4\phi + 9 \cos 8\phi + \cos 8\phi \cos 4\phi) d\phi = \frac{63}{128} 2\pi$$

を導いておく。これを用いると、

$$\begin{aligned}
\int q^3 d\theta d\phi &= \frac{1}{8} \int_{-1}^1 \left[w \sin^4 \theta + \cos^4 \theta - \frac{2}{3} \right]^3 \sin \theta d\theta d\phi \\
&= \frac{1}{8} \int_{-1}^1 \left[\frac{63}{128} (1-z^2)^6 + 3 \frac{19}{32} (1-z^2)^4 \left(z^4 - \frac{2}{3} \right) + 3 \frac{3}{4} (1-z^2)^2 \left(z^2 - \frac{2}{3} \right)^2 + \left(z^2 - \frac{2}{3} \right)^3 \right] 2\pi dz \\
&= \frac{1}{8} \int_{-1}^1 \left[\frac{707}{128} z^{12} - \frac{933}{64} z^{10} + \frac{1809}{128} z^8 - \frac{199}{32} z^6 + \frac{527}{384} z^4 - \frac{13}{64} z^2 + \frac{29}{3456} \right] 2\pi dz \\
&= \frac{1}{8} \left(-\frac{898}{135135} \right) 2\pi = -\frac{449}{1081080} 4\pi
\end{aligned}$$

となる。これより

$$I_3 = \left(-\frac{35}{16} \right) \left(-\frac{449}{1081080} \right) 4\pi = \frac{15715}{17297280} 4\pi$$

が得られる。

7 導電率の式 (51) の積分計算

項別積分を示す前に、 $w = \cos^4 \phi + \sin^4 \phi$ の巾乗の ϕ に関する積分を計算しておこう。式 (78) から、

$$\int_0^{2\pi} w d\phi = \int \frac{1}{4} (3 + \cos 4\phi) d\phi = \frac{3}{4} 2\pi = \frac{3}{2} \pi \quad (79)$$

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} w^2 d\phi &= \int \frac{1}{16} (3 + \cos 4\phi)^2 d\phi = \int \frac{1}{16} (9 + 6 \cos 4\phi + \cos^2 4\phi) d\phi \\
&= \int \frac{1}{32} (19 + 12 \cos 4\phi + \cos 8\phi) d\phi = \frac{19}{32} 2\pi = \frac{19}{16} \pi \quad (80)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} w^3 d\phi &= \int \frac{1}{4} (3 + \cos 4\phi) \frac{1}{32} (19 + 12 \cos 4\phi + \cos 8\phi) d\phi \\
&= \int \frac{1}{128} (63 + 55 \cos 4\phi + 9 \cos 8\phi + \cos 4\phi \cos 8\phi) = \frac{63}{128} 2\pi = \frac{63}{64} \pi \quad (81)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} w^4 d\phi &= \int \frac{1}{1024} (19 + 4 \cos 4\phi + \cos 8\phi)^2 d\phi \\
&= \int \frac{1}{2048} (867 + 912 \cos 4\phi + 216 \cos 8\phi + \cos 16\phi + 48 \cos 4\phi \cos 8\phi) d\phi \\
&= \frac{867}{2048} 2\pi = \frac{867}{1024} \pi \quad (82)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\int_0^{2\pi} w^5 d\phi &= \int \frac{1}{4} (3 + \cos 4\phi) \frac{1}{2048} (867 + 912 \cos 4\phi + 216 \cos 8\phi + \cos 16\phi + 48 \cos 4\phi \cos 8\phi) d\phi \\
&= \int \frac{1}{2048} (3069 + 3675 \cos 4\phi + 1116 \cos 8\phi + 3 \cos 16\phi + 72 \cos 12\phi + 216 \cos 4\phi + \cos 4\phi + 24 \cos 4\phi \cos 12\phi) \\
&= \frac{3069}{8192} 2\pi = \frac{3069}{4096} \pi \quad (83)
\end{aligned}$$

以下の積分で w^n の ϕ に関する積分にはここの結果を用いる。また、次の関係式を用いる。各係数の第2項は0になる。一般的にこれを証明できそうに考えられるが、差し当たってできていない。 θ 単独の積分、あるいは ϕ 単独の積分では0にならない。

$$\frac{\partial q}{\partial \theta} = 2 \sin \theta \cos \theta [w \sin^2 \theta - \cos^2 \theta] \quad (84)$$

- γ^0 の係数

$$I_0 = \int 4 \cos^2 \theta \sin \theta d\theta d\phi = \int 4z^2 dz d\phi = \frac{16}{3}\pi$$

- γ^1 の係数の第 1 項 I_{1-1} , 第 1 項 I_{1-2}

$$\begin{aligned} I_{1-1} &= \int -2 \cos^2 \theta q \sin \theta d\theta d\phi = - \int \cos^2 \theta \left(w \sin^4 \theta + \cos^4 \theta - \frac{2}{3} \right) \sin \theta d\theta d\phi \\ &= - \int \left(z^4 w + z^6 - \frac{2}{3} \right) dz d\phi = - \int \left(\frac{3}{4} z^2 (1 - z^2)^2 + z^6 - \frac{2}{3} z^2 \right) 2\pi dz \\ &= - \int \left(\frac{7}{4} z^6 - \frac{3}{2} z^4 + \frac{1}{12} z^2 \right) 2\pi = - \left(\frac{14}{28} - \frac{6}{10} + \frac{2}{36} \right) 2\pi = \frac{8}{90}\pi \\ I_{1-2} &= \int 4 \sin \theta \cos \theta \frac{\partial q}{\partial \theta} \sin \theta d\theta d\phi = 8 \sin^2 \theta \cos^2 \theta [w \sin^2 \theta - \cos^2 \theta] \sin \theta d\theta d\phi \\ &= \int 8 [w(z^6 - 2z^4 + z^2) + (z^6 - z^4)] dz d\phi = 8 \left[\frac{3}{4} \left(\frac{2}{7} - \frac{4}{5} + \frac{2}{3} \right) + \left(\frac{2}{7} - \frac{2}{5} \right) \right] 2\pi = 0 \\ I_1 &= I_{1-1} + I_{1-2} = \frac{8}{90}\pi = \frac{16\pi}{3} \frac{1}{60} \end{aligned}$$

- γ^2 の係数の第 1 項 I_{2-1} , 第 1 項 I_{2-2} , 第 1 項 I_{2-3}

$$\begin{aligned} I_{2-1} &= \int \frac{3}{2} \cos^2 \theta q^2 \sin \theta d\theta d\phi = \int \frac{3}{8} z^2 \left[w(1 - z^2)^2 + z^4 - \frac{2}{3} \right]^2 dz d\phi \\ &= \int \frac{3}{8} \left[w^2(z^{10} - 4z^8 + 6z^6 - 4z^4 + z^2) + w \left(2z^{10} - 4z^8 + \frac{2}{3}z^6 + \frac{8}{3}z^4 - \frac{4}{3}z^2 \right) \right. \\ &\quad \left. + \left(z^{10} - \frac{4}{3}z^6 + \frac{4}{9}z^2 \right) \right] dz d\phi \\ &= \frac{3}{8} \left[\frac{19}{32} \left(\frac{2}{11} - \frac{8}{9} + \frac{12}{7} - \frac{8}{5} + \frac{2}{3} \right) + \frac{3}{4} \left(\frac{4}{11} - \frac{8}{9} + \frac{4}{21} + \frac{8}{15} - \frac{4}{9} \right) + \left(\frac{2}{11} - \frac{8}{21} + \frac{8}{27} \right) \right] 2\pi \\ &= \frac{11}{630}\pi \\ I_{2-2} &= \int -6 \sin \theta \cos \theta q \frac{\partial q}{\partial \theta} \sin \theta d\theta d\phi \\ &= \int -6z^2(1 - z^2) \left[w(1 - z^2)^2 + z^4 - \frac{2}{3} \right] [w(1 - z^2) - z^2] dz d\phi \\ &= \int 6 \left[w^2(z^{10} - 4z^8 + 6z^6 - 4z^4 + z^2) + w \left(2z^{10} - 5z^8 + \frac{10}{3}z^6 + \frac{1}{3}z^4 - \frac{2}{3}z^2 \right) \right. \\ &\quad \left. + \left(z^{10} - z^8 - \frac{2}{3}z^6 + \frac{2}{3}z^2 \right) \right] dz d\phi \\ &= 6 \left[\frac{19}{32} \left(\frac{2}{11} - \frac{8}{9} + \frac{12}{7} - \frac{8}{5} + \frac{2}{3} \right) + \frac{3}{4} \left(\frac{4}{11} - \frac{10}{9} + \frac{20}{21} + \frac{2}{15} - \frac{4}{9} \right) + \left(\frac{2}{11} - \frac{2}{9} - \frac{4}{21} + \frac{4}{15} \right) \right] 2\pi \\ &= 0 \\ I_{2-3} &= \int \sin^2 \theta \left(\frac{\partial q}{\partial \theta} \right)^2 \sin \theta d\theta d\phi = \int 4(1 - z^2)^2 z^2 [w(1 - z^2) - z^2]^2 dz d\phi \\ &= \int 4 \left[w^2(z^{10} - 4z^8 + 6z^6 - 4z^4 + z^2) + w(2z^{10} - 6z^8 + 6z^6 - 2z^4) + (z^{10} - 2z^8 + z^6) \right] dz d\phi \\ &= 8\pi \left[\frac{19}{32} \left(\frac{2}{11} - \frac{8}{9} + \frac{12}{7} - \frac{8}{5} + \frac{2}{3} \right) + \frac{3}{4} \left(\frac{4}{11} - \frac{12}{9} + \frac{12}{7} - \frac{2}{5} \right) + \left(\frac{2}{11} - \frac{4}{9} + \frac{2}{7} \right) \right] 2\pi = \frac{64}{315}\pi \\ I_2 &= I_{2-1} + I_{2-2} + I_{2-3} = \frac{139}{630}\pi = \frac{16\pi}{3} \frac{139}{3360} \end{aligned}$$

• γ^3 の係数の第 1 項 I_{3-1} , 第 1 項 I_{3-2} , 第 1 項 I_{3-3}

$$\begin{aligned}
I_{3-1} &= \int -\frac{5}{4} \cos^2 \theta q^3 \sin \theta d\theta d\phi = \int -\frac{5}{32} z^2 \left[w(1-z^2)^2 + z^4 - \frac{2}{3} \right]^3 dz d\phi \\
&= \int -\frac{5}{32} \left[w^3(z^{14} - 6z^{12} + 15z^{10} - 20z^8 + 15z^6 - 6z^4 + z^2) \right. \\
&\quad + 3w^2 \left(z^{14} - 4z^{12} + \frac{16}{3}z^{10} - \frac{4}{3}z^8 - 3z^6 + \frac{8}{3}z^4 - \frac{2}{3}z^2 \right) \\
&\quad \left. + 3w \left(z^{14} - 2z^{12} - \frac{1}{3}z^{10} + \frac{8}{3}z^8 - \frac{8}{9}z^6 - \frac{8}{9}z^4 + \frac{4}{9}z^2 \right) + \left(z^{14} - 2z^{10} + \frac{4}{3}z^6 - \frac{8}{27}z^2 \right) \right] dz d\phi \\
&= -\frac{5\pi}{16} \left[\frac{63}{128} \left(\frac{2}{15} - \frac{12}{13} + \frac{30}{11} - \frac{40}{9} + \frac{30}{7} - \frac{12}{5} + \frac{2}{3} \right) \right. \\
&\quad + \frac{57}{32} \left(\frac{2}{15} - \frac{8}{13} + \frac{32}{33} - \frac{8}{27} - \frac{6}{7} - \frac{16}{15} - \frac{4}{9} \right) \\
&\quad \left. + \frac{9}{4} \left(\frac{2}{15} - \frac{4}{13} - \frac{2}{33} + \frac{16}{27} - \frac{16}{63} - \frac{16}{45} + \frac{8}{27} \right) \left(\frac{2}{15} - \frac{4}{11} + \frac{8}{21} - \frac{16}{81} \right) \right] 2\pi = \frac{449\pi}{648648}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_{3-2} &= \int \frac{15}{2} \sin \theta \cos \theta q^2 \frac{\partial q}{\partial \theta} \sin \theta d\theta d\phi \\
&= \int \frac{15}{2} z^2 (1-z^2) \left[w(1-z^2)^2 + z^4 - \frac{2}{3} \right]^2 [w(1-z^2) - z^2] dz d\phi \\
&= \int \frac{15}{2} \left[w^3 \left(\frac{1}{2}z^{14} - 3z^{12} + \frac{15}{2}z^{10} - 10z^8 + \frac{15}{2}z^6 - 3z^4 + \frac{1}{2}z^2 \right) \right. \\
&\quad + w^2 \left(\frac{3}{2}z^{14} - \frac{13}{2}z^{12} + \frac{31}{3}z^{10} - \frac{19}{3}z^8 - \frac{1}{2}z^6 + \frac{13}{6}z^4 - \frac{2}{3}z^2 \right) \\
&\quad + w \left(\frac{3}{2}z^{14} - 4z^{12} - \frac{13}{6}z^{10} + \frac{7}{3}z^8 - \frac{22}{9}z^6 + \frac{2}{9}z^4 + \frac{2}{9}z^2 \right) \\
&\quad \left. + \left(\frac{1}{2}z^{14} - \frac{1}{2}z^{12} - \frac{2}{3}z^{10} + \frac{2}{3}z^8 + \frac{2}{9}z^6 - \frac{2}{9}z^4 \right) \right] dz d\phi \\
&= 15\pi \left[\frac{63}{128} \left(\frac{2}{15} - \frac{12}{13} + \frac{30}{11} - \frac{40}{9} + \frac{30}{7} - \frac{12}{5} + \frac{2}{3} \right) + \frac{19}{32} \left(\frac{1}{5} + \frac{62}{33} - \frac{38}{27} - \frac{1}{7} - \frac{13}{15} - \frac{4}{9} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{3}{4} \left(\frac{1}{5} - \frac{3}{18} + \frac{13}{33} + \frac{14}{27} - \frac{44}{63} + \frac{4}{45} + \frac{4}{27} \right) + \left(\frac{1}{15} - \frac{1}{13} - \frac{4}{33} + \frac{4}{27} + \frac{4}{63} - \frac{4}{45} \right) \right] 2\pi = 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_{3-3} &= -\frac{5}{2} \int \sin^2 \theta \left(\frac{\partial q}{\partial \theta} \right)^2 q \sin \theta d\theta d\phi = \int -5(1-z^2)^2 z^2 [w(1-z^2) - z^2]^2 \left[w(1-z^2)^2 + z^4 - \frac{2}{3} \right] dz d\phi \\
&= -5 \int \left[w^3(z^{14} - 6z^{12} + 15z^{10} - 20z^8 + 15z^6 - 6z^4 + z^2) \right. \\
&\quad + w^2 \left(3z^{14} - 14z^{12} + \frac{76}{3}z^{10} - \frac{64}{3}z^8 + \frac{21}{3}z^6 + \frac{2}{3}z^4 - \frac{2}{3}z^2 \right) \\
&\quad \left. + w \left(3z^{14} - 10z^{12} + \frac{32}{3}z^{10} - 2z^8 - 3z^6 + \frac{4}{3}z^4 \right) + \left(z^{14} - 2z^{12} + \frac{1}{3}z^{10} + \frac{4}{3}z^8 - \frac{2}{3}z^6 \right) \right] dz d\phi \\
&= -10\pi \left[\frac{63}{128} \left(\frac{2}{15} - \frac{12}{13} + \frac{30}{11} - \frac{40}{9} + \frac{30}{7} - \frac{12}{5} + \frac{2}{3} \right) + \frac{19}{32} \left(\frac{6}{15} - \frac{28}{13} + \frac{152}{33} - \frac{128}{27} + \frac{42}{21} + \frac{4}{15} - \frac{4}{9} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{3}{4} \left(\frac{6}{15} - \frac{20}{13} + \frac{64}{33} - \frac{4}{9} - \frac{6}{7} + \frac{8}{15} \right) + \left(\frac{2}{15} - \frac{4}{13} + \frac{2}{33} + \frac{8}{27} - \frac{4}{21} \right) \right] 2\pi = \frac{16}{3861}\pi
\end{aligned}$$

$$I_3 = I_{3-1} + I_{3-2} + I_{3-3} = \frac{449}{648648}\pi + \frac{16}{3861}\pi = \frac{3137}{648648}\pi = \frac{16\pi}{3} \frac{3137}{3459456}$$

• γ^4 の係数の第 1 項 I_{4-1} , 第 1 項 I_{4-2} , 第 1 項 I_{4-3}

$$\begin{aligned}
I_{4-1} &= \int 4 \cos^2 \theta \left(\frac{35}{128} \right) q^4 \sin \theta d\theta d\phi = \int \frac{35}{512} z^2 \left[w(1-z^2)^2 + z^4 - \frac{2}{3} \right]^4 dz d\phi \\
&= \frac{35}{512} \int \left[w^4(z^{18} - 8z^{16} + 28z^{14} - 56z^{12} + 70z^{10} - 56z^8 + 28z^6 - 8z^4 + z^2) \right. \\
&\quad + w^3 \left(4z^{18} - 24z^{16} + \frac{172}{3}z^{14} - 64z^{12} + 20z^{10} + \frac{88}{3}z^8 - 36z^6 + 16z^4 - \frac{8}{3}z^2 \right) \\
&\quad + w^2 \left(6z^{18} - 24z^{16} + 28z^{14} + 8z^{12} - \frac{118}{3}z^{10} + \frac{64}{3}z^8 + 8z^6 - \frac{32}{3}z^4 + \frac{8}{3}z^2 \right) \\
&\quad + w \left(4z^{18} - 8z^{16} - 4z^{14} + 16z^{12} - \frac{8}{3}z^{10} - \frac{32}{3}z^8 + \frac{112}{27}z^6 + \frac{64}{27}z^4 - \frac{32}{27}z^2 \right) \\
&\quad \left. + \left(z^{18} - \frac{8}{3}z^{14} + \frac{8}{3}z^{10} - \frac{32}{27}z^6 - \frac{16}{81}z^2 \right) \right] dz d\phi \\
&= -\frac{35\pi}{256} \left[\frac{867}{2048} \left(\frac{2}{19} - \frac{16}{17} + \frac{56}{15} - \frac{112}{13} + \frac{140}{11} - \frac{112}{9} + 8 - \frac{16}{5} + \frac{2}{3} \right) \right. \\
&\quad + \frac{63}{128} \left(\frac{8}{19} - \frac{48}{17} + \frac{344}{45} - \frac{128}{13} + \frac{40}{11} + \frac{176}{27} - \frac{72}{7} + \frac{32}{5} - \frac{16}{9} \right) \\
&\quad + \frac{19}{32} \left(\frac{12}{19} - \frac{48}{17} + \frac{56}{15} + \frac{16}{13} - \frac{236}{33} + \frac{128}{27} + \frac{16}{7} - \frac{64}{15} + \frac{16}{9} \right) \\
&\quad \left. + \frac{3}{4} \left(\frac{8}{19} - \frac{16}{17} - \frac{8}{15} + \frac{32}{13} - \frac{16}{33} - \frac{64}{27} + \frac{32}{27} + \frac{128}{135} - \frac{64}{81} \right) - \left(\frac{9}{12} - \frac{16}{45} + \frac{16}{33} - \frac{64}{189} + \frac{32}{243} \right) \right] 2\pi = \frac{1351\pi}{6873984}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_{4-2} &= \int -\frac{35}{4} \sin \theta \cos \theta q^3 \frac{\partial q}{\partial \theta} \sin \theta d\theta d\phi \\
&= -\frac{35}{4} \int z^2(1-z^2) \left[w(1-z^2)^2 + z^4 - \frac{2}{3} \right]^2 [w(1-z^2) - z^2] dz d\phi \\
&= -\frac{35}{4} \int \left[w^4 \left(\frac{1}{4}z^{18} - 2z^{16} + 7z^{14} - 14z^{12} - \frac{35}{2}z^{10} - 14z^8 + 7z^6 - 2z^4 + \frac{1}{4}z^2 \right) \right. \\
&\quad + w^3 \left(z^{18} - \frac{25}{4}z^{16} + 16z^{14} - \frac{83}{4}z^{12} + \frac{25}{2}z^{10} + \frac{1}{4}z^8 - 5z^6 + \frac{11}{4}z^4 + \frac{1}{2}z^2 \right) \\
&\quad + w^2 \left(\frac{3}{2}z^{18} - \frac{27}{4}z^{16} + \frac{21}{2}z^{14} - 4z^{12} + \frac{37}{6}z^{10} + \frac{83}{12}z^8 - \frac{3}{2}z^6 - \frac{5}{6}z^4 + \frac{1}{3}z^2 \right) \\
&\quad + w \left(z^{18} - \frac{11}{4}z^{16} + z^{14} + \frac{13}{4}z^{12} - \frac{17}{6}z^{10} - \frac{2}{3}z^8 + \frac{34}{27}z^6 - \frac{5}{27}z^4 - \frac{2}{27}z^2 \right) \\
&\quad \left. + \left(\frac{1}{4}z^{18} - \frac{1}{4}z^{16} - \frac{1}{2}z^{14} + \frac{1}{2}z^{12} + \frac{1}{3}z^{10} - \frac{1}{3}z^8 - \frac{2}{27}z^6 + \frac{2}{27}z^4 \right) \right] dz d\phi \\
&= \frac{15\pi}{2} \left[\frac{867}{2048} \left(\frac{1}{38} - \frac{4}{17} + \frac{14}{15} - \frac{28}{13} + \frac{35}{11} - \frac{28}{9} + 2 - \frac{4}{5} + \frac{1}{6} \right) \right. \\
&\quad + \frac{63}{128} \left(\frac{2}{19} - \frac{35}{24} + \frac{32}{15} - \frac{83}{26} + \frac{25}{11} + \frac{1}{18} - \frac{10}{7} + \frac{11}{10} - \frac{1}{3} \right) \\
&\quad + \frac{19}{32} \left(\frac{3}{19} - \frac{27}{34} + \frac{7}{5} - \frac{8}{13} - \frac{37}{33} + \frac{83}{54} - \frac{3}{7} - \frac{1}{3} + \frac{2}{9} \right) \\
&\quad + \frac{3}{4} \left(\frac{2}{19} - \frac{11}{34} + \frac{2}{15} + \frac{1}{2} - \frac{17}{33} - \frac{4}{27} + \frac{68}{189} - \frac{2}{27} - \frac{4}{81} \right) \\
&\quad \left. + \left(\frac{1}{38} - \frac{1}{34} - \frac{1}{15} + \frac{1}{13} + \frac{2}{33} - \frac{2}{27} - \frac{4}{189} + \frac{4}{135} \right) \right] 2\pi = 0
\end{aligned}$$

$$I_{4-3} = \frac{35}{8} \int \sin^2 \theta \left(\frac{\partial q}{\partial \theta} \right)^2 q^2 \sin \theta d\theta d\phi = \frac{35}{8} \int (1-z^2)^2 z^2 [w(1-z^2) - z^2]^2 \left[w(1-z^2)^2 + z^4 - \frac{2}{3} \right]^2 dz d\phi$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{35}{8} \int [w^4(z^{18} - 8z^{16} + 28z^{14} - 56z^{12} + 70z^{10} - 56z^8 + 28z^6 - 8z^4 + z^2) \\
&+ w^3(4z^{18} - 26z^{16} + \frac{212}{3}z^{14} - 102z^{12} + 80z^{10} - \frac{82}{3}z^8 - 4z^6 + 6z^4 + \frac{4}{3}z^2) \\
&+ w^2(6z^{18} - 30z^{16} + 57z^{14} - \frac{136}{3}z^{12} + \frac{16}{9}z^{10} + \frac{182}{9}z^8 - 11z^6 + \frac{8}{9}z^4 + \frac{4}{9}z^2) \\
&+ w(4z^{18} - 14z^{16} + 14z^{14} + \frac{10}{3}z^{12} - \frac{118}{9}z^{10} + \frac{16}{3}z^8 + \frac{4}{3}z^6 - \frac{8}{9}z^4) \\
&+ (z^{18} - 2z^{16} - \frac{1}{3}z^{14} + \frac{8}{3}z^{12} - \frac{8}{9}z^{10} - \frac{8}{9}z^8 + \frac{4}{4}z^6)] dzd\phi \\
&= \frac{35\pi}{4} \left[\frac{867}{2048} \left(\frac{2}{19} - \frac{16}{17} + \frac{56}{15} - \frac{112}{13} + \frac{140}{11} - \frac{112}{9} + 8 - \frac{16}{5} + \frac{2}{3} \right) \right. \\
&+ \frac{63}{128} \left(\frac{8}{19} - \frac{52}{17} + \frac{424}{45} - \frac{204}{13} + \frac{160}{11} - \frac{164}{27} - \frac{8}{7} + \frac{12}{5} - \frac{8}{9} \right) \\
&+ \frac{19}{32} \left(\frac{12}{19} - \frac{60}{17} + \frac{38}{5} - \frac{272}{39} + \frac{32}{99} + \frac{364}{81} - \frac{22}{7} - \frac{16}{45} + \frac{8}{27} \right) \\
&+ \frac{3}{4} \left(\frac{8}{19} - \frac{28}{17} + \frac{28}{15} + \frac{20}{39} - \frac{236}{99} + \frac{32}{27} + \frac{8}{21} - \frac{16}{45} \right) \\
&\left. + \left(\frac{2}{19} - \frac{4}{17} - \frac{2}{45} + \frac{16}{39} - \frac{16}{99} - \frac{16}{81} + \frac{8}{63} \right) \right] 2\pi = \frac{926}{196911}\pi \\
I_4 = I_{4-1} + I_{4-2} + I_{4-3} &= \frac{1351}{6873984}\pi + \frac{926}{196911}\pi = \frac{370445}{75613824}\pi = \frac{16\pi}{3} \frac{370445}{403273728}
\end{aligned}$$

• γ^5 の係数の第 1 項 I_{5-1} , 第 1 項 I_{5-2} , 第 1 項 I_{5-3}

$$\begin{aligned}
I_{5-1} &= \int 4 \cos^2 \theta \left(-\frac{63}{256} \right) q^5 \sin \theta d\theta d\phi = -\frac{63}{2048} \int z^2 \left[w(1-z^2)^2 + z^4 - \frac{2}{3} \right]^5 dzd\phi \\
&= -\frac{63}{2048} \int [w^5(z^{22} - 10z^{20} + 45z^{18} - 120z^{16} + 210z^{14} - 252z^{12} + 210z^{10} - 120z^8 + 45z^6 - 10z^4 + z^2) \\
&+ w^4(5z^{22} - 40z^{20} + \frac{410}{3}z^{18} - \frac{760}{3}z^{16} + \frac{770}{3}z^{14} - \frac{280}{3}z^{12} - \frac{280}{3}z^{10} + \frac{440}{3}z^8 - \frac{265}{3}z^6 + \frac{80}{3}z^4 - \frac{10}{3}z^2) \\
&+ w^3(10z^{22} - 60z^{20} + \frac{410}{3}z^{18} - 120z^{16} + \frac{410}{9}z^{14} + 180z^{12} - \frac{370}{3}z^{10} - \frac{80}{9}z^8 + \frac{160}{3}z^6 - \frac{80}{3}z^4 + \frac{40}{3}z^2) \\
&+ w^2(10z^{22} - 40z^{20} + 40z^{18} + 40z^{16} - \frac{290}{3}z^{14} + \frac{80}{3}z^{12} + \frac{1540}{27}z^{10} - \frac{1120}{27}z^8 - \frac{40}{9}z^6 + \frac{320}{27}z^4 - \frac{80}{27}z^2) \\
&+ w(5z^{22} - 10z^{20} - \frac{25}{3}z^{18} + \frac{80}{3}z^{16} - \frac{80}{3}z^{12} + \frac{200}{27}z^{10} + \frac{320}{27}z^8 - \frac{400}{81}z^6 - \frac{160}{81}z^4 - \frac{80}{81}z^2) \\
&+ (z^{22} - \frac{10}{3}z^{18} + \frac{40}{9}z^{14} - \frac{80}{27}z^{10} + \frac{80}{81}z^6 - \frac{32}{243}z^2)] dzd\phi \\
&= -\frac{63}{2048} \left[\frac{3069}{8192} \left(\frac{2}{23} - \frac{20}{21} + \frac{90}{19} - \frac{240}{17} + 28 - \frac{504}{13} + \frac{420}{11} - \frac{80}{3} + \frac{90}{7} - 4 + \frac{2}{3} \right) \right. \\
&+ \frac{867}{2048} \left(\frac{10}{23} - \frac{80}{21} + \frac{820}{57} - \frac{1520}{51} + \frac{308}{9} - \frac{560}{39} - \frac{560}{33} + \frac{880}{27} - \frac{530}{21} + \frac{32}{3} - \frac{20}{9} \right) \\
&+ \frac{63}{128} \left(\frac{20}{23} - \frac{40}{7} + \frac{820}{57} - \frac{240}{17} - \frac{164}{27} + \frac{360}{13} - \frac{740}{33} - \frac{160}{81} + \frac{320}{21} - \frac{32}{3} + \frac{80}{27} \right) \\
&+ \frac{19}{32} \left(\frac{20}{23} - \frac{80}{21} + \frac{80}{19} + \frac{80}{17} - \frac{116}{9} + \frac{160}{39} + \frac{280}{27} - \frac{2240}{243} - \frac{80}{63} + \frac{128}{27} - \frac{160}{81} \right) \\
&\left. + \frac{3}{4} \left(\frac{10}{23} - \frac{20}{21} - \frac{50}{57} + \frac{160}{51} - \frac{160}{39} + \frac{400}{297} + \frac{640}{243} - \frac{800}{567} - \frac{64}{81} + \frac{160}{243} \right) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left(\frac{2}{23} - \frac{20}{57} + \frac{16}{27} - \frac{160}{297} + \frac{160}{567} - \frac{64}{729} \right) \Big] 2\pi = \frac{17231}{1915550208}\pi \\
I_{5-2} &= \int 4 \sin \theta \cos \theta \frac{35}{128} \frac{\partial q}{\partial \theta} q^4 \sin \theta d\theta d\phi = \frac{35}{32} \int 2z^2(1-z^2) \frac{1}{16} \left[w(1-z^2)^2 + z^4 - \frac{2}{3} \right]^4 [w(1-z^2) - z^2] dz d\phi \\
&= \frac{35}{32} \int \left[w^5 \left(\frac{1}{8} z^{22} - \frac{5}{4} z^{20} + \frac{45}{8} z^{18} - 15z^{16} + \frac{105}{4} z^{14} - \frac{63}{2} z^{12} + \frac{105}{4} z^{10} - 15z^8 + \frac{45}{8} z^6 - \frac{5}{4} z^4 + \frac{1}{8} z^2 \right) \right. \\
&+ w^4 \left(\frac{5}{8} z^{22} - \frac{41}{8} z^{20} + \frac{109}{6} z^{18} - \frac{215}{6} z^{16} + \frac{497}{12} z^{14} - \frac{301}{12} z^{12} + \frac{7}{6} z^{10} + \frac{61}{6} z^8 - \frac{185}{24} z^6 + \frac{61}{24} z^4 - \frac{1}{3} z^2 \right) \\
&+ w^3 \left(\frac{5}{4} z^{22} - 8z^{20} + \frac{245}{12} z^{18} - \frac{145}{6} z^{16} + \frac{85}{12} z^{14} + \frac{44}{3} z^{12} - \frac{209}{12} z^{10} + \frac{35}{6} z^8 + \frac{5}{3} z^6 - \frac{5}{3} z^4 + \frac{1}{3} z^2 \right) \\
&+ w^2 \left(\frac{5}{4} z^{22} - \frac{23}{4} z^{20} + \frac{17}{2} z^{18} - \frac{1}{2} z^{16} - \frac{43}{4} z^{14} + \frac{107}{12} z^{12} + \frac{32}{27} z^{10} - \frac{119}{27} z^8 + \frac{13}{9} z^6 + \frac{7}{27} z^4 - \frac{4}{27} z^2 \right) \\
&+ w \left(\frac{5}{8} z^{22} - \frac{7}{4} z^{20} + \frac{7}{24} z^{18} + \frac{19}{6} z^{16} - \frac{7}{3} z^{14} - \frac{5}{3} z^{12} + \frac{55}{27} z^{10} + \frac{2}{27} z^8 - \frac{46}{81} z^6 + \frac{8}{81} z^4 + \frac{2}{81} z^2 \right) \\
&+ \left. \left(\frac{1}{8} z^{22} - \frac{1}{8} z^{20} - \frac{1}{3} z^{18} + \frac{1}{3} z^{16} + \frac{1}{3} z^{14} - \frac{1}{3} z^{12} - \frac{4}{27} z^{10} + \frac{4}{27} z^8 + \frac{2}{81} z^6 - \frac{2}{81} z^4 \right) \right] dz d\phi \\
&= \frac{35}{32} \left[\frac{3069}{8192} \left(\frac{1}{92} - \frac{5}{42} + \frac{45}{76} - \frac{30}{17} + \frac{7}{2} - \frac{63}{13} + \frac{105}{22} - \frac{10}{3} + \frac{45}{28} - \frac{1}{2} + \frac{1}{12} \right) \right. \\
&+ \frac{867}{2048} \left(\frac{5}{92} - \frac{41}{84} + \frac{109}{57} - \frac{215}{51} + \frac{497}{90} - \frac{301}{78} + \frac{7}{33} + \frac{61}{27} - \frac{185}{84} + \frac{61}{60} - \frac{2}{9} \right) \\
&+ \frac{63}{128} \left(\frac{5}{46} - \frac{16}{21} + \frac{245}{114} - \frac{145}{51} + \frac{17}{18} + \frac{88}{39} - \frac{19}{6} + \frac{35}{27} + \frac{10}{21} - \frac{2}{3} + \frac{2}{9} \right) \\
&+ \frac{19}{32} \left(\frac{5}{46} - \frac{23}{42} + \frac{17}{19} - \frac{1}{17} - \frac{43}{30} + \frac{107}{78} + \frac{64}{297} - \frac{238}{243} + \frac{26}{63} + \frac{14}{135} - \frac{8}{81} \right) \\
&+ \frac{3}{4} \left(\frac{5}{92} - \frac{1}{6} + \frac{7}{228} + \frac{19}{51} - \frac{14}{45} - \frac{10}{39} + \frac{10}{27} + \frac{4}{243} - \frac{92}{567} + \frac{16}{405} + \frac{4}{243} \right) \\
&+ \left. \left(\frac{1}{92} - \frac{1}{84} - \frac{2}{57} + \frac{2}{51} + \frac{2}{45} - \frac{2}{39} - \frac{8}{297} + \frac{8}{243} + \frac{4}{567} - \frac{4}{405} \right) \right] 2\pi = 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_{5-3} &= \int \sin^2 \theta \left(\frac{\partial q}{\partial \theta} \right)^2 \left(-\frac{105}{16} \right) q^3 \sin \theta d\theta d\phi = -\frac{105}{16} \int (1-z^2) 4[w(1-z^2) - z^2] \frac{1}{8} \left[w(1-z^2)^2 + z^4 - \frac{2}{3} \right]^3 dz d\phi \\
&= -\frac{105}{32} \int \left[w^5 (z^{22} - 10z^{20} + 45z^{18} - 120z^{16} + 210z^{14} - 252z^{12} + 210z^{10} - 120z^8 + 45z^6 - 10z^4 + z^2) \right. \\
&+ w^4 (5z^{22} - 42z^{20} + 154z^{18} - 320z^{16} + 406z^{14} - 308z^{12} + 112z^{10} + 16z^8 - 35z^6 + 14z^4 - 2z^2) \\
&+ w^3 \left(10z^{22} - 68z^{20} + 191z^{18} - 274z^{16} + \frac{547}{3} z^{14} + 12z^{12} - 107z^{10} + \frac{202}{3} z^8 - 11z^6 - 4z^4 + \frac{4}{3} z^2 \right) \\
&+ w^2 \left(10z^{22} - 52z^{20} + 99z^{18} - 64z^{16} - 42z^{14} + \frac{256}{3} z^{12} - \frac{935}{27} z^{10} - \frac{292}{27} z^8 + \frac{98}{9} z^6 - \frac{40}{27} z^4 - \frac{8}{27} z^2 \right) \\
&+ w \left(5z^{22} - 18z^{20} + 16z^{18} + 14z^{16} - 29z^{14} + \frac{20}{3} z^{12} + \frac{308}{27} z^{10} - \frac{56}{9} z^8 - \frac{4}{9} z^6 + \frac{16}{27} z^4 \right) \\
&+ \left. \left(z^{22} - 2z^{20} - z^{18} + 4z^{16} - \frac{2}{3} z^{14} - \frac{8}{3} z^{12} + \frac{28}{27} z^{10} + \frac{16}{27} z^8 - \frac{8}{27} z^6 \right) \right] dz d\phi \\
&= -\frac{105}{32} \left[\frac{3069}{8192} \left(\frac{2}{23} - \frac{20}{21} + \frac{90}{19} - \frac{240}{17} + 28 - \frac{504}{13} + \frac{420}{11} - \frac{80}{3} + \frac{90}{7} - 4 + \frac{2}{3} \right) \right. \\
&+ \frac{867}{2048} \left(\frac{10}{23} - 4 + \frac{309}{19} - \frac{640}{17} + \frac{812}{15} - \frac{616}{13} + \frac{224}{11} + \frac{32}{9} - 10 + \frac{28}{5} - \frac{4}{3} \right) \\
&+ \frac{63}{128} \left(\frac{20}{23} - \frac{136}{21} + \frac{382}{19} - \frac{548}{17} + \frac{1094}{45} + \frac{24}{13} - \frac{214}{11} + \frac{404}{27} - \frac{22}{7} - \frac{8}{5} + \frac{8}{9} \right) \\
&+ \left. \left(\frac{1}{92} - \frac{1}{84} - \frac{2}{57} + \frac{2}{51} + \frac{2}{45} - \frac{2}{39} - \frac{8}{297} + \frac{8}{243} + \frac{4}{567} - \frac{4}{405} \right) \right] 2\pi = 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{19}{32} \left(\frac{20}{23} - \frac{104}{21} + \frac{198}{19} - \frac{128}{17} - \frac{28}{5} + \frac{512}{39} - \frac{170}{27} - \frac{584}{243} + \frac{28}{9} - \frac{16}{27} - \frac{16}{81} \right) \\
& + \frac{3}{4} \left(\frac{10}{23} - \frac{12}{7} + \frac{32}{19} + \frac{28}{17} - \frac{58}{15} + \frac{40}{39} + \frac{56}{27} - \frac{112}{81} - \frac{8}{63} + \frac{32}{135} \right) \\
& + \left(\frac{2}{23} - \frac{4}{21} - \frac{2}{19} + \frac{8}{17} - \frac{4}{45} - \frac{16}{39} + \frac{56}{297} + \frac{32}{243} - \frac{16}{189} + \right) \Big] 2\pi = \frac{773}{7482618}\pi \\
I_5 = I_{5-1} + I_{5-2} + I_{5-3} = & \frac{17231}{1915550208}\pi + \frac{773}{7482618}\pi = \frac{215119}{1915550208}\pi = \frac{16\pi}{3} \frac{215119}{10216267776}
\end{aligned}$$

8 ホール導電率の式 (77) の積分計算

式 (77) の積分計算する部分は

$$I = \int \left[\left(1 - \frac{5}{2}\gamma q + \frac{35}{8}\gamma^2 q^2 - \frac{105}{16}\gamma^3 q^3 + \frac{1155}{128}\gamma^4 q^4 \dots \right) (a_0 + a_1\gamma)(b_0 + b_1\gamma + b_2\gamma^2) \right] \sin\theta d\theta d\phi$$

である。\$I\$ を \$\gamma\$ の冪級数にして \$\gamma^i\$ の係数を \$I_i\$ とすると、

$$I_0 = \int a_0 b_0 \sin\theta d\theta d\phi \quad (85)$$

$$I_1 = \int \left[(a_0 b_1 + a_1 b_0) - \frac{5}{2} a_0 b_0 q \right] \sin\theta d\theta d\phi \quad (86)$$

$$I_2 = \int \left[(a_1 b_1 + a_0 b_2) - \frac{5}{2} (a_0 b_1 + a_1 b_0) q + \frac{35}{8} a_0 b_0 q^2 \right] \sin\theta d\theta d\phi \quad (87)$$

$$I_3 = \int \left[a_1 b_2 - \frac{5}{2} (a_1 b_1 + a_0 b_2) q + \frac{35}{8} (a_0 b_1 + a_1 b_0) q^2 - \frac{105}{16} a_0 b_0 q^3 \right] \sin\theta d\theta d\phi \quad (88)$$

$$I_4 = \int \left[-\frac{5}{2} a_1 b_2 q + \frac{35}{8} (a_1 b_1 + a_0 b_2) q^2 - \frac{105}{16} (a_0 b_1 + a_1 b_0) q^3 + \frac{1155}{128} a_0 b_0 q^4 \right] \sin\theta d\theta d\phi \quad (89)$$

である。

- \$\gamma^0\$ の係数の計算

$$I_0 = \int a_0 b_0 \sin\theta d\theta d\phi = \int 8 \sin^2 \phi \sin^2 \theta \sin\theta d\theta d\phi = 8\pi \int_{-1}^1 (1-z^2) dz = \frac{32}{3}\pi$$

- \$\gamma^1\$ の係数の計算

被積分関数のうち、

$$a_0 b_1 = 2 \sin\phi \sin\theta \left(8q \sin\phi \sin\theta + 2 \frac{\partial q}{\partial \theta} \cos\phi \sin\theta + 6 \frac{\partial q}{\partial \phi} \cos\phi \cos\theta \cot\theta + 2 \frac{\partial^2 q}{\partial \theta^2} \sin\phi \sin\theta - 2 \frac{\partial^2 q}{\partial \phi \partial \theta} \cos\phi \cos\theta \right)$$

で第 2,3,5 項は \$\phi\$ の積分で 0 になる。したがって、

$$\begin{aligned}
\int a_0 b_1 \sin\theta d\theta d\phi &= \int 2(8q \sin^2 \phi \sin^2 \theta + 2 \frac{\partial^2 q}{\partial \theta^2} \sin^2 \phi \sin^2 \theta) \sin\theta d\theta d\phi \\
&= 2\pi \int \left\{ 8 \left[\frac{3}{4}(1-z^2)^2 + z^4 - \frac{2}{3} \right] \frac{1}{2}(1-z^2) + 2(1-z^2)[2(2z^2-1) \left(\frac{3}{4} - \frac{7}{4}z^2 \right) + 7z^2(1-z^2)] \right\} dz \\
&= 2\pi \int \left(-\frac{8}{3} + \frac{71}{3}z^2 - 42z^4 + 21z^6 \right) dz = -\frac{32}{45}\pi
\end{aligned}$$

次に,

$$a_1 b_0 = 2q \sin \phi \sin \theta + \frac{\partial q}{\partial \theta} \sin \phi \cos \theta + \frac{\partial q}{\partial \phi} \frac{\cos \phi}{\sin \theta} 4 \sin \phi \sin \theta$$

の積分で, 第3項は ϕ の積分で0になるから,

$$\begin{aligned} \int a_1 b_0 \sin \theta d\theta d\phi &= \int \left(2q \sin \phi \sin \theta + \frac{\partial q}{\partial \theta} \sin \phi \cos \theta \right) 4 \sin \phi \sin \theta \sin \theta d\theta d\phi \\ &= \int [(w \sin^4 \theta + \cos^4 \theta - \frac{2}{3}) + 2 \cos^2 \theta (w \sin^2 \theta - \cos^2 \theta)] 4 \sin^2 \phi \sin^2 \theta \sin \theta d\theta d\phi \\ &= 2\pi \int \left\{ 2 \left[\frac{3}{4}(1-z^2)^2 + z^4 - \frac{2}{3} \right] (1-z^2) + 4z^2(1-z^2) \left(\frac{3}{4} - \frac{7}{4}z^2 \right) \right\} dz \\ &= 2\pi \int \left(\frac{7}{2}z^6 - \frac{7}{2}z^4 - \frac{1}{6}z^2 + \frac{1}{6} \right) dz = -\frac{16}{45}\pi \end{aligned}$$

である. 最後に,

$$\begin{aligned} \int a_0 b_0 q \sin \theta d\theta d\phi &= \int 8 \sin^2 \phi \sin^2 \theta \frac{1}{2} \left[(w \sin^4 \theta + \cos^4 \theta - \frac{2}{3}) \right] \sin \theta d\theta d\phi \\ &= 2\pi \int 2(1-z^2) \left[\frac{3}{4}(1-z^2)^2 + z^4 - \frac{2}{3} \right] dz \\ &= 2\pi \int \left(-\frac{7}{2}z^6 + \frac{13}{2}z^4 - \frac{19}{6}z^2 + \frac{1}{6} \right) dz = -\frac{16}{45}\pi \end{aligned}$$

となり, したがって,

$$\begin{aligned} I_1 &= \int \left(a_0 b_1 + a_1 b_0 - \frac{5}{2} a_0 b_0 q \right) \sin \theta d\theta d\phi \\ &= -\frac{32\pi}{45} - \frac{16\pi}{45} - \frac{5}{2} \left(-\frac{16\pi}{45} \right) = -\frac{8\pi}{45} = \frac{32\pi}{3} \left(-\frac{1}{60} \right) = \frac{32\pi}{3} (-0.0166667) \end{aligned}$$

となる. 残りは後日.

参考文献

- [1] B. Lax and J. G. Mavroides, Phys. Rev. **100**, 1650 (1955).