楕円体エネルギー面のホール係数を McClure 理論で求める（一般的な計算法との比較）

2015.11.28　　鈴木　実

1　はじめに

McClure 理論 [1, 2] を用いると，バンドの等エネルギー面が球面ではない一般的なエネルギー面でもホール係数などの輸送係数を計算することができる．バンド構造の，すなわちエネルギー面のフーリエ級数展開が用いられるので，最終的には数値計算が必要になると考えられるが，それでも計算できるようになるところがすごいところである．最近ではコンピュータは高性能になり計算技術もすぐれているので数値計算をすることはほとんど問題にならないからである．

McClure 理論がどのようなものか，感触を調べるために，楕円体のエネルギー面を有する半導体の導電率とホール係数の計算に応用してみよう．楕円体エネルギー面の場合のホール係数計算なら，テンソル表示の式から出発しても普通に計算できるが，両方を比較することにより，計算法の確認ができるので有用である．また，未知の対象に応用する場合にも，手引になるかもしれない．最初に McClure 理論を適用して計算した場合，後半にテンソル表示による普通の計算法を示す．

2　McClure の理論を適用した計算

n 形の半導体を考える．楕円体エネルギー面の中心が $\mathbf{k}$ 空間の原点にない場合は中心が原点に位置するように適当な座標変換を施す．この座標変換で楕円体の主軸が座標軸に一致するようにできる．ただし，キャリアの散乱は谷内 (intraband scattering) のみで，谷間散乱 (interband scattering) は無視できるとする．電子のエネルギー $\mathscr{E}$ は電子の波数 $\mathbf{k}$ の成分を用いて

$$\mathscr{E} = \frac{\hbar^2}{2m_x}k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m_y}k_y^2 + \frac{\hbar^2}{2m_z}k_z^2 \tag{1}$$

と書くことができる．$\mathbf{k}$ の電子の速度 $\mathbf{v}$ は

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial \mathbf{k}} \tag{2}$$

である．

McClure の理論では hodograph における $\mathbf{v}$ の平均を計算する必要がある．hodograph は磁場があるときに，波数ベクトルが $\mathbf{k}$ 空間で運動する閉曲線を意味する．この閉曲線は等エネルギー面と磁場に垂直な面との交線である．なぜそうなるのかは次の $\mathbf{k}$ の運動方程式を見ればわかる．

$$\hbar\dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{v} \times \mathbf{B} \tag{3}$$

実際には $\mathbf{v}$ のうち $\mathbf{B}$ と直交する成分のみが意味を持つ．これを $\mathbf{v}_p$ とする．$\mathbf{B}$ 方向の単位ベクトルを $\mathbf{e}_B$ と書くと，$\mathbf{k}$ には $\mathbf{e}_B \times \mathbf{v}_p$ 方向に力が働き，その方向に運動することがわかる．つまり，$\mathbf{v}$ は等エネルギー面に直角で，$\mathbf{k}$ は $\mathbf{v}$ と $\mathbf{B}$ の両方に垂直な方向に運動する．

2.1 座標変換

式 (10) からわかるように，$\mathscr{E}$ 一定の面は k 一定の面とは一致しない．これは数式の取扱い上不便である．それで次の変数変換を施して，$\mathscr{E}$ 一定の面と変数が一定になる面を一致させる．

$$k_x = \sqrt{m_x}\rho_x \tag{4}$$
$$k_y = \sqrt{m_y}\rho_y \tag{5}$$
$$k_z = \sqrt{m_z}\rho_z \tag{6}$$

ここで，$\rho^2 = \rho_x^2 + \rho_y^2 + \rho_z^2$ である．これにより式 (10) は

$$\mathscr{E} = \frac{\hbar^2}{2}\rho_x^2 + \frac{\hbar^2}{2}\rho_y^2 + \frac{\hbar^2}{2}\rho_z^2 = \frac{\hbar^2}{2}\rho^2 \tag{7}$$

となる．これから $\mathscr{E}$ 一定の面は ρ 一定の面になることがわかる．

式 (2) より，

$$\mathbf{v} = \left(\frac{\hbar}{\sqrt{m_x}}\rho_x, \frac{\hbar}{\sqrt{m_y}}\rho_y, \frac{\hbar}{\sqrt{m_z}}\rho_z\right) \tag{8}$$

となる．hodograph の面では $k_z = \sqrt{m_z}\rho_z = 一定$ であるので，

$$\rho'^2 = \rho^2 - \rho_z^2 = \rho_x^2 + \rho_y^2 \tag{9}$$

としよう．したがって，hodograph 上では $\rho' = 一定$ となる．また，

$$\rho'_x = \rho'\cos\theta, \quad \rho'_y = \rho'\sin\theta \tag{10}$$

の関係が成り立つ．

hogograph の面内で考えると，ρ'_z は一定で，hodograph 上の $\mathbf{k}$ の速度 $\mathbf{v}$ は

$$v_x = \frac{\hbar}{\sqrt{m_x}}\rho'_x = \frac{\hbar}{\sqrt{m_x}}\rho'\cos\theta = \frac{\hbar}{\sqrt{m_x}}\rho'\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta}}{2} \tag{11}$$
$$v_y = \frac{\hbar}{\sqrt{m_y}}\rho'_y = \frac{\hbar}{\sqrt{m_y}}\rho'\sin\theta = \frac{\hbar}{\sqrt{m_y}}\rho'\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta}}{2\mathrm{i}} \tag{12}$$

となる．したがって，エントリー 2015/11/21 の式 (11) による $\mathbf{v}$ の成分は

$$v_{x,1} = \frac{\hbar}{2\sqrt{m_x}}\rho' \quad v_{x,-1} = \frac{\hbar}{2\sqrt{m_x}}\rho' \tag{13}$$
$$v_{y,1} = \frac{\hbar}{2\mathrm{i}\sqrt{m_y}}\rho' \quad v_{y,-1} = -\frac{\hbar}{2\mathrm{i}\sqrt{m_y}}\rho' \tag{14}$$

のみが 0 と異なり，他の成分は全て 0 である．これを用いるとエントリー 2015/11/21 の式 (23)，(24) のテンソル $\widetilde{S}$ の成分は次のように計算できる．

$$S_{xx} = \sum_{m=1}^{\infty}\frac{2|v_{x,m}|^2}{1+(\omega\tau)^2} = \frac{2v_{x,1}^2}{1+(\omega\tau)^2} = \frac{\hbar^2\rho'^2}{2m_x}\frac{1}{1+(\omega\tau)^2} \tag{15}$$
$$S_{xy} = \sum_{m=1}^{\infty}\left[\frac{v_{x,m}v_{y,-m} + v_{x,-m}v_{y,m}}{1+(\omega\tau)^2} + \mathrm{i}m\omega\tau\frac{v_{x,m}v_{y,-m} - v_{x,-m}v_{y,m}}{1+(\omega\tau)^2}\right] \tag{16}$$
$$= \mathrm{i}\omega\tau\frac{v_{x,1}v_{y,-1} - v_{x,-1}v_{y,1}}{1+(\omega\tau)^2} = -\frac{\hbar^2\rho'^2}{2\sqrt{m_x m_y}} \tag{17}$$

2.2　周期の計算

テンソル $\widetilde{S}$ を用いれば導電率，ホール係数は計算できるが，その前に上の式に含まれる ω を計算しておかなければならない．ω は hodograph を $\mathbf{k}$ が一周する時間，つまり周期 T から $\omega = 2\pi_T$ で与えられる．一方，T は $\mathrm{d}k$ を hodograph 上の微小部分とすると，

$$T = \oint \frac{\mathrm{d}k}{\dot{k}} \tag{18}$$

で与えられる．一方，$\mathbf{k}$ の運動方程式は

$$\hbar\dot{\mathbf{k}} = -e\mathbf{v} \times \mathbf{B} \tag{19}$$

で与えられる．$\mathbf{v}$ は $\mathscr{E}$ の勾配，すなわち $\mathbf{k}$ のおける $\mathscr{E}$ の法線方向であるから，$\mathbf{v}$ の $\mathbf{B}$(z 軸方向) と垂直な成分を $\mathbf{v}_p$ とすると，$\dot{\mathbf{k}}$ の方向は $\mathbf{v}_p$ を z 軸の回りに $\pi/2$ 回転した方向である．したがって，$\mathbf{B}$ 方向の単位ベクトルを $\mathbf{e}_B$ とすると，$\dot{\mathbf{k}}$ の方向をもつ長さ $\mathrm{d}k$ を $\mathrm{d}\theta$ の回転による $\mathbf{k}$ の変位とすれば，

$$\mathrm{d}k = (\mathbf{e}_B \times \frac{\mathbf{v}_p}{v_p}) \cdot \mathrm{d}\mathbf{k} \tag{20}$$

である．したがって，

$$T = \oint \frac{\mathrm{d}k}{\dot{k}} = \oint \frac{\hbar}{ev_pB} = \oint \frac{\hbar(\mathbf{e}_B \times \mathbf{v}_p) \cdot \mathrm{d}\mathbf{k}}{ev_p^2B} \tag{21}$$

である．これに以下の初関係を代入する．

$$\begin{aligned}
\mathbf{k} &= (k_x, k_y) = \left(\sqrt{m_x}\rho' \cos\theta, \sqrt{m_y}\rho' \sin\theta\right) \\
\mathrm{d}\mathbf{k} &= \left(\frac{\partial k_x}{\partial\theta}, \frac{\partial k_y}{\partial\theta}\right) = \left(-\sqrt{m_x}\rho' \sin\theta, \sqrt{m_y}\rho' \cos\theta\right) \\
\mathbf{v}_p &= \left(\frac{\hbar\rho'}{\sqrt{m_x}} \cos\theta, \frac{\hbar\rho'}{\sqrt{m_y}} \sin\theta\right) \\
\mathbf{e}_B \times \mathbf{v}_p &= \left(\frac{\hbar\rho'}{-\sqrt{m_y}} \sin\theta, \frac{\hbar\rho'}{\sqrt{m_x}} \cos\theta\right)
\end{aligned}$$

ただし，k_z 成分を省略した．そうすると，

$$T = \int_0^{2\pi} \frac{\hbar}{eB} \frac{\hbar\rho'^2\sqrt{\dfrac{m_x}{m_y}}\sin^2\theta + \hbar\rho'^2\sqrt{\dfrac{m_y}{m_x}}\cos^2\theta}{\dfrac{\hbar^2\rho'^2}{m_x}\cos^2\theta + \dfrac{\hbar^2\rho'^2}{m_y}\sin^2\theta} = \frac{2\pi\sqrt{m_xm_y}}{eB} \tag{22}$$

となり，

$$\omega = \frac{2\pi}{T} = \frac{eB}{\sqrt{m_xm_y}} \tag{23}$$

という結果が得られる．

2.3　導電率の計算

[2] の式 (18)–(20) から，

$$\mathbf{J} = -\frac{e^2}{4\pi^3} \int \tau\mathbf{M}\frac{\partial f_0}{\partial\mathscr{E}}\mathrm{d}\mathbf{k} = -\frac{e^2}{4\pi^3} \int \tau\widetilde{S}\mathbf{E}\frac{\partial f_0}{\partial\mathscr{E}}\mathrm{d}\mathbf{k} \tag{24}$$

である．したがって，導電率テンソル $\widetilde{\sigma}$ は

$$\widetilde{\sigma} = -\frac{e^2}{4\pi^3} \int \tau\widetilde{S}\frac{\partial f_0}{\partial\mathscr{E}}\mathrm{d}\mathbf{k} \tag{25}$$

である．式 (15) を用いると，

$$
\begin{aligned}
\sigma_{xx} &= -\frac{e^2}{4\pi^3}\int \tau S_{xx}\frac{\partial f_0}{\partial \mathscr{E}}\mathrm{d}\mathbf{k} \\
&= -\frac{e^2}{4\pi^3}\int \tau \frac{\hbar^2\rho'^2}{2m_x}\frac{1}{1+(\omega\tau)^2}\frac{\partial f_0}{\partial \mathscr{E}}\mathrm{d}\mathbf{k} \\
&= \frac{e^2\hbar^2}{8\pi^3 k_{\mathrm{B}}T}\sqrt{\frac{m_y m_z}{m_x}}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_{\mathrm{F}}-\mathscr{E}_{\mathrm{c}})/k_{\mathrm{B}}T}\int \tau\frac{\rho'^2}{1+(\omega\tau)^2}\mathrm{e}^{-\mathscr{E}/k_{\mathrm{B}}T}\mathrm{d}\rho'_x\mathrm{d}\rho'_y\mathrm{d}\rho'_z
\end{aligned}
$$

となる．ただし，最後の式では変数変換 (4)–(6) を施した．最初に ρ'_z の積分から行う．$\rho'^2=\rho^2-\rho_z^2$ であるから，ρ_z の積分範囲は $-\rho$ から ρ までである．積分の部分だけを取り出すと，

$$
I=\int_{-\rho}^{\rho}\rho'^2\mathrm{d}\rho_z = 2\int_0^{\rho}\rho'^2\mathrm{d}\rho_z = 2\int_0^{\rho}\frac{\rho'^3}{\rho_z}\mathrm{d}\rho' = 2\int_0^{\rho}\frac{\rho'^3}{\sqrt{\rho^2-\rho'^2}}\mathrm{d}\rho' = \frac{4}{3}\rho^3 \tag{26}
$$

となる[1]．ρ_z による積分により，次式を得る．

$$
\sigma_{xx} = \frac{e^2\hbar^2}{6\pi^3 k_{\mathrm{B}}T}\sqrt{\frac{m_y m_z}{m_x}}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_{\mathrm{F}}-\mathscr{E}_{\mathrm{c}})/k_{\mathrm{B}}T}\int \tau\frac{\rho^3}{1+(\omega\tau)^2}\mathrm{e}^{-\mathscr{E}/k_{\mathrm{B}}T}\mathrm{d}\rho'_x\mathrm{d}\rho'_y \tag{27}
$$

磁場が存在しないとき，$\omega=0$ である．散乱は音響フォノンによる散乱のみを考えて，

$$
\tau = l\mathscr{E}^{-\lambda} \tag{28}
$$

とする．ρ_x と ρ_y を ρ，θ の円座標に変換すると，

$$
\mathrm{d}\rho_x\mathrm{d}\rho_y = 2\pi\rho\mathrm{d}\rho, \quad \frac{\hbar^2}{2}\rho^2=\mathscr{E}, \quad \rho=\sqrt{\frac{2\mathscr{E}}{\hbar^2}}, \quad \rho\mathrm{d}\rho=\frac{1}{\hbar^2}\mathrm{d}\mathscr{E}
$$

であるから，

$$
\begin{aligned}
\sigma_{xx} &= \frac{e^2\hbar^2 l}{3\pi^2 k_{\mathrm{B}}T}\sqrt{\frac{m_y m_z}{m_x}}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_{\mathrm{F}}-\mathscr{E}_{\mathrm{c}})/k_{\mathrm{B}}T}\int\left(\frac{2\mathscr{E}}{\hbar^2}\right)^{3/2}\mathscr{E}^{-\lambda}\mathrm{e}^{-\mathscr{E}/k_{\mathrm{B}}T}\frac{1}{\hbar^2}\mathrm{d}\mathscr{E} \\
&= \frac{e^2\hbar^2 l}{3\pi^2 k_{\mathrm{B}}T}\sqrt{\frac{m_y m_z}{m_x}}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_{\mathrm{F}}-\mathscr{E}_{\mathrm{c}})/k_{\mathrm{B}}T}\left(\frac{2}{\hbar^2}\right)^{3/2}(k_{\mathrm{B}}T)^{5/2-\lambda}\Gamma(\frac{5}{2}-\lambda)\frac{1}{\hbar^2} \\
&= \frac{e^2 l}{3\sqrt{2}\pi^2 k_{\mathrm{B}}T\hbar^3}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_{\mathrm{F}}-\mathscr{E}_{\mathrm{c}})/k_{\mathrm{B}}T}\sqrt{\frac{m_y m_z}{m_x}}(k_{\mathrm{B}}T)^{5/2-\lambda}\Gamma(\frac{5}{2}-\lambda) \\
&= \frac{4e^2 l}{3\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_{\mathrm{F}}-\mathscr{E}_{\mathrm{c}})/k_{\mathrm{B}}T}\sqrt{\frac{m_y m_z}{m_x}}(k_{\mathrm{B}}T)^{3/2-\lambda}\Gamma(\frac{5}{2}-\lambda)
\end{aligned} \tag{29}
$$

となる．

[1] $\rho'=\rho\sin\theta$ とおくと，$\mathrm{d}\rho'=\rho\cos\theta\mathrm{d}\theta$ および $\sqrt{\rho^2-\rho'^2}=\rho\cos\theta$ であるので，

$$
I=2\int_0^{\pi/2}\frac{\rho^3\sin^3\theta}{\rho\cos\theta}\rho\cos\theta\mathrm{d}\theta = 2\int_0^{\pi/2}\rho^3\sin^3\theta\mathrm{d}\theta = 2\int_0^{\pi/2}\rho^3(1-\cos^2\theta)\sin\theta\mathrm{d}\theta
$$

となる．ここでさらに $\cos\theta=z$ とおくと，

$$
I=2\int_0^1\rho^3(1-z^2)\mathrm{d}z = 2\left[\rho^3(z-\frac{1}{3}z^3)\right]_0^1 = 2\rho^3(1-\frac{1}{3}) = \frac{4}{3}\rho^3
$$

となる．

2.4　ホール導電率の計算

ホール導電率の計算も導電率の場合とほぼ同様である．

$$
\begin{aligned}
\sigma_{xy} &= -\frac{e^2}{4\pi^3}\int \tau S_{xy}\frac{\partial f_0}{\partial \mathscr{E}}\mathrm{d}\mathbf{k} \\
&= -\frac{e^2}{4\pi^3}\int \tau\left(-\frac{\omega\tau\hbar^2}{2\sqrt{m_x m_y}}\frac{\rho'^2}{1+(\omega\tau)^2}\right)\frac{\partial f_0}{\partial \mathscr{E}}\mathrm{d}\mathbf{k} \\
&= -\frac{e^2}{4\pi^3 k_\mathrm{B}T}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_\mathrm{F}-\mathscr{E}_\mathrm{c})/k_\mathrm{B}T}\int \tau\frac{\omega\tau}{2\sqrt{m_x m_y}}\frac{\hbar^2}{1+(\omega\tau)^2}\rho'^2\mathrm{e}^{-\mathscr{E}/k_\mathrm{B}T}\sqrt{m_x m_y m_z}\mathrm{d}\rho'_x\mathrm{d}\rho'_y\mathrm{d}\rho'_z
\end{aligned}
$$

ここで ρ_z で積分する．方法は式 (26) の場合と同じである．これを用いると，

$$
\begin{aligned}
\sigma_{xy} &= -\frac{e^2}{6\pi^3 k_\mathrm{B}T}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_\mathrm{F}-\mathscr{E}_\mathrm{c})/k_\mathrm{B}T}\int\frac{\omega\tau^2}{1+(\omega\tau)^2}\hbar^2\rho^3\mathrm{e}^{-\mathscr{E}/k_\mathrm{B}T}\sqrt{m_z}2\pi\rho\mathrm{d}\rho \\
&= -\frac{e^2}{3\pi^2 k_\mathrm{B}T}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_\mathrm{F}-\mathscr{E}_\mathrm{c})/k_\mathrm{B}T}\int\frac{\omega\tau^2}{1+(\omega\tau)^2}\hbar^2\left(\frac{2\mathscr{E}}{\hbar^2}\right)^{3/2}\mathrm{e}^{-\mathscr{E}/k_\mathrm{B}T}\sqrt{m_z}\frac{1}{\hbar^2}\mathrm{d}\mathscr{E} \\
&= -\frac{e^2}{3\pi^2\hbar^3 k_\mathrm{B}T}2^{3/2}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_\mathrm{F}-\mathscr{E}_\mathrm{c})/k_\mathrm{B}T}\sqrt{m_z}\int\frac{\omega\tau^2}{1+(\omega\tau)^2}\mathscr{E}^{3/2}\mathrm{e}^{-\mathscr{E}/k_\mathrm{B}T}\mathrm{d}\mathscr{E}
\end{aligned}
\tag{30}
$$

となる．弱磁場近似のホール導電率の場合には B^2 以上の項は無視しても良い．また ω については式 (23) を用いる．そうすると，

$$
\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{3\pi^2\hbar^3 k_\mathrm{B}T}2^{3/2}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_\mathrm{F}-\mathscr{E}_\mathrm{c})/k_\mathrm{B}T}\sqrt{m_z}\int\frac{eB}{\sqrt{m_x m_y}}\tau^2\mathscr{E}^{3/2}\mathrm{e}^{-\mathscr{E}/k_\mathrm{B}T}\mathrm{d}\mathscr{E}
\tag{31}
$$

となる．キャリアの散乱には音響フォノンによる散乱を考え，$\tau = l\mathscr{E}^{-\lambda}$ とおく．そうすると，

$$
\begin{aligned}
\sigma_{xy} &= -\frac{4e^2 l^2}{3\sqrt{2}\pi^2\hbar^3 k_\mathrm{B}T}eB\sqrt{\frac{m_z}{m_x m_y}}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_\mathrm{F}-\mathscr{E}_\mathrm{c})/k_\mathrm{B}T}\int\mathrm{e}^{-\mathscr{E}/k_\mathrm{B}T}\mathscr{E}^{3/2-2\lambda}\mathrm{d}\mathscr{E} \\
&= -\frac{4e^3 l^2 B}{3\sqrt{2}\pi^2\hbar^3 k_\mathrm{B}T}eB\sqrt{\frac{m_z}{m_x m_y}}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_\mathrm{F}-\mathscr{E}_\mathrm{c})/k_\mathrm{B}T}(k_\mathrm{B}T)^{5/2-2\lambda}\Gamma(\frac{5}{2}-2\lambda) \\
&= -\frac{4e^3 l^2 B}{3\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}eB\sqrt{\frac{m_z}{m_x m_y}}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_\mathrm{F}-\mathscr{E}_\mathrm{c})/k_\mathrm{B}T}(k_\mathrm{B}T)^{3/2-2\lambda}\Gamma(\frac{5}{2}-2\lambda) && (32) \\
& && (33)
\end{aligned}
$$

となる．

3　テンソル表示による通常の方法による計算

テンソル表示による導電率とホール導電率は以下の式で与えられる．

$$
\sigma ik = -\frac{e^2}{4\pi^3\hbar^2}\int\tau\frac{\partial f_0}{\partial\mathscr{E}}\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_i}\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_k}\mathrm{d}\mathbf{k}
\tag{34}
$$

$$
\begin{aligned}
\sigma ikl &= \frac{e^3}{4\pi^3\hbar^4}\int\frac{\partial f_0}{\partial\mathscr{E}}\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_i}\left[\tau\Omega_l\right]\left(\tau\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_k}\right)\mathrm{d}\mathbf{k} \\
&= \frac{e^3}{4\pi^3\hbar^4}\int\frac{\partial f_0}{\partial\mathscr{E}}\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_i}\left[\tau\left(\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_r}\frac{\partial}{\partial k_s}-\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_s}\frac{\partial}{\partial k_r}\right)\right]\left(\tau\frac{\partial\mathscr{E}}{\partial k_k}\right)\epsilon_{lrs}\mathrm{d}\mathbf{k}
\end{aligned}
\tag{35}
$$

3.1　導電率の計算

式 (4)–(6) により変数変換すると，

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} &= \frac{e^2}{4\pi^3\hbar^2 k_{\mathrm{B}}T}\int \tau \mathrm{e}^{(\mathscr{E}_{\mathrm{F}}-\mathscr{E}_{\mathrm{c}})/k_{\mathrm{B}}T}\mathrm{e}^{-\mathscr{E}/k_{\mathrm{B}}T}\left(\frac{\sqrt{m_x}\hbar^2}{m_x}\right)^2\rho_x^2\sqrt{m_x m_y m_z}\mathrm{d}\rho_x\mathrm{d}\rho_y\mathrm{d}\rho_z \\ &= \frac{e^2}{4\pi^3\hbar^2 k_{\mathrm{B}}T}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_{\mathrm{F}}-\mathscr{E}_{\mathrm{c}})/k_{\mathrm{B}}T}\int \tau \mathrm{e}^{-\mathscr{E}/k_{\mathrm{B}}T}\frac{\hbar^4}{m_x}\frac{1}{3}\rho^2 4\pi\sqrt{m_x m_y m_z}\rho^2\mathrm{d}\rho \\ &= \frac{e^2\hbar^2}{3\pi^2 k_{\mathrm{B}}T}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_{\mathrm{F}}-\mathscr{E}_{\mathrm{c}})/k_{\mathrm{B}}T}\sqrt{\frac{m_y m_z}{m_x}}\int \tau\rho^4\mathrm{e}^{-\mathscr{E}/k_{\mathrm{B}}T}\mathrm{d}\rho\end{aligned} \tag{36}$$

となる．ここで，$\mathscr{E} = (\hbar^2/2)\rho^2$ とおくことにより，

$$\sigma_{xx} = \frac{e^2\hbar^2}{3\pi^2 k_{\mathrm{B}}T}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_{\mathrm{F}}-\mathscr{E}_{\mathrm{c}})/k_{\mathrm{B}}T}\sqrt{\frac{m_y m_z}{m_x}}\int \tau \mathrm{e}^{-\mathscr{E}/k_{\mathrm{B}}T}\left(\frac{2\mathscr{E}}{\hbar^2}\right)^{3/2}\frac{1}{\hbar^2}\mathrm{d}\mathscr{E} \tag{37}$$

となる．前節と同様に $\tau = l\mathscr{E}^{-\lambda}$ とおけば，

$$\sigma_{xx} = \frac{4e^2 l}{3\pi^2\hbar^3 k_{\mathrm{B}}T}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_{\mathrm{F}}-\mathscr{E}_{\mathrm{c}})/k_{\mathrm{B}}T}\sqrt{\frac{m_y m_z}{m_x}}(k_{\mathrm{B}}T)^{5/2-\lambda}2^{3/2}\Gamma(\frac{5}{2}-\lambda) \tag{38}$$

となる．この式は McClure 理論で計算した式 (29) と等しい．

3.2　ホール導電率の計算

導電率と同じように計算すれば良い．

$$\begin{aligned}\sigma_{xyz} &= -\frac{e^3}{4\pi^3\hbar^4}\frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_{\mathrm{F}}-\mathscr{E}_{\mathrm{c}})/k_{\mathrm{B}}T}\int \tau \mathrm{e}^{-\mathscr{E}/k_{\mathrm{B}}T}\left(\frac{\hbar^2 k_x}{m_x}\right)^2\left(\frac{\hbar^2}{m_y}\right)\tau\mathrm{d}\mathbf{k} \\ &= -\frac{e^3 l^2}{4\pi^3\hbar^4}\frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_{\mathrm{F}}-\mathscr{E}_{\mathrm{c}})/k_{\mathrm{B}}T}\int \mathscr{E}^{-2\lambda}\mathrm{e}^{-\mathscr{E}/k_{\mathrm{B}}T}\frac{\hbar^6}{m_x m_y}\sqrt{m_x m_y m_z}\rho_x^2 4\pi\rho^2\mathrm{d}\rho\end{aligned}$$

ここで $\boldsymbol{\rho}$ は等方的であるから，ρ_x^2 は $(1/3)\rho^2$ と置き換えても良い．そうすると，

$$\begin{aligned}\sigma_{xyz} &= -\frac{e^3 l^2}{3\pi^2\hbar^4}\frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_{\mathrm{F}}-\mathscr{E}_{\mathrm{c}})/k_{\mathrm{B}}T}\int \mathscr{E}^{-2\lambda}\mathrm{e}^{-\mathscr{E}/k_{\mathrm{B}}T}\sqrt{\frac{m_z}{m_x m_y}}\hbar^6\rho^4\mathrm{d}\rho \\ &= -\frac{4e^3 l^2}{3\pi^2\hbar^3}\frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_{\mathrm{F}}-\mathscr{E}_{\mathrm{c}})/k_{\mathrm{B}}T}\int \mathscr{E}^{3/2-2\lambda}\mathrm{e}^{-\mathscr{E}/k_{\mathrm{B}}T}\sqrt{\frac{m_z}{m_x m_y}}2^{3/2}\mathrm{d}\mathscr{E} \\ &= -\frac{4e^3 l^2}{3\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}\frac{1}{k_{\mathrm{B}}T}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_{\mathrm{F}}-\mathscr{E}_{\mathrm{c}})/k_{\mathrm{B}}T}\sqrt{\frac{m_z}{m_x m_y}}(k_{\mathrm{B}}T)^{5/2-2\lambda}\Gamma(\frac{5}{2}-2\lambda) \\ &= -\frac{4e^3 l^2}{3\sqrt{2}\pi^2\hbar^3}\mathrm{e}^{(\mathscr{E}_{\mathrm{F}}-\mathscr{E}_{\mathrm{c}})/k_{\mathrm{B}}T}\sqrt{\frac{m_z}{m_x m_y}}(k_{\mathrm{B}}T)^{3/2-2\lambda}\Gamma(\frac{5}{2}-2\lambda)\end{aligned} \tag{39}$$

となり，結局同じ結果が得られる．

参考文献

[1] J. W. McClure, Phys. Rev. **101**, 1642 (1956).
[2] 2015/11/21 のエントリー．