

混合キャリア半導体のホール係数

2015.7.19 鈴木 実

1 はじめに

混合キャリア導電体のホール係数として通常示されている式はドゥルーデモデルの枠内で得られる。すなわち、フェルミ準位に有限な状態密度が存在し、電子と正孔の両方が存在する場合である。キャリアの緩和時間はエネルギー \mathcal{E} に依存しない。

半導体の場合は緩和時間がエネルギー \mathcal{E} に依存するために、ホール係数はホール因子 r_H を含むことになる。混合キャリアの場合には R. Willardson ら [1] によって電子、軽い正孔、重い正孔の3種類のキャリアが存在する場合に計算されている。式が複雑になるが、結果は次の通りである。

$$R_H = -\frac{3\pi}{8} \frac{1}{en_2} \frac{abL_1 - L_2 - cdL_3}{[aK_1 + K_2 + cK_3]^2 + (\pi/4)\gamma_2[abL_1 - L_2 - cdL_3]^2} \quad (1)$$

ただし、添字 k は 1 が電子、2 が通常の正孔、3 は有効質量が通常の正孔の約 1/10 の高移動度正孔を示す。 e ($e > 0$) は素電荷、 σ_k , μ_k , n_k はそれぞれの成分の導電率、移動度、キャリア濃度であり、 γ_k は磁場を表すパラメータで、

$$\gamma_k = \frac{9\pi}{16} (\mu_k^0 B)^2 \quad (2)$$

である。 μ_k^0 の上付きの 0 はゼロ磁場における移動度を示す。また、 a , b , や K_k , L_k などは以下の通りである。

$$a = \sigma_1^0/\sigma_2^0, \quad b = \mu_1^0/\mu_2^0, \quad c = \sigma_3^0/\sigma_2^0, \quad d = \mu_3^0/\mu_2^0 \quad (3)$$

$$K_k = K(\gamma_k), \quad L_k = L(\gamma_k) \quad (4)$$

$$K(\gamma) = 1 - \gamma - \gamma^2 e^\gamma \text{Ei}(-\gamma), \quad (5)$$

$$L(\gamma) = 1 - 2\gamma + 2\sqrt{\pi}\gamma^{3/2}e^\gamma[1 - \text{Erf}(\sqrt{\gamma})], \quad (6)$$

ここで、 $\text{Ei}(x)$ および $\text{Erf}(x)$ はそれぞれ次の指数積分 (Exponential integral) およびガウスの誤差関数¹である。

$$\text{Ei}(-x) = -\int_x^\infty \frac{e^{-t}}{t} dt, \quad (7)$$

$$\text{Erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \quad (8)$$

弱磁場 ($\gamma < 0.001$) あるいは強磁場 ($\gamma > 25$) の時には上の式は簡単化できて、

$$K(\gamma) \simeq 1 - \gamma - \gamma^2(0.577 + \ln \gamma) \quad (\gamma < 0.025), \quad (9)$$

$$L(\gamma) \simeq 1 - 2\gamma + 2\sqrt{\pi}\gamma^{3/2} \quad (\gamma < 0.01), \quad (10)$$

$$K(\gamma) \simeq 2!/\gamma - 3!/\gamma^2 + \dots \quad (\gamma > 25), \quad (11)$$

$$L(\gamma) \simeq 1 \cdot 3/2\gamma - 1 \cdot 3 \cdot 5/2^2\gamma^2 + \dots \quad (\gamma > 25), \quad (12)$$

となる。0.577 はオイラーの定数 $\gamma = 0.5772156649\dots$ である (ここでは重複を避けて慣用的に用いる γ は使用していない。)

論文 [1] には出発する式と結果しか示されていない。ここでは式 (1) の導出の仕方をメモしておこう。

¹ガウスの誤差関数には違う定義がある。ここでの定義は寺澤寛一「数学概論」p.90 を用いている。例えば岩波の数学公式集 II の定義は積分の前の定数が 1 であって、ここで用いたものと異なる。

2 1種類のキャリアの半導体の場合

式(1)の導出の前段階として、Johnson and Whitesell[2]の論文があり、そこでは、格子振動とイオン化不純物による散乱を受ける単一キャリアの場合と同じく真性半導体の混合キャリアの場合についてホール係数が計算されている。ここでは、その内容を論文[1]の書式の定義に直しながら、計算を少し詳しく記す。

直方体の各辺が軸に平行で、電流 \mathbf{j} は x 軸方向にあり、磁場 \mathbf{B} は z 軸方向にあるとする。(混乱のないように B_z としよう。) まず、次の輸送方程式から始めよう (Johnson and Whitesell [2])。キャリアは電子である。

$$j_x = AE_x - BE_y \quad (13)$$

$$j_y = BE_x + AE_y \quad (14)$$

ただし、係数の A と B は次のように与えられる。

$$A = -\frac{4\pi e^2}{3} \int_0^\infty \frac{lv^3}{1+s^2} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} dv \quad (15)$$

$$B = -\frac{4\pi e^2}{3} \int_0^\infty \frac{slv^3}{1+s^2} \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} dv \quad (16)$$

ただし、 $s = eB_z/mv$ で、 $l = v\tau$ は平均自由行程、 $\mathcal{E} = mv^2/2$ は電子あるいは正孔の運動エネルギーである。

なぜ、このように書けるのかということについては、磁場中の電子の振る舞いに関する、「固体物性と電気伝導」[3]のp.144式(6.99)より

$$\mathbf{G} = \frac{e\tau}{1+\mu^2 B^2} [\mathbf{E} + \mu^2 \mathbf{B}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{E}) + \mu \mathbf{B} \times \mathbf{E}] \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} \quad (17)$$

から出発するのが良い。また、

$$f_0(\mathcal{E}) = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\mathcal{E}/k_B T} \quad (18)$$

は平衡状態の分布関数で今の場合はボルツマン分布関数である。同じく[3]の式(6.102)より、等方的な分布を考えると、

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{\int (\mathbf{G} \cdot \mathbf{v}) \mathbf{v} dv}{\int f_0 dv} = \frac{1}{3n} \int \mathbf{G} v^2 dv \quad (19)$$

が成り立つので、

$$\mathbf{j} = -en\langle \mathbf{v} \rangle = -\frac{e^2}{3} \int \frac{\tau v^2}{1+\omega_c^2 \tau^2} [\mathbf{E} + \mu^2 \mathbf{B}(\mathbf{B} \cdot \mathbf{E}) + \mu \mathbf{B} \times \mathbf{E}] \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} dv \quad (20)$$

となる。磁場と電場が直交すること、 $\mu B_z = \omega_c \tau = (eB_z/m)(l/v) = s$ 、 $d\mathbf{v} = 4\pi v^2 dv$ 、 $l = \tau v$ などに注意すると、

$$\mathbf{j} = -en\langle \mathbf{v} \rangle = -\frac{4\pi e^2}{3} \int \frac{lv^3}{1+s^2} [\mathbf{E} + \mu \mathbf{B} \times \mathbf{E}] \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} dv \quad (21)$$

が得られる。この式を x と y 成分ごとに表したのが式(13)–(16)である。

式(13)と式(14)から $j_y = 0$ の条件でホール係数 R_H と抵抗率 ρ を求めると

$$R_H = \frac{E_y}{j_x} = -\frac{B}{A^2 + B^2} \frac{1}{B_z} \quad (22)$$

$$\rho = \frac{E_x}{j_x} = \frac{A}{A^2 + B^2} \quad (23)$$

となる。

式(15)、(16)の積分には l の \mathcal{E} 依存性を知っておく必要がある。 l の \mathcal{E} 依存性は散乱により異なる。いま、ここでキャリアは格子振動による散乱とイオン化不純物による散乱のみを受けるとしよう。格子振動による散

乱の平均自由行程を l_L , イオン化不純物による散乱の平均自由行程を l_I とする. l_L は近似的にエネルギーに依存しないとみなすことができる. l_I は衝撃係数に cutoff を有するラザフォード散乱として考えると, 近似的に \mathcal{E}^2 に比例する.²文献 [2] のようにして比例係数を α_I とすると,

$$l_I = \alpha_I \mathcal{E}^2 \quad (24)$$

となる. 平均自由行程 l_L と l_I を格子振動のみ, あるいはイオン化不純物の散乱のみで, 磁場がないときの抵抗率 ρ_L^0 と ρ_I^0 を用いて書き換えておこう. 磁場がないときは, $s = 0$, $B = 0$ であるから, $\rho = 1/A$ となり, 式 (15) の積分は整数を引数とするガンマ関数となり係数を除いて $\Gamma(2) = 1$ と $\Gamma(4) = 6$ となるから, 次の2つの関係式が得られる.

$$\frac{1}{\rho_L^0} = A = \frac{4\pi n e^2 l_L}{3} \int_0^\infty \frac{2\mathcal{E}}{m} \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\mathcal{E}/k_B T} \frac{d\mathcal{E}}{m k_B T} = \frac{4n e^2 l_L}{3(2\pi m k_B T)^{1/2}} \quad (25)$$

$$\frac{1}{\rho_I^0} = A = \frac{4\pi n e^2 \alpha_I}{3} \int_0^\infty \frac{2\mathcal{E}^3}{m} \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\mathcal{E}/k_B T} \frac{d\mathcal{E}}{m k_B T} = \frac{2^{5/2}}{(m\pi)^{1/2}} \alpha_I n e^2 (k_B T)^{3/2} \quad (26)$$

式 (15), (16) の l は l_L と l_I により次のように表される.

$$\frac{1}{l} = \frac{1}{l_L} + \frac{1}{l_I} \quad (27)$$

となる. これは緩和時間あるいは衝突時間の逆数は散乱確率であり, 散乱要因に対して相和的であることから成り立つ.

これより,

$$l = \frac{l_L l_I}{l_L + l_I} = \frac{l_L \alpha_I \mathcal{E}^2}{l_L + \alpha_I \mathcal{E}^2} = \frac{l_L \mathcal{E}^2}{\mathcal{E}^2 + l_L / \alpha_I} \quad (28)$$

となるから, 分母第2項に式 (25) と (26) の比から得られる $l_L / \alpha_I = 6(k_B T)^2 (\rho_I^0 / \rho_L^0)$ を代入すると,

$$l = \frac{l_L \mathcal{E}^2}{\mathcal{E}^2 + 6(k_B T)^2 (\rho_I^0 / \rho_L^0)} = \frac{l_L x^2}{x^2 + \beta} \quad (29)$$

となる. ただし, $\mathcal{E}/k_B T = x$, $6(\rho_I^0 / \rho_L^0) = \beta$ とおいた. また, s^2 については

$$s^2 = \left(\frac{e l B_z}{m v^2} \right)^2 = \left(\frac{l_L^2 x^2}{x^2 + \beta} \right)^2 \frac{e^2 B_z^2}{2m \mathcal{E}} = \frac{x^3 \gamma}{(x^2 + \beta)^2} \quad (30)$$

と変形できる. ただし, $\mu_L^0 = 1/en\rho_L^0$ と式 (24) の関係を利用して,

$$\gamma = \frac{l_L^2 e^2 B_z^2}{2m k_B T} = \frac{9\pi}{16} \left(\frac{16e^2 l_L^2 x^2}{18\pi m k_B T} \right) B_z^2 = \frac{9\pi}{16} (\mu_L^0)^2 B_z^2 \quad (31)$$

$$\mu_L^0 = \frac{4e l_L}{(18\pi m k_B T)^{1/2}} \quad (32)$$

である. 以上を式 (25) に代入すると,

$$\begin{aligned} A &= -\frac{4\pi e^2}{3} \int_0^\infty \frac{x^2}{x^2 + \beta} \frac{3(2\pi m k_B T)^{1/2}}{4n e^2 \rho_L^0} \frac{2\mathcal{E} v}{m} \frac{1}{1 + x^2 \gamma / (x^2 + \beta)^2} n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-x} \frac{-1}{k_B T} \frac{k_B T}{m v} dx \\ &= \frac{1}{\rho_L^0} \int_0^\infty \frac{x^3 (x^2 + \beta)}{(x^2 + \beta)^2 + x^3 \gamma} e^{-x} dx \end{aligned} \quad (33)$$

となる. ここで積分の部分に着目し,

$$J_1 = \int_0^\infty \frac{x^3 (x^2 + \beta)}{(x^2 + \beta)^2 + x^3 \gamma} e^{-x} dx \quad (34)$$

²エネルギー依存性のことは [3] の p.266 からと p.271 からを参照のこと.

とおくと,

$$A = \frac{1}{\rho_L^0} J_1 \quad (35)$$

と書くことができる. ρ_1^0/ρ_L^0 と l_L を知れば A を計算することができる.

次に, B について考えてみると, B は A の被積分関数に s を乗じたものであるから, 式 (33) の被積分関数に $s = \gamma^{1/2} x^{3/2}/(x^2 + \beta)$ を乗じて表すことができる. すなわち, 式 (33) から,

$$B = \frac{\gamma^{1/2}}{\rho_L^0} \int_0^\infty \frac{x^{9/2} e^{-x}}{(x^2 + \beta)^2 + x^3 \gamma} dx \quad (36)$$

となる. ここで, 積分の部分を

$$J_2 = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^{9/2} e^{-x}}{(x^2 + \beta)^2 + x^3 \gamma} dx \quad (37)$$

とおくと,

$$B = \frac{\sqrt{\pi} \gamma^{1/2}}{2 \rho_L^0} J_2 \quad (38)$$

となる. これより, A と同様に, ρ_1^0/ρ_L^0 と l_L を知れば B を計算することができる.

以上の予備的な計算をもとに, ホール係数を計算してみよう. $j_y = 0$ の条件のもとに, 輸送方程式で E_x を消去して $R_H = E_y/j_x$ が求められるから,

$$R_H = -\frac{B}{A^2 + B^2} \frac{1}{B_z} = -\frac{\gamma^{1/2} \sqrt{\pi}}{B_z} \frac{(J_2/\rho_L^0)}{2 (J_1/\rho_L^0)^2 + (\pi/4)(J_2/\rho_L^0)^2 \gamma} = -\frac{3\pi}{8} \mu_L^0 \rho_L^0 \frac{J_2}{J_1^2 + (\pi/4)J_2^2 \gamma} \quad (39)$$

となる. $\mu_L^0 = 1/ne\rho_L^0$ であるから,

$$R_H = -\frac{3\pi}{8ne} \frac{J_2}{J_1^2 + (\pi/4)J_2^2 \gamma} = \frac{r_H}{ne} \quad (40)$$

となる. ホール因子は r_H は, 単一キャリアで, 格子振動とイオン化不純物の散乱がある場合,

$$r_H = -\frac{3\pi}{8} \frac{J_2}{J_1^2 + (\pi/4)J_2^2 \gamma} \quad (41)$$

となる.

3 2キャリアの場合 (真性半導体, あるいは高温下の半導体)

真性半導体あるいは高温にある半導体を考え, キャリアは電子と正孔の2種類がある場合を考える. 添字の1は電子, 2は正孔とする.

輸送方程式は

$$j_x = (A_1 + A_2)E_x - (B_1 - B_2)E_y \quad (42)$$

$$j_y = (B_1 - B_2)E_x + (A_1 + A_2)E_y \quad (43)$$

と書ける. ここで, A_i と B_i ($i = 1, 2$) は, 1つの種類のキャリアに着目してみれば前節で述べた単一キャリアの場合と同じであるから, 添字が1の場合には電子の濃度, 平均自由行程, 移動度などで表される. 他の場合も同様である.

式 (42) と式 (43) から $j_y = 0$ としてホール係数および抵抗率を導くと,

$$\rho = \frac{E_x}{j_x} = \frac{A_1 + A_2}{(A_1 + A_2)^2 + (B_1 - B_2)^2} \quad (44)$$

$$R_H = \frac{E_y}{j_x} = -\frac{1}{B_z} \frac{B_1 - B_2}{(A_1 + A_2)^2 + (B_1 - B_2)^2} \quad (45)$$

となる。

半導体の移動度は格子振動の場合は $\mu_L \propto T^{-3/2}$ であるのに対し、イオン化不純物散乱では $\mu_I \propto T^{3/2}$ であるので、衝突時間が高温で増大することになり、イオン化不純物散乱は高温で無視することができる。また、高温で熱励起によるキャリア濃度が大きくなると、外来形キャリアは真性キャリアの濃度に対して無視できるようになり、真性半導体の振る舞いになる。このようなときには、 $l \simeq l_L$ および $n_1 \simeq n_2$ とみなして差し支えないことになる。このとき、イオン化不純物散乱がない極限を考えると、 ρ_I^0 が ρ_L^0 に対して無視できるようになるので、 $\rho_I^0/\rho_L^0 \rightarrow 0$ としてよい。つまり、 $\beta = 0$ とすることができる。そうすると、式 (33) において電子と正孔に関するものを A_1 および A_2 とすると、

$$A_1 = \frac{1}{\rho_1^0} \int_0^\infty \frac{x^2 e^{-x}}{x + \gamma_1} dx = n_1 e \mu_1^0 \int_0^\infty \frac{x^2 e^{-x}}{x + \gamma_1} dx \quad (46)$$

となる。積分の部分を $K(\gamma)$ とおくと、

$$K(\gamma) = \int_0^\infty \frac{x^2 e^{-x}}{x + \gamma} dx = \int_0^\infty \left[(x - \gamma) e^{-x} + \gamma^2 \frac{x^2 e^{-(x+\gamma)}}{x + \gamma} \right] dx = 1 - \gamma - \gamma^2 e^\gamma \text{Ei}(-\gamma) \quad (47)$$

となる。ただし、 $\text{Ei}(x)$ は次の式で定義される指数積分 (Exponential integral) である。

$$\text{Ei}(x) = - \int_{-x}^\infty \frac{e^{-t}}{t} dt \quad (48)$$

$\text{Ei}(x)$ のグラフを図 1 に示す。

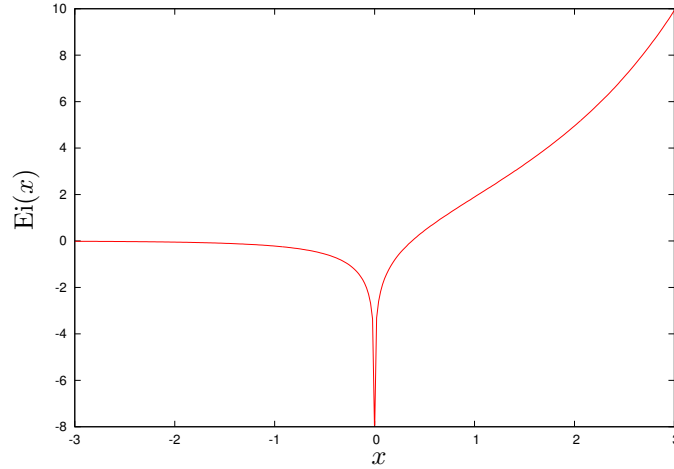


図 1: 指数関数 $\text{Ei}(x)$ のグラフ

$K(\gamma_1) = K_1$ のように表すと A_1 は次のように表される。

$$A_1 = n_1 e \mu_1^0 K(\gamma_1) = n_1 e \mu_1^0 K_1 \quad (49)$$

A_2 についても同様に

$$A_2 = n_2 e \mu_2^0 K(\gamma_2) = n_2 e \mu_2^0 K_2 \quad (50)$$

となる。

同様に、式 (33) において電子と正孔に関するものを B_1 および B_2 とすると、 B_1 については、

$$B_1 = \frac{\gamma^{1/2}}{\rho_1^0} \int_0^\infty \frac{x^{3/2} e^{-x}}{x + \gamma_1} dx = n_1 e \mu_1^0 \gamma_1^{1/2} \int_0^\infty \frac{x^{3/2} e^{-x}}{x + \gamma_1} dx \quad (51)$$

となる。ここで積分部分に着目し、

$$L(\gamma) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^{3/2} e^{-x}}{x + \gamma} dx \quad (52)$$

とおこう。そすると、 $L(\gamma)$ はガウスの誤差関数 $\text{Erf}(x)$ を用いて次のように表すことができる³。

$$\begin{aligned} L(\gamma) &= \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^{3/2} e^{-x}}{x + \gamma} dx = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) - \gamma \int_0^\infty \frac{x^{1/2} e^{-x}}{x + \gamma} dx \right] \\ &= 1 - 2\gamma + 2\sqrt{\pi} \gamma^{3/2} e^\gamma [1 - \text{Erf}(\sqrt{\gamma})] \end{aligned} \quad (53)$$

K_1 のように $L(\gamma_i)$ を L_i と表すことにすると、

$$B_1 = \frac{\sqrt{\pi}}{2} n_1 e \mu_1^0 \gamma_1^{1/2} L_1 \quad (54)$$

という式が得られる。 B_2 についても同様である。

$$B_2 = \frac{\sqrt{\pi}}{2} n_2 e \mu_2^0 \gamma_2^{1/2} L_2 \quad (55)$$

以上の A_i と B_i を用いて、式 (44) と (45) に代入することにより抵抗率とホール係数を表すことにするのだが、定数を少し簡略化しておく。高温の半導体、あるいは真性半導体を扱っているので、電子と正孔の濃度はほとんど等しいと考えて良い。そこで、以下では

$$n_1 = n_2 = n \quad (56)$$

とする。すると、式 (44) は次のように表される。

$$\rho = \frac{1}{ne} \frac{\mu_1^0 K_1 + \mu_2^0 K_2}{[\mu_1^0 K_1 + \mu_2^0 K_2]^2 + (\pi/4)[\mu_1^0 \gamma_1^{1/2} L_1 - \mu_2^0 \gamma_2^{1/2} L_2]^2} \quad (57)$$

³ここで、第3式大括弧内第2項の積分の部分 I_1 は以下のように変形される。まず、 $x = t^2$ とおくことにより、

$$I_1 = \int_0^\infty \frac{x^{1/2} e^{-x}}{x + \gamma} dx = 2 \int_0^\infty \frac{t^2 e^{-t^2}}{t^2 + \gamma} dt = 2 \int_0^\infty e^{-t^2} dt - 2\gamma \int_0^\infty \frac{e^{-t^2}}{t^2 + \gamma} dt$$

となる。すなわち、

$$I_1 = \sqrt{\pi} - 2\gamma I_2, \quad I_2 = \int_0^\infty \frac{e^{-t^2}}{t^2 + \gamma} dt$$

と書くことができる。ここで、

$$I_3 = \int_0^\infty \frac{e^{-\alpha(t^2 + \gamma)}}{t^2 + \gamma} dt = e^{-\alpha\gamma} \int_0^\infty \frac{e^{-\alpha t^2}}{t^2 + \gamma} dt$$

という関係に着目すると、 I_2 は $I_3 e^{\alpha\gamma}$ において $\alpha = 1$ とおいたものである。一方、 $\alpha = \infty$ で $I_3 = 0$ に注意すると、

$$I_3 = \int_\infty^\alpha \frac{\partial I_3}{\partial \alpha} d\alpha = - \int_\alpha^\infty \frac{\partial I_3}{\partial \alpha} d\alpha = \frac{1}{2} \int_\alpha^\infty \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{-\gamma\alpha} d\alpha = \sqrt{\pi} \gamma^{-1/2} \int_{\sqrt{\alpha\gamma}}^\infty e^{-y^2} dy = \sqrt{\pi} \gamma^{-1/2} \left[\int_0^\infty e^{-y^2} dy - \int_{\sqrt{\alpha\gamma}}^\infty e^{-y^2} dy \right]$$

となる。ただし、途中で $\alpha\gamma = y^2$ と変数変換した。最後の式の大括弧第2項はガウスの誤差関数 $\text{Erf}(\sqrt{\alpha\gamma})$ の形をしている。したがって、

$$I_3 = \sqrt{\pi} \gamma^{-1/2} \left[\frac{\sqrt{\pi}}{2} - \frac{\sqrt{\pi}}{2} \text{Erf}(\sqrt{\alpha\gamma}) \right]$$

と書くことができる。ガウスの誤差関数は

$$\text{Erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2} dt$$

である。1つ上の式に $e^{\alpha\gamma}$ を掛けて $\alpha = 1$ とおくと、 I_2 が次のように得られる。

$$I_2 = \frac{\pi}{2} \gamma^{-1/2} e^\gamma [1 - \text{Erf}(\sqrt{\gamma})]$$

したがって、

$$I_1 = \sqrt{\pi} - 2\gamma I_2 = \sqrt{\pi} - \pi \gamma^{1/2} e^\gamma [1 - \text{Erf}(\sqrt{\gamma})]$$

となる。これを式 (53) に代入すれば最後の式が得られる。

ここで、 μ_1^0 と μ_2^0 の比を次のようにおく.

$$c = \mu_1^0 / \mu_2^0 \quad (58)$$

これを用いると c から

$$c^2 = \gamma_1 / \gamma_2 \quad (59)$$

となる. この比を用いて式 (57) を変形すると,

$$\begin{aligned} \rho &= \frac{1}{ne\mu_2^0} \frac{cK_1 + K_2}{[cK_1 + K_2]^2 + (\pi/4)[c\gamma_1^{1/2}L_1 - \gamma_2^{1/2}L_2]^2} \\ &= \frac{1}{ne\mu_2^0} \frac{cK_1 + K_2}{[cK_1 + K_2]^2 + (\pi/4)\gamma_2[c^2L_1 - L_2]^2} \end{aligned} \quad (60)$$

と表すことができる.

一方、ホール係数に関しては、式 (45) より、

$$\begin{aligned} R_H &= -\frac{1}{B_z} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\gamma_1^{1/2}\mu_1^0L_1 - \gamma_2^{1/2}\mu_2^0L_2}{[\mu_1^0K_1 + \mu_2^0K_2]^2 + [\gamma_1^{1/2}\mu_1^0L_1 - \gamma_2^{1/2}\mu_2^0L_2]^2} \\ &= -\frac{1}{B_z} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{1}{ne\mu_2^0} \frac{\gamma_2^{1/2}[c^2L_1 - L_2]}{[cK_1 + K_2]^2 + \gamma_2[c^2L_1 - L_2]^2} \\ &= -\frac{3\pi}{8} \frac{1}{ne} \frac{c^2L_1 - L_2}{[cK_1 + K_2]^2 + \gamma_2[c^2L_1 - L_2]^2} \end{aligned} \quad (61)$$

となる.

弱磁場の場合、 $\gamma_1, \gamma_2 \rightarrow 0$ となるから、 $K_1, K_2 \rightarrow 1$ とすることにより得られる. 弱磁場のホール係数を R_H^0 とすると、

$$R_H^0 = -\frac{3\pi}{8} \frac{1}{ne} \frac{c-1}{c+1} \quad (62)$$

となる.

ホール係数を弱磁場ホール係数に対する比として表すと、

$$\frac{R_H}{R_H^0} = \frac{c+1}{c-1} \frac{c^2L_1 - L_2}{[cK_1 + K_2]^2 + \gamma_2[c^2L_1 - L_2]^2} \quad (63)$$

となる.

c の漸近的な場合に関するホール係数の比は、 $c \rightarrow 0$ のとき、

$$\frac{R_H}{R_H^0} = 1 \quad (64)$$

である. $c \rightarrow 1$ のとき、 $\gamma_1 = \gamma_2$ となり、

$$\frac{R_H}{R_H^0} = \frac{L_1}{K_1^2} \quad (65)$$

となる.

4 3種類以上のキャリアが存在する場合

文献 [1] の前提となる輸送方程式は

$$j_x = \sum_k A_k E_x + \sum_k \epsilon_k B_k E_y \quad (66)$$

$$j_y = -\sum_k \epsilon_k B_k E_x + \sum_k A_k E_y \quad (67)$$

である。キャリアが正の時 $\epsilon_k = 1$ 、キャリアが負の時 $\epsilon_k = -1$ である。係数の A_k と B_k は前節までと同様に以下のように定義される。

$$A_k = en_k \mu_k^0 \int_0^\infty \frac{x^2 e^{-x}}{x + \gamma_k} dx = en_k \mu_k^0 K_k \quad (68)$$

$$B_k = en_k \mu_k^0 \int_0^\infty \frac{x^{3/2} e^{-x}}{x + \gamma_k} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{2} en_k \mu_k^0 \gamma_k^{1/2} L_k \quad (69)$$

以上の式における K_k と L_k の定義は前節と同じく式 (47) と式 (53) で与えられる。

式 (64) と式 (65) から抵抗率およびホール係数は

$$\rho = \frac{\sum_k A_k}{(\sum_k A_k)^2 + (\sum_k \epsilon_k B_k)^2} \quad (70)$$

$$R_H = \frac{\sum_k \epsilon_k B_k}{(\sum_k A_k)^2 + (\sum_k \epsilon_k B_k)^2} \quad (71)$$

ここで3種類のキャリアが存在する場合を p 形 Ge を想定して具体的に考えてみよう。電子を添字 1、普通の重い正孔を添字 2、軽い高移動度の正孔を添字 3 で表すと、式 (67) は

$$R_H = \frac{(\sqrt{\pi}/2)(-en_1(\mu_1^0)^2 L_1 + en_2(\mu_2^0)^2 L_2 + en_3(\mu_3^0)^2 L_3)(3\sqrt{\pi}/4)}{(en_1\mu_1^0 K_1 + en_2\mu_2^0 K_2 + en_3\mu_3^0 K_3)^2 + (\pi/4)(-en_1\mu_1^0 \gamma_1^{1/2} L_1 + en_2\mu_2^0 \gamma_2^{1/2} L_2 + en_3\mu_3^0 \gamma_3^{1/2} L_3)^2} \quad (72)$$

となる。ここで、

$$a = \frac{\sigma_1^0}{\sigma_2^0}, \quad b = \frac{\mu_1^0}{\mu_2^0}, \quad c = \frac{\sigma_3^0}{\sigma_2^0}, \quad d = \frac{\mu_3^0}{\mu_2^0} \quad (73)$$

とおくと、式 (68) は少し簡潔になり、

$$\begin{aligned} R_H &= \frac{3\pi}{8} \frac{en_2(\mu_2^0)^2(-abL_1 + L_2 + cdL_3)}{(en_2\mu_2^0)^2(aK_1 + K_2 + cK_3)^2 + (\pi/4)(en_2\mu_2^0)^2\gamma_2(-abL_1 + L_2 + cdL_3)^2} \\ &= \frac{3\pi}{8} \frac{1}{en_2} \frac{-abL_1 + L_2 + cdL_3}{(aK_1 + K_2 + cK_3)^2 + (\pi/4)\gamma_2(-abL_1 + L_2 + cdL_3)^2} \end{aligned} \quad (74)$$

と書くことができる。この式は最初にあげた式 (1) である。

5 不純物領域

不純物領域では電子の濃度は非常に少なく、 $n_1/n_2 \ll 1$ としてよい。したがって、式 (1) において $a = 0$ とおくことができる。

弱磁場の場合、 $\gamma = 0$ と近似してもよい。そのとき、式 (5) と式 (6) から $K(0) = L(0) = 1$ であるから、式 (74) は次のように表すことができる。

$$R_H = \frac{3\pi}{8} \frac{1}{en_2} \frac{1 + cd}{(1 + c)^2} = \frac{3\pi}{8} \frac{1}{en_2} \frac{1 + \left(\frac{n_3}{n_2}\right) \left(\frac{\mu_3^0}{\mu_2^0}\right)^2}{\left[1 + \left(\frac{n_3}{n_2}\right) \left(\frac{\mu_3^0}{\mu_2^0}\right)\right]} \quad (75)$$

一方、強磁場の場合、 $a = 0$ および $\gamma \gg 1$ として良い。したがって、

$$\begin{aligned}
R_H &= \frac{3\pi}{8} \frac{1}{en_2} \frac{L_2 + cdL_3}{(K_2 + cK_3)^2 + (\pi/4)\gamma_2(L_2 + cdL_3)^2} \\
&\simeq \frac{3\pi}{8} \frac{1}{en_2} \frac{1}{(\pi/4)\gamma_2(L_2 + cdL_3)} \\
&\simeq \frac{3\pi}{8} \frac{1}{en_2} \frac{1}{\frac{\pi}{4}\gamma_2 \left(\frac{3}{2\gamma_2} + \frac{\sigma_3^0 \mu_3^0}{\sigma_2^0 \mu_2^0} \frac{3}{2\gamma_3} \right)} = \frac{3\pi}{8} \frac{1}{en_2} \frac{1}{\frac{\pi}{4} \left(\frac{3}{2} + \frac{n_3}{n_2} \left[\frac{\mu_3^0}{\mu_2^0} \right]^2 \frac{3}{2} \left[\frac{\mu_2^0}{\mu_3^0} \right]^2 \right)} \\
&= \frac{1}{e(n_2 + n_3)}
\end{aligned} \tag{76}$$

となる。ただし、上の式変形で (12) の高磁場における近似式を用いた。

6 $K(\gamma)$ と $L(\gamma)$ の弱磁場および強磁場における近似式

指数積分の級数展開 (岩波の数学公式 III, p.24)

$$\text{Ei}(-x) = \gamma + \ln x + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n x^n}{n!n} \tag{77}$$

(ここだけ γ はオイラーの数)

ガウスの誤差関数の級数展開 (寺澤寛一「数学概論」, p.90)

$$\text{Erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{2n+1}}{n!(2n+1)} \tag{78}$$

x が十分大きい時の漸近展開

$$e^x \text{Ei}(-x) \simeq \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(n-1)!}{x^n} \tag{79}$$

$$e^x \text{Erfc}(x) \simeq \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (2n-1)!!}{2^{n+1} n! x^{2n+1}} \tag{80}$$

以上から $\gamma \ll 1$ のとき、

$$\begin{aligned}
K(\gamma) &= 1 - \gamma - \gamma^2 e^\gamma \text{Ei}(-\gamma) \\
&= 1 - \gamma - \gamma^2 (1 + \gamma + \frac{1}{2!}\gamma^2 + \dots) [0.557 + \ln \gamma + (-1)\gamma + \dots] \\
&\simeq 1 - \gamma - \gamma^2 (0.557 + \ln \gamma)
\end{aligned} \tag{81}$$

$$\begin{aligned}
L(\gamma) &= 1 - 2\gamma + 2\sqrt{\pi}\gamma^{3/2} e^\gamma [1 - \text{Erf}] \\
&= 1 - 2\gamma + 2\sqrt{\pi}\gamma^{3/2} (1 + \gamma) \left[1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (2n-1)!!}{2^{n+1} n! x^{2n+1}} \right] \\
&= 1 - 2\gamma + 2\sqrt{\pi}\gamma^{3/2} (1 + \gamma) \left(1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[\gamma - \frac{1}{3}\gamma^3 + \dots \right] \right) \\
&\simeq 1 - 2\gamma + 2\sqrt{\pi}\gamma^{3/2}
\end{aligned} \tag{82}$$

となる。 γ の 3 次以上の項は省略した。

$\gamma \gg 1$ のとき,,

$$\begin{aligned}
K(\gamma) &= 1 - \gamma - \gamma^2 e^\gamma \text{Ei}(-\gamma) \\
&= 1 - \gamma - \gamma^2 \left(\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{(n-1)!}{\gamma^n} \right) [0.557 + \ln \gamma + (-1)\gamma + \dots] \\
&= 1 - \gamma - \gamma^2 \left[-\frac{1}{\gamma} + \frac{1}{\gamma^2} - \frac{2!}{\gamma^3} + \frac{3!}{\gamma^4} - \frac{4!}{\gamma^5} + \dots \right] \\
&= \frac{2!}{\gamma} - \frac{3!}{\gamma^2} - \frac{4!}{\gamma^3} + \dots
\end{aligned} \tag{83}$$

$$\begin{aligned}
L(\gamma) &= 1 - 2\gamma + 2\sqrt{\pi}\gamma^{3/2} e^\gamma \text{Erfc}(\sqrt{\gamma}) \\
&= 1 - 2\gamma + 2\sqrt{\pi}\gamma^{3/2} \left[\frac{2}{\sqrt{\pi}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (2n-1)!!}{2^{n+1} n! \gamma^{n+1/2}} \right] \\
&= 1 - 2\gamma + 2\sqrt{\pi}\gamma^{3/2} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{1}{2\gamma^{1/2}} - \frac{1}{2^2 \gamma^{3/2}} + \frac{3!!}{2^3 \gamma^{5/2}} - \frac{5!!}{2^4 \gamma^{7/2}} + \dots \right] \\
&= \frac{3!!}{2\gamma} - \frac{5!!}{2^2 \gamma^2} + \dots
\end{aligned} \tag{84}$$

となる. γ の 3 次以上の項は省略した.

参考文献

- [1] R. K. Willardson, T. C. Harman, and A. C. Beer, Phys. Rev. **96**, 1512 (1954).
- [2] V. A. Johnson and W. J. Whitesell, Phys. Rev. **89**, 941 (1953).
- [3] 「固体物性と電気伝導」(森北出版).