

ホール因子の散乱要因依存性について（複数存在する場合）

2015.7.26 鈴木 実

1 はじめに

ホール係数は散乱に依存し、半導体の場合には散乱の種類によって異なる緩和時間（平均自由行程）に依存する因子が現れる。金属の場合には、フェルミ面における緩和時間（平均自由行程）の変化に依存してホール係数が変化する。具体的には、半導体の場合、主たる散乱要因が格子振動の場合にはホール因子 $3\pi/8$ が必要になる。イオン化不純物による散乱の場合には $315\pi/512$ というホール因子の係数がつく。学生実験などでは、両方共 1 に近いということから 1 として扱う場合も少なくない。しかし、厳密に扱う場合、格子振動による散乱とイオン化不純物による散乱ではホール因子がほぼ 1 対 2 と言ってもよい。また、両方の散乱要因が存在する場合に、このホール因子は一体どのように変化するのだろうか。以上のことは、正確に移動度などを評価したいばあいには十分気になる事柄である。実際、そこまで十分な注意を払って Ge の電子の移動度を評価した人もいた [1]。論文 [1] とそれに関する論文 [2] には結果の式しかないので、ここではその時に使われた式の導出をメモしておこう。

2 格子振動による散乱が支配的な場合

半導体の場合（すなわちボルツマン分布が成り立つ場合）、平均自由行程 $l = v\tau$ を用いて抵抗率とホール係数は次のように計算できる（2015/7/19 のエントリーを参照）。

$$\rho = \frac{A}{A^2 + B^2} \quad (1)$$

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

となる。ただし、 A と B は次のように与えられる。

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

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

ただし、 $s = elB_z/mv$ 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。

弱磁場近似では、 B_z の 2 次以上の項は無視できるので、 $s^2 = 0$ 、 $B^2 = 0$ とすることができて、

$$\rho = \frac{1}{A} \quad (5)$$

$$R_H = -\frac{B}{A^2} \frac{1}{B_z} \quad (6)$$

となる。ただし、 A と B は次のように与えられる。

$$A = -\frac{4\pi e^2}{3} \int_0^\infty lv^3 \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} dv \quad (7)$$

$$B = -\frac{4\pi e^2}{3} \int_0^\infty slv^3 \frac{\partial f_0}{\partial \mathcal{E}} dv \quad (8)$$

となる。

ここで、 $f_0(\mathcal{E})$ はボルツマン分布関数で、ここではキャリア濃度を n 、有効質量を m 、ボルツマン定数を k_B として、

$$f_0(\mathcal{E}) = n \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} e^{-\mathcal{E}/k_B T} \quad (9)$$

のように与えられる。

前準備として、散乱が格子振動の場合のみと、イオン化不純物の場合の抵抗率 ρ_L^0 と ρ_I^0 を求めておこう。格子振動の場合、平均自由行程はエネルギーに依存しないので、格子振動に抛る散乱の平均自由行程を l_L として、

$$l = l_L \quad (10)$$

とおくことができる。これを式 (7) に代入すると、積分はガンマ関数になるので、

$$A = \frac{4ne^2 l_L}{3(2\pi m k_B T)^{1/2}} \quad (11)$$

となる。これから、散乱が格子振動の場合、

$$\rho_L^0 = \frac{1}{A} = \frac{3(2\pi m k_B T)^{1/2}}{4ne^2 l_L} \quad (12)$$

が得られる。

同様に、散乱がイオン化不純物による場合、イオン化不純物による散乱の平均自由行程を l_I とすると、

$$l_I = \alpha_I \mathcal{E}^2 \quad (13)$$

というエネルギー依存性を有する。これを式 (7) の l に代入し、ガンマ関数を用いて少し整理すると、

$$A = \frac{2^{5/2}}{(m\pi)^{1/2}} \alpha_I n e^2 (k_B T)^{3/2} \quad (14)$$

となる。これから、散乱がイオン化不純物の場合、

$$\rho_I^0 = \frac{1}{A} = \frac{(2\pi m k_B T)^{1/2}}{8\alpha_I n e^2 (k_B T)^2} \quad (15)$$

が得られる。

こうして得られた ρ_L と ρ_I を用いると散乱要因が2種類同時に存在するときのホール係数を簡潔に表すことができる。格子振動による散乱とイオン化不純物による散乱が両方存在するときの平均自由行程を l は

$$\frac{1}{l} = \frac{1}{l_L} + \frac{1}{l_I} \quad (16)$$

となる。式 (13) を代入し、

$$x = \frac{\mathcal{E}}{k_B T} \quad (17)$$

とすると、

$$l = \frac{l_L l_I}{l_L + l_I} = \frac{l_L \alpha_I \mathcal{E}^2}{l_L + \alpha_I \mathcal{E}^2} = \frac{l_L \mathcal{E}^2}{\mathcal{E}^2 + l_L / \alpha_I} = \frac{l_L \mathcal{E}^2}{\mathcal{E}^2 + 6(k_B T)^2 (\rho_I^0 / \rho_L^0)} = \frac{l_L x^2}{x^2 + \beta} \quad (18)$$

となる。ただし、ここで、

$$\beta = 6 \left(\frac{\rho_I^0}{\rho_L^0} \right) \quad (19)$$

とおいた。

次に s^2 を変形しておこう.

$$s^2 = \left(\frac{elB_z}{mv} \right)^2 = \frac{e^2 l^2 B_z^2}{2m\mathcal{E}} = \frac{l_L^2 x^4}{(x^2 + \beta)^2} \frac{e^2 B_z^2}{2mxk_B T} = \frac{1}{(x^2 + \beta)^2} x^3 \gamma \quad (20)$$

となるので,

$$s = \frac{1}{x^2 + \beta} x^{3/2} \gamma^{1/2} \quad (21)$$

である. ここで, γ は次のように定義されるが, 式 (12) に注意すると,

$$\gamma = \frac{l_L^2 e^2 B_z^2}{2mk_B T} = \frac{9\pi}{16} \frac{16e^2 l_L^2}{18\pi mk_B T} B_z^2 = \frac{9\pi}{16} \frac{1}{\rho_L^2 n^2 e^2} B_z^2 = \frac{9\pi}{16} (\mu_L^0)^2 B_z^2 \quad (22)$$

となる. ただし,

$$\mu_L^0 = \frac{1}{ne\rho_L^0} = \frac{4el_L}{3(2\pi mk_B T)^{1/2}} \quad (23)$$

は格子振動のみが存在する場合の移動度である. あるいは

$$\gamma^{1/2} = \frac{3\sqrt{\pi}}{4} \mu_L^0 B_z \quad (24)$$

とも書くことができる.

ここで, 式 (18)–(24) を式 (3) に代入すると,

$$A = \int_0^\infty \frac{x^3}{\rho_L^0} \frac{x^2 + \beta}{(x^2 + \beta)^2 + x^3 \gamma} dx \quad (25)$$

となる. 弱磁場を考え, $B_z^2 = 0$ と考えると, $\gamma = 0$ としてよい. そうすると,

$$A = \frac{1}{\rho_L^0} \int_0^\infty \frac{x^3}{x^2 + \beta} dx = \frac{1}{\rho_L^0} J_1 = \frac{1}{\rho} \quad (26)$$

となる. ただし,

$$J_1 = \int_0^\infty \frac{x^3}{x^2 + \beta} dx \quad (27)$$

である.

B についても同様に計算できる. 式 (18)–(24) を式 (4) に代入し, B_z^2 以上の項を無視すると,

$$B = \frac{\gamma^{1/2}}{\rho_L^0} \int_0^\infty \frac{x^{9/2} e^{-x}}{(x^2 + \beta)^2 + x^3 \gamma} dx = \frac{\gamma^{1/2}}{\rho_L^0} \int_0^\infty \frac{x^{9/2} e^{-x}}{(x^2 + \beta)^2} dx = \frac{\gamma^{1/2}}{\rho_L^0} \frac{\sqrt{\pi}}{2} J_2 \quad (28)$$

となる. ただし,

$$J_2 = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{x^{9/2} e^{-x}}{(x^2 + \beta)^2} dx \quad (29)$$

である. 式 (26) を式 (5) に代入すると,

$$\rho = \frac{\rho_L^0}{J_1} \quad (30)$$

となり, 同じく, 式 (26), 式 (28) を式 (6) に代入すると,

$$R_H = \frac{3\pi}{8} \frac{\mu_L^0}{\rho_L^0} J_2 \frac{(\rho_L^0)^2}{J_1^2} = \frac{3\pi}{8} \frac{1}{en} \frac{J_2}{J_1^2} \quad (31)$$

となる.

3 格子振動による散乱が支配的な場合

式(27), 式(29), 式(31)から R_H を $\rho_I^0/(\rho_I^0+\rho_L^0)$ の関数として計算することができる。しかし, $\rho_I^0/(\rho_I^0+\rho_L^0) = 1$ の近いところ, すなわち $\rho_L^0 = 0$ の近傍, すなわち $\beta = 0$ の近傍ではそのままの式では計算の精度が悪くなる。この部分は $\theta = \beta^{-1}$ とおいて, θ を用いて表すことにより $\rho_L^0 = 0$ の近傍でも精度よく計算できる。 θ を次のように定義する。

$$\theta = \frac{1}{\beta} = \frac{1}{6} \left(\frac{\rho_L^0}{\rho_I^0} \right) \quad (32)$$

次に, 式(12)を式(15)で割ることによって得られる次の関係を利用する。

$$\frac{l_L}{\alpha_I} = 6(k_B T)^2 \left(\frac{\rho_I^0}{\rho_L^0} \right) \quad (33)$$

これを用いて式(18)を書き換えると,

$$l = \frac{l_I l_L}{l_I + l_L} = \frac{\alpha_I \mathcal{E}^2}{\alpha_I \mathcal{E}^2 / l_L^2 + 1} = \frac{\alpha_I \mathcal{E}^2}{(\rho_L^0 / \rho_I^0) \mathcal{E}^2 / 6(k_B T)^2 + 1} = \frac{\alpha_I (k_B T)^2 x^2}{1 + x^2 \theta} \quad (34)$$

および, これを利用して s^2 は,

$$\begin{aligned} s^2 &= \frac{e^2 l^2 B_z^2}{2m \mathcal{E}} = \left(\frac{\alpha_I (k_B T)^2 x^2}{1 + x^2 \theta} \right)^2 \frac{e^2 B_z^2}{2m \mathcal{E}} = \frac{1}{(1 + x^2 \theta)^2} \frac{\alpha_I^2 (k_B T)^2 x^3 e^2 B_z^2}{2m} \\ &= \frac{x^3}{(1 + x^2 \theta)^2} \frac{\pi}{64} \left(\frac{64 \alpha_I^2 (k_B T)^2 e^2}{2m \pi k_B T} \right) B_z^2 \end{aligned} \quad (35)$$

と書ける。式(15)より

$$\mu_I^0 = \frac{1}{en \rho_I^0} = \frac{(2\pi m k_B T)^{1/2}}{8\alpha_I e (k_B T)^2} \quad (36)$$

であるから, 式(35)は

$$s^2 = \frac{x^3}{(1 + x^2 \theta)^2} \frac{\pi}{64} (\mu_I^0)^2 B_z^2 \frac{x^3}{(1 + x^2 \theta)^2} \gamma' \quad (37)$$

と書ける。ただし, ここで,

$$\gamma' = \frac{\pi}{64} (\mu_I^0)^2 B_z^2 \quad (38)$$

である。これを式(22)と比較すれば

$$\gamma = \beta^2 \gamma' \quad (39)$$

という関係が成り立つことがわかる。

以上の関係を念頭におくと, 式(26)より,

$$A = \frac{1}{\rho_L^0 \beta} \int_0^\infty \frac{x^3}{1 + x^2 \theta} dx = \frac{1}{6\rho_I^0} \int_0^\infty \frac{x^3}{1 + x^2 \theta} dx = \frac{1}{\rho_I^0} J_1' = \frac{1}{\rho} \quad (40)$$

となる。ただし,

$$J_1' = \frac{1}{6} \int_0^\infty \frac{x^3}{1 + x^2 \theta} dx \quad (41)$$

とおいた。一方, B についても, 式(28)より,

$$B = \frac{\gamma^{1/2}}{\rho_L^0 \beta^2} \int_0^\infty \frac{x^{9/2} e^{-x}}{(1 + x^2 \theta)^2} dx = \frac{\gamma^{1/2}}{6\rho_I^0} \int_0^\infty \frac{x^{9/2} e^{-x}}{(1 + x^2 \theta)^2} dx \quad (42)$$

となり, 式(38)を代入すると,

$$B = \frac{1}{6\rho_I^0} \frac{\sqrt{\pi}}{8} \mu_I^0 B_z \int_0^\infty \frac{x^{9/2} e^{-x}}{(1 + x^2 \theta)^2} dx = \frac{\sqrt{\pi} \mu_I^0}{48\rho_I^0} B_z \Gamma\left(\frac{11}{2}\right) J_2' \quad (43)$$

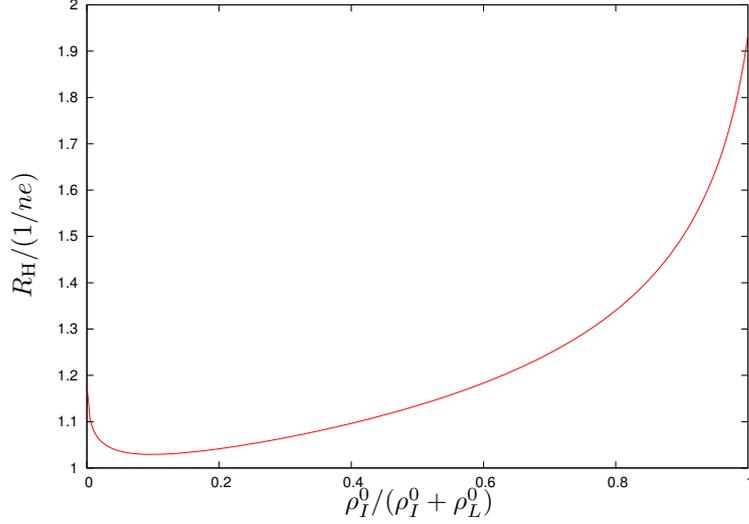


図 1: $R_H/(1/en)$ の $\rho_I^0/(\rho_I^0 + \rho_L^0)$ 依存性

となる。ただし、

$$J'_2 = \frac{1}{\Gamma(\frac{11}{2})} \int_0^\infty \frac{x^{9/2} e^{-x}}{(1+x^2\theta)^2} dx \quad (44)$$

とおいた。式 (40) と式 (43) を式 (6) に代入し、 $\Gamma(\frac{11}{2}) = (9/2)!\sqrt{\pi} = 945\sqrt{\pi}/32$ であることに注意すると、

$$R_H = \frac{315\pi}{512} \frac{\mu_I^0}{\rho_I^0} J'_2 \frac{(\rho_I^0)^2}{J_1'^2} = \frac{315\pi}{512} \frac{1}{en} \frac{J'_2}{J_1'^2} \quad (45)$$

となる。 $\theta = 0$ のときに積分が 1 となるように係数を入れたので形は少しことなるが、この式は文献 [2] の Eq.(3) に相当する。

4 ホール因子の散乱要因依存性

以上で、式 (31) または式 (45) から R_H の $\rho_I^0/(\rho_I^0 + \rho_L^0)$ 依存性を計算することができる。 $\rho_L^0 = 0$ (すなわち $\rho_I^0/(\rho_I^0 + \rho_L^0) = 1$) の近傍を除く場合には式 (31) を用い、 $\rho_I^0 = 0$ (すなわち $\rho_I^0/(\rho_I^0 + \rho_L^0) = 0$) 近傍を除く場合には式 (45) 式を用いて計算すればよい。計算結果を図 1 に示す。(これは文献 [1] の Fig.2 に相当する。) ホール因子は $\rho_I^0/(\rho_I^0 + \rho_L^0)$ に対して直線的に変化するわけではない。 ρ は一般に $\rho_I^0 + \rho_L^0$ とは異なるので、 R_H を ρ_I^0/ρ の依存性を計算することもできる。 ρ は式 (26) または式 (40) から得られる。 R_H の ρ_I^0/ρ 依存性の計算結果を図 2 に示す。(これは文献 [2] の Fig.1 に相当するものであるが、計算結果は少し異なっている。) 図 1 と図 2 の差は、 $(\rho_I^0 + \rho_L^0)$ と ρ が異なるところから来ている。つまり、図 2 は $(\rho_I^0 + \rho_L^0)/\rho$ が 1 より小さく、その割合だけ図 1 より左側にシフトしている。ちなみに、 $F = (\rho_I^0 + \rho_L^0)/\rho$ も式 (26) と式 (40) から計算することができて、図 3 のように両端を除き 1 より小さいことがわかる。(これは文献 [1] の Fig.1 に相当する。)

参考文献

- [1] V. A. Johnson and K. Kark-Horovits, Phys. Rev. **82**, 977 (1951).
- [2] H. Jones, Phys. Rev. **81**, 149 (1951).

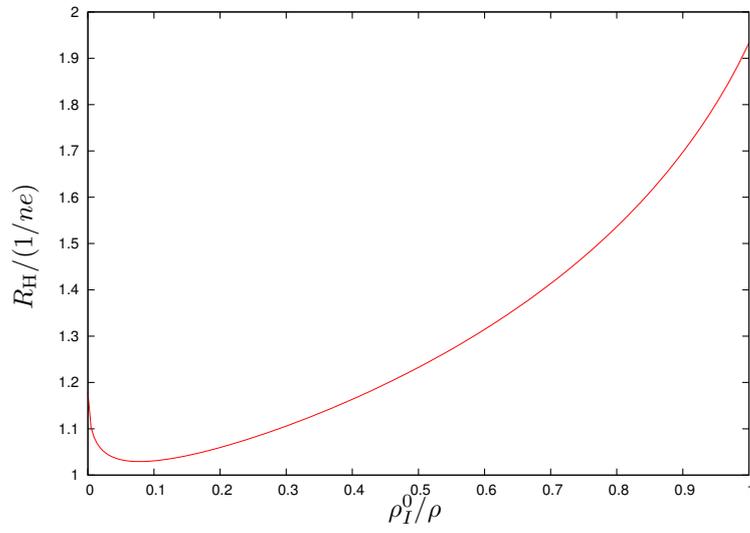


図 2: $R_H/(1/en)$ の ρ_I^0/ρ 依存性

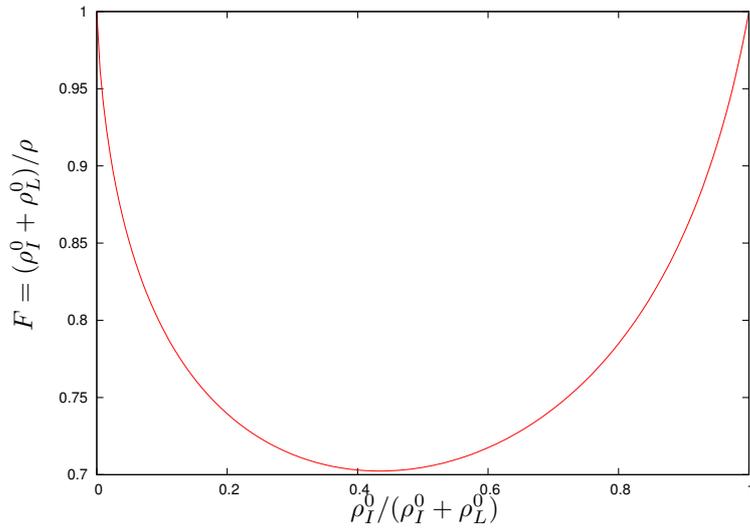


図 3: $F = (\rho_I^0 + \rho_L^0)/\rho$ の $\rho_I^0/(\rho_I^0 + \rho_L^0)$ 依存性