7　固体中の電子のダイナミクス

7.1　半古典論 Semiclassical theory

今までは、静的な問題を扱ってきたが、ここでは電子の運動などの動的な問題を扱う。量子力学ではブロッホ波動関数を含めて、電子の運動は波としての扱いであったが、電気抵抗などでは、電子を粒子として扱ってうまく説明がつけられてきている。

そこで、量子力学での波束という概念を電子に適応して、半分波、半分粒子としてあつかう手法を半古典論という。以下の仮定をする。

１．散乱はたまにしか起こらないとする。つまり平均自由行程 (mean free path) が短いということである。実際、ブロッホの定理で見たように、完全な周期ポテンシャル中では散乱は起こらず、バンドの番号 n と波数 $\boldsymbol{k}$ で指定される状態が得られるので、これは散乱しないということを意味している。それ以外の、不純物・格子欠陥・格子振動によって散乱は引き起こされる。

２．散乱から散乱の間の時間では、電子は半古典的な粒子として運動するとする。これは波束状態を考えればよい。こうすると電子の座標 $\boldsymbol{r}$ と運動量 $\boldsymbol{p}$ が（ほぼ）確定していると考えれらる。式で書けば

$$\psi(\boldsymbol{r},t)=\sum_{\boldsymbol{k}} g(\boldsymbol{k})\psi_{n,\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})e^{-\frac{i}{\hbar}\varepsilon_n(\boldsymbol{k})t} \tag{1}$$

となる。$\boldsymbol{k}$ 空間で $g(\boldsymbol{k})$ が局在した関数であれば、波数 $\boldsymbol{k}$ はほぼ確定し、同時に実空間でも局在した波束を作ることができる。波数空間での広がりが $\Delta k << \pi/a$ であり、実空間での広がりが $\Delta r >> a$ であれば粒子として扱うことができる。さらに、電場磁場などの外場が空間的にゆっくり変化する場合には、この近似は問題ない。

３．バンド間遷移は考えない。つまりバンドの番号 n は 1 つだけ選んで、それ以外のバンドに移ることは考えないことにする。

このときの運動方程式は次のようになる。

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\boldsymbol{r} &= \boldsymbol{v_k}=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon_n(\boldsymbol{k})}{\partial\boldsymbol{k}}\\ \frac{d}{dt}\hbar\boldsymbol{k} &= \boldsymbol{F}=e\left(\boldsymbol{E}+\boldsymbol{v_k}\times\boldsymbol{B}\right)\end{aligned} \tag{2}$$

ここで最初の式は、波束の速度が群速度であることを意味する。２番目の式は運動量 $\boldsymbol{p}=\hbar\boldsymbol{k}$ の微分が右辺の電子にかかる力となるということを意味している。

さらに速度の時間微分を計算してみると、時間に依存するのは $\varepsilon_n(\boldsymbol{k})$ の中の $\boldsymbol{k}$ なので、

$$\frac{d}{dt}v_{\boldsymbol{k},\mu}=\sum_\nu\frac{1}{\hbar}\frac{\partial^2\varepsilon_n(\boldsymbol{k})}{\partial k_\mu\partial k_\nu}\frac{dk_\nu}{dt}=\sum_\nu\frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2\varepsilon_n(\boldsymbol{k})}{\partial k_\mu\partial k_\nu}\hbar\frac{dk_\nu}{dt}=\sum_\nu\left[M^{-1}\right]_{\mu\nu}F_\nu \tag{3}$$

となる。古典的には左辺は加速度なので、右辺は F/m となるべきものである。今、固体のバンド中では $\varepsilon_n(\boldsymbol{k})$ の $\boldsymbol{k}$ 依存性があるために、質量 m の逆数が行列 $\left[M^{-1}\right]_{\mu\nu}$ となっている。この行列を inverse mass tensor という。

7.2　電場中の運動

まず電場だけがかかっている場合を考えよう。運動方程式は単純で

$$\frac{d}{dt}\hbar\boldsymbol{k}=e\boldsymbol{E} \tag{4}$$

である。このことは電場中では波数 $\boldsymbol{k}$ が一定の速さで増加または減少することを意味している。電子の電荷 $e<0$ なので、電場が x の正の方向なら $\boldsymbol{k}$ は負の方向に運動する。

さらにバンド間の遷移は考えないことにしたので、1つのバンドを考えると、その中で電子は $\boldsymbol{k}$ 空間の Brillouine zone の左端に到達し、その後は Brillouine zone の右端から出てくることになる。一方電子の速度は群速度なので、最初 $\boldsymbol{k}=0$ から出発すると考えると、まずは負の群速度をもつ。これは通常の粒子と同じである。しかし、しばらく経って Brillouine zone の左端までくると、そのときの群速度はゼロとなる。さらに波数 $\boldsymbol{k}$ が右端から出てきたときには、群速度は今度は正になる。

これを実空間で書くと、最初に左側に動き始めた電子（波束）はやがて止まり、そこから今度は右側に動き始めることになる。これはバンド内の電子の運動の特徴の1つである。この現象は Bloch 振動と呼ばれる。

7.3 完全に詰まったバンド

バンド間遷移は考えないので、完全に詰まったバンドは、いつまでたっても詰まったままである。これは電流が流れないことを意味する。これをバンド絶縁体という。

式で書けば、電流密度 $\boldsymbol{j}$ は、電荷 e、速度 $\boldsymbol{v_k}$ で動く電子の合計なので、

$$\boldsymbol{j}=e\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\boldsymbol{v_k}=e\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon_n(\boldsymbol{k})}{\partial\boldsymbol{k}} \tag{5}$$

となる。右辺は Brillouine zone 中での $\boldsymbol{k}$ 積分に置き換えられるが、$\varepsilon_n(\boldsymbol{k})$ が周期関数であることを考えると、右辺は 0 であることが分かる。こうして電流密度が 0 となることが示された。

電子はエネルギー（熱）も運ぶことができる。1つの電子はエネルギー $\varepsilon_n(\boldsymbol{k})$ を運ぶので、エネルギー流 (energy current) は

$$\boldsymbol{j}^E=e\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\varepsilon_n(\boldsymbol{k})\boldsymbol{v_k}=e\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\frac{1}{\hbar}\varepsilon_n(\boldsymbol{k})\frac{\partial\varepsilon_n(\boldsymbol{k})}{\partial\boldsymbol{k}} \tag{6}$$

となる。再び右辺を

$$e\sum_{\boldsymbol{k},\sigma}\frac{1}{2\hbar}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{k}}\varepsilon_n^2(\boldsymbol{k}) \tag{7}$$

と書き換えれば 0 となることが分かる。つまり詰まったバンドはエネルギーも運ばない。

7.4 ホール

次に1つのバンドの上の方まで電子がつまった状態を考える。このときの電流はほぼゼロであるが、バンドのトップに少し隙間が空いているので電流が流れる。電流の値は

$$\boldsymbol{j}=e\sum_{\text{占有されている }\boldsymbol{k},\sigma}\boldsymbol{v_k}=e\sum_{\text{すべて }\boldsymbol{k},\sigma}\boldsymbol{v_k}-e\sum_{\text{隙間 }\boldsymbol{k},\sigma}\boldsymbol{v_k}=-e\sum_{\text{隙間 }\boldsymbol{k},\sigma}\boldsymbol{v_k} \tag{8}$$

となる。最後の式は、いかにも $-e$ の電荷（正）を持った隙間部分の粒子が電流を担っているような式になっている。このような考え方を「ホール」という。

たとえば1次元のバンドで考えてみよう。バンドの底の方では群速度

$$v_x=\frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon_n(\boldsymbol{k})}{\partial k_x} \tag{9}$$

は正である。このため、電場で k_x が負の値になると、群速度は負となり、電場と反対の方向に運動する。これが通常の電子である。

一方、バンドのトップの方では群速度が逆になる。つまり電場に対する運動が上の場合の逆になる。これはいかにも電荷が逆の粒子であるようにふるまっていることになる。これがホールである。

7.5 磁場中の運動

一様磁場中では、古典力学では電子はローレンツ力を感じて円運動をする。このときの半径は $r = mv/|e|B$ であり、角振動数 ω は

$$\omega_c = \frac{eB}{m} \tag{10}$$

である。これをサイクロトロン振動数という。磁場が 1 テスラ（10^4 ガウス）とすると、$\omega_c \sim 10^{11}[\mathrm{sec}^{-1}]$ であり、ランダウレベルの間隔 $\hbar\omega_c$ は大体 10^{-4}eV であり、温度に換算するとだいたい 1 K である。

このような磁場中の運動を半古典近似で扱ってみよう。運動方程式は

$$\frac{d}{dt}\hbar\boldsymbol{k} = e\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} \times \boldsymbol{B} \tag{11}$$

なので、まずわかることは $\frac{d}{dt}\boldsymbol{k}$ が $\boldsymbol{B}$ と垂直であり、かつ $\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}}$ とも垂直である。エネルギーの時間変化を調べると

$$\frac{d}{dt}\varepsilon_n(\boldsymbol{k}) = \frac{d}{dt}\boldsymbol{k}\frac{\partial\varepsilon_n(\boldsymbol{k})}{\partial\boldsymbol{k}} = \hbar\frac{d}{dt}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} = 0 \tag{12}$$

となることが分かるので、エネルギーは保存する。これは古典力学でローレンツ力が仕事をしないことと対応している。したがって、フェルミ面上にいた電子は一様磁場中では、フェルミ面に沿って運動する。

例えば通常のフェルミ面のときは、電子は反時計廻りに回る。これに対応して実空間でも、反時計廻りに回転する。一方、バンドのトップに隙間があるような場合には、図を書くと分かるが、波数空間でフェルミ面にそって時計回りで回る。実空間でも時計回りなので、上記の電子の場合と逆回りである。これもホールの電荷が正であることを意味している。

もしフェルミ面が open orbit であった場合、実空間では回転せずに、x 方向で波打ちながら一方向に進む。

図で書くと分かるが、$\boldsymbol{k}$ 空間での回転と実空間での回転は 90 度ずれている。この原因を式によって確認しておこう。$\boldsymbol{k}$ の運動方程式と、ベクトル $\boldsymbol{B}$ との内積を取ると

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{B}\times\frac{d}{dt}\hbar\boldsymbol{k} &= e\boldsymbol{B}\times(\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}}\times\boldsymbol{B}) \\
&= e|\boldsymbol{B}|^2\left(\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}} - (\hat{\boldsymbol{B}}\cdot\boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}})\hat{\boldsymbol{B}}\right) \\
&= e|\boldsymbol{B}|^2\frac{d}{dt}\left(\boldsymbol{r} - (\hat{\boldsymbol{B}}\cdot\boldsymbol{r})\hat{\boldsymbol{B}}\right) \\
&= e|\boldsymbol{B}|^2\frac{d}{dt}\boldsymbol{r}_\perp
\end{aligned} \tag{13}$$

となる。ここで $\hat{\boldsymbol{B}} = \boldsymbol{B}/|\boldsymbol{B}|$、$\boldsymbol{r}_\perp$ は座標の $\boldsymbol{B}$ の垂直成分である。この式から時間 Δt だけ経った後の波数と座標の変化分には

$$\boldsymbol{B}\times\hbar\Delta\boldsymbol{k} = e|\boldsymbol{B}|^2\Delta\boldsymbol{r}_\perp \tag{14}$$

という関係があることが分かる。この式から、$\Delta\boldsymbol{r}_\perp$ は $\Delta\boldsymbol{k}$ と垂直ということがわかる。これが波数空間での運動と実空間での運動が 90 度ずれている原因である。

7.6 ホール効果

最後に磁場と電場が同時にかかった場合を考えてみよう。この場合の運動方程式

$$\frac{d}{dt}\hbar\boldsymbol{k} = e\left(\boldsymbol{E} + \boldsymbol{v}_{\boldsymbol{k}}\times\boldsymbol{B}\right) \tag{15}$$

に前節のような変形を考えると、

$$\boldsymbol{B}\times\hbar\Delta\boldsymbol{k} = e\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{E}\Delta t + e|\boldsymbol{B}|^2\Delta\boldsymbol{r}_\perp \tag{16}$$

が得られる。$\Delta \boldsymbol{r}_\perp$ について求めると

$$\Delta \boldsymbol{r}_\perp = \frac{\hbar}{e|\boldsymbol{B}|^2}\boldsymbol{B} \times \Delta \boldsymbol{k} - \frac{\boldsymbol{B}}{|\boldsymbol{B}|^2} \times \boldsymbol{E}\Delta t \tag{17}$$

となる。右辺第 1 項は全節と同じように回転を引き起こす項であるが、第 2 項は時間が進むにつれて $\Delta \boldsymbol{r}_\perp$ がずれていく項である。後者を Drift 項という。

ドリフトの方向は、磁場と電場両方に垂直な方向である。つまり x 軸に電場を掛けて、z 軸に磁場がかかっている場合、y 方向に電子が流れていく。これが半古典論でのホール効果である。実空間では、電子は回転しながら y 方向にドリフトしていく。

y 方向の電流を計算すると、電子の密度を n と置くと

$$j_y = e\frac{|\boldsymbol{E}|}{|\boldsymbol{B}|}n \tag{18}$$

となるので、y 方向の電気伝導度は

$$\sigma = \frac{en}{|\boldsymbol{B}|} \tag{19}$$

これからホール抵抗が $R_H = 1/ne$ と求められる。