

# 講義ノート 半導体 第6回

2021年5月18日 勝本信吾 東京大学物性研究所 (理学系研究科物理学専攻)



## 第5章 電気伝導の半古典論

電気伝導は光応答と並ぶ重要な応答現象である。何らかの摂動，あるいは外力に対する応答であるから，その度合はともかくとして必然的に非平衡を扱うことになる。ただし，一般に電気伝導現象においてやり取りされるエネルギーはバンド間遷移に伴う光学応答 ( $\sim E_g$ ) に比較すると，桁違いに小さくなる。ここでは線形応答のしかも古典的な場合の非常に基礎的な部分を眺めておく。量子輸送に関しては更に後の講義で述べる。

### 5.1 古典的電気伝導

半導体の電気伝導現象で物理的に興味深いのは何とんでも量子ホール効果を始めとする量子輸送現象である。しかし一方，地球上に溢れている半導体デバイスの多くで重要なのは古典的な伝導である\*1。半導体中の伝導が常温では古典的になる理由はそのキャリア密度の低さにある。まず，半導体中の電気伝導としてバルク (3次元) のものを考えると，通常フェルミ準位はバンドギャップ中に存在し，フェルミ準位付近には状態密度がない。このため，例えば電子のエネルギー分布を考えると，フェルミ分布の裾の方を見ていることになり，温度を固定して見ればマックスウェル分布で近似できる。

半導体を材料にしたものでも，大量にドープしたりヘテロ接合を使って空間的に電子が移動して溜まる場所を作ったりすると，フェルミ準位付近に有限の状態密度を持つ金属状態を作り出すことができる。しかし，そのような場合でも室温付近では多くの場合古典近似が成立する。密度  $n$ ，質量  $m$  のフェルミ粒子系のフェルミ縮退温度は

$$T_F = \frac{\hbar^2}{2mk_B} (3\pi^2 n)^{2/3} : 3 \text{次元}, \quad \frac{\hbar^2}{16\pi mk_B} n : 2 \text{次元} \quad (5.1)$$

であり，半導体に典型的な値を入れてみると，比較的大きなフェルミエネルギーを持つ GaAs の2次元電子系でも70K程度で室温の電子運動エネルギー分布はマックスウェル分布で記述される。また，フェルミエネルギーに比べて分布の広がりが大きく電子を量子力学的波動と見た場合の波数のばらつきが大きいため電子集団としては量子干渉効果が現れにくくなっている。ということで，本節では古典的な伝導でどのような現象が現れるか見ていきたい。

#### 5.1.1 輸送現象と輸送係数

輸送現象とは何らかの物理量の実空間内の移動を意味する。多くの場合は粒子系に問題をマップし，その粒子の移動で輸送現象を考えることができる。例えば，びんと張った弦の上に何らかの方法でその張った直線からのずれを発生させれば「ずれ」は波動として弦上を伝導していく。この時，この「ずれ」を粒子とみなせば「ずれ」の輸送現象が考えられる。固体中では，音波，スピン波 (マグノン) など，様々な素励起が存在しこれらの輸送現象が存在し得る。半導体中の代表的輸送現象である電気伝導では，移動物理量である電荷を運ぶ担い手の粒子をキャリア\*2と呼び，ほとんどの場合すでに導入した電子，及び正孔 (ホール) と呼ばれる多体状態がその実体である。

\*1 伝導の次元は低いものも多く使用されており，そのためには量子閉じ込め効果が使用されている。それでも伝導自身は古典的に理解されるものである。

\*2 「担い手」そのものだが，かたかな単語を使用する。

等方的な空間で通常の熱平衡状態にある粒子系の輸送現象を考えるに際して、無摂動状態での重心は静止しているとする。ここに外部から何らかの摂動を加えた時に応答として生じる物理量の移動が輸送である\*3。特にオームの法則の電圧と電流のように線形応答の場合、その係数を輸送係数 (transport coefficient) と呼ぶ。

半導体系の電気伝導には強い非線形性が現れることが多いが、まずは、線形応答について考えていくことにする。代表格の電場-電流応答では、電流密度  $\mathbf{j}$ 、電場  $\mathbf{E}$  の間に

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}, \quad \mathbf{E} = \rho \mathbf{j} = \sigma^{-1} \mathbf{j} \quad (5.2)$$

の線形関係が考えられる。 $\sigma$  が伝導率テンソル (conductivity tensor)、 $\rho$  が抵抗率テンソル (resistivity tensor) で、これらは互いに逆テンソルの関係にある。

### 5.1.2 ボルツマン方程式

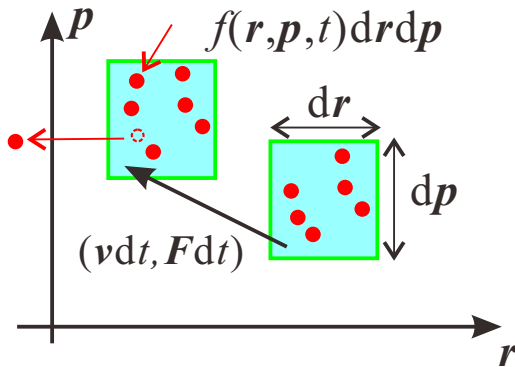


図 5.1 位相空間中の微小体積  $drdp$  中の粒子が  $dt$  間の時間発展で移動し、散乱により入れ替わる様子を模式的に描いたもの。

空間座標  $\mathbf{r}$  と運動量  $\mathbf{p}$  の 6 次元空間 (位相空間) 内の粒子系の分布関数  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$  を考える。 $f$  は点  $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$  の周辺の微小体積  $drdp$  の中に時刻  $t$  に存在する粒子の全体に対する割合が  $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) dr dp$  であることを意味する。

散乱がない場合は、粒子に働く力を  $\mathbf{F}$  として、古典力学的運動は、

$$d\mathbf{r}/dt = \mathbf{v} = \mathbf{p}/m^*, \quad d\mathbf{p}/dt = \mathbf{F} \quad (5.3)$$

で与えられる。 $drdp$  に含まれる粒子の力学的状態はほぼ同じであるから、図 5.1 のように微小時間  $dt$  の間に一斉に上式により時間発展し、

$$f(\mathbf{r} + \mathbf{v}dt, \mathbf{p} + \mathbf{F}dt, t + dt) = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$$

となる。散乱があると、図 5.1 に模式的に示したようにこれによる  $f$  の変化が生じる。これを  $(\partial f / \partial t)_c$  と表すと

$$f(\mathbf{r} + (\mathbf{p}/m^*)dt, \mathbf{p} + \mathbf{F}dt, t + dt) + (\partial f / \partial t)_c dt = f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$$

である。 $f$  を  $dt$  の 1 次まで展開することで、

ボルツマン方程式

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m^*} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = - \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_c \quad (5.4)$$

が得られる。式 (5.4) はボルツマン方程式 (Boltzmann equation)、右辺の散乱による  $f$  の変化項は衝突項と呼ばれる。

衝突項の最も簡単な近似は定緩和時間近似 (constant relaxation time approximation) であり、エネルギーに依存しない定数の緩和時間  $\tau$  を考え、

\*3 超伝導電流や量子ホール端状態の反磁性電流はこの基準から外れるが、通常は輸送現象に含める。

$$-\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_c = -\frac{f - f_0}{\tau} \quad (5.5)$$

とする。\$f\_0\$ は \$\mathbf{F} = \mathbf{0}\$ の熱平衡分布関数で、\$\tau\$ は非平衡状態からの回復に要する時間である。一様な系を考えると \$\partial f / \partial \mathbf{r} = \mathbf{0}\$ より、(5.5) の近似の下ではより一般的な緩和時間近似として \$\tau\$ の運動量 \$\mathbf{p}\$ (あるいは運動エネルギー) 依存を考えるものがある。以下、\$\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}\$ や量子統計など量子論を半古典的に使用する。

### 5.1.3 ドリフト電流・拡散電流

粒子として電荷キャリアを考える。粒子流はすなわち電流である。粒子流は分布関数 \$f\$ が \$\mathbf{p}\$ 空間内で非等方性を生じることで現れる。式 (5.4) で \$\mathbf{p}\$ 以外で摂動として考えられるのは、\$\mathbf{F} (= -e\mathbf{E})\$、および \$\partial / \partial \mathbf{r}\$ である。前者による摂動、すなわち、外部電場などの加速により分布関数 \$f(\mathbf{r}, \hbar \mathbf{k}, t)\$ に \$\mathbf{k}\$ 空間で偏り (非対称) が生じることで実空間でキャリア全体の流れ—ドリフト電流 (drift current)—が生じるのに対し、後者の実空間 (\$\mathbf{r}\$) での偏りによって生じるキャリア移動を拡散電流 (diffusion current) と呼ぶ。

空間的に一様な電子系に一様電場 \$\mathbf{E}\$ がかった定常状態を考える。衝突項は残し、\$\mathbf{r}, t\$ 依存を略して \$\mathbf{p}\$ のみを変数とする。式 (5.4) に \$\mathbf{p}\$ に依存する緩和時間近似を適用すると、

$$-e\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = -\frac{f - f_0}{\tau(\mathbf{p})} \quad \therefore f(\mathbf{p}) = f_0(\mathbf{p}) + e\tau(\mathbf{p})\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}}$$

\$\mathbf{E}\$ を摂動と考え、右辺第2項の \$f\$ を \$f\_0\$ として \$\mathbf{E}\$ の1次、この \$f\$ を再度右辺に代入して \$\mathbf{E}\$ の2次と逐次代入で \$\mathbf{E}\$ のべき展開が得られる。1次では

$$f(\mathbf{p}) \simeq f_0(\mathbf{p}) + e\tau(\mathbf{p})\mathbf{E} \cdot (\partial f_0 / \partial \mathbf{p}) \quad (5.6)$$

であるが、\$f(\mathbf{p}) \simeq f\_0(\mathbf{p} + e\tau(\mathbf{p})\mathbf{E})\$ を \$\mathbf{E}\$ について展開したのと同じ形をしており、分布が \$\mathbf{p}\$ 空間で \$-e\tau(\mathbf{p})\mathbf{E}\$ だけシフトした、と見ることもできる。\$\tau\$ が \$\mathbf{p}\$ に対して一定であれば一様なシフトとなる。

電流を求めるためには \$\mathbf{k}\$ 空間内で \$\mathbf{v}(\mathbf{k})f(\mathbf{k})\$ を積分することになる。\$\mathbf{E} = (\mathcal{E}\_x, 0, 0)\$ とすると、上の近似ではこれは、\$x\$ 成分以外は奇関数の対称積分により消えるため

$$\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \mathbf{v}(\mathbf{k}) \left( f_0 + e\tau\mathbf{E} \cdot \frac{\partial f_0}{\hbar \partial \mathbf{k}} \right) = \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\hbar k_x}{m} e\tau\mathcal{E}_x \frac{\partial f_0}{\hbar \partial k_x} = \frac{e\mathcal{E}_x}{m} \int \mathcal{D}(E)\tau(E) \frac{\hbar^2 k_x^2}{m} \frac{\partial f_0}{\partial E} dE \quad (5.7)$$

である。ここで、多くの場合にそうであるように、緩和時間 \$\tau\$ にエネルギー依存性があるとした (1次近似であれば OK)。\$\hbar^2 k\_x^2 / 2m\$ は \$x\$ 方向の運動エネルギーで、等分配則より \$E/3\$ である。

(5.7) で系が金属的でフェルミ縮退していると、\$\partial f\_0 / \partial E\$ は \$-\delta(E - E\_F)\$ で近似される。\$\mathcal{D}(E) = A\sqrt{E}\$ とすると (バンド端をエネルギーの原点とする)、(5.7) は

$$\langle v_x \rangle = -A \frac{e\mathcal{E}_x}{m} \frac{2\tau(E_F)}{3} E_F^{3/2}$$

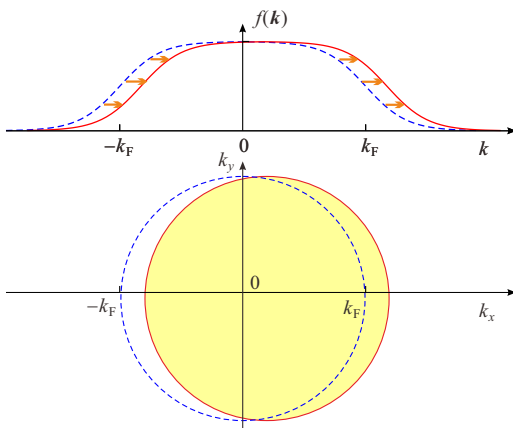


図 5.2 フェルミ縮退した電子気体が、電場等により加速され波数空間において分布 \$f(\mathbf{k})\$ が平衡位置 (破線) から小さな矢印のようにシフトしている様子を模式的に示したもの。下図は2次元波数空間で「フェルミ円」がずれる様子。現実の系に対してずれ等が強調されている。

ここで、全粒子濃度  $n$  は

$$n = \int_0^{E_F} \mathcal{D}(E) dE = A \frac{2}{3} E_F^{3/2}$$

であるから、電気伝導度  $\sigma = j/E = -e\langle v_x \rangle / \mathcal{E}_x$  に対して

ドルーデの電気伝導度

$$\sigma = \frac{e^2 n \tau(E_F)}{m} \quad (5.8)$$

という、良く知られたドルーデの電気伝導度 (Drude conductivity) の表式が得られた。

一方、粒子密度が低く温度が高くてマックスウェル近似が成立する場合、 $f_0 \approx A \exp(-E/k_B T)$  であるから、

$$-\frac{\partial f_0}{\partial E} = -\frac{A}{k_B T} \exp\left[-\frac{E}{k_B T}\right] = -\frac{f_0}{k_B T} = -\frac{f_0}{(2\langle E \rangle / 3n)}$$

最後の変形は、1粒子当りの1自由度平均運動エネルギーが  $k_B T / 2$  であることを用いている。電気伝導度は

$$\sigma = e^2 \int \tau(E) \mathcal{D}(E) \frac{2E}{3m} \frac{3n f_0}{2\langle E \rangle} dE = \frac{ne^2 \langle \tau \rangle_E}{m} \quad (5.9)$$

と再びドルーデ型になる。ここで、 $\langle E \rangle_E$  は、エネルギーの重みを付けた平均

$$\langle \tau \rangle_E = \frac{\langle \tau E \rangle}{\langle E \rangle} = \frac{\int_0^\infty \tau(E) E^{3/2} f_0 dE}{\int_0^\infty E^{3/2} f_0 dE} \quad (5.10)$$

を表す。

次に  $f$  の実空間分布の偏りによって生じる拡散電流を考える。ボルツマン方程式 (5.4) で  $\mathbf{F} = 0$  の場合に定緩和時間近似 (5.5) を  $f = f_0 + f_1$  の空間分布に適用して

$$\mathbf{v} \cdot \nabla f = -f_1 / \tau, \quad f_1 \text{ の 1 次まで取って } f_1 = -\tau \mathbf{v} \cdot \nabla f_0. \quad (5.11)$$

空間中にある体積  $V$  を考え、一定の拡散電流  $\mathbf{J}$  が流れているとすると、

$$\mathbf{J} = (-e) \int_V \tau \mathbf{v} (\mathbf{v} \cdot \nabla f_0) d\mathbf{r}.$$

$\nabla f_0$  の向きは一定としこれを  $x$  軸にとると、 $\mathbf{v}$  の内、 $v_x$  以外の成分は積分の際対称性により消える。 $\langle v_x^2 \rangle = \langle v^2 \rangle / 3$  であり、温度は一律で  $\langle v^2 \rangle$  等も空間変化していないとすると、単位体積に直して

$$j_x \text{ (電流密度)} = -e \int_{\text{単位体積}} \tau v_x^2 \frac{\partial f_0}{\partial x} d\mathbf{r} = -e \left\langle \frac{\tau v^2}{3} \right\rangle \frac{\partial n}{\partial x}.$$

すなわち、

$$\mathbf{j} = (-e) D \nabla n, \quad D = \langle \tau v^2 / 3 \rangle. \quad (5.12)$$

$D$  は拡散係数 (diffusion constant) と呼ばれ定緩和時間近似では、

アインシュタインの関係式

$$D = \frac{\tau}{3} \langle v^2 \rangle = \frac{\tau k_B T}{m^*} = \frac{\mu}{e} k_B T \quad (5.13)$$

である。式 (5.13) はアインシュタインの関係式 (Einstein relation) と呼ばれる。最右辺の  $\mu$  は、後出 (5.20) で定義される移動度である。

### 5.1.4 ホール効果

電流に対する外部磁場の影響 (Galvano-Magnetic 効果, GM 効果) について取り扱う. ボルツマン方程式において電子に働く力としてローレンツ力を考える. 磁束密度  $\mathbf{B}$  の磁場が印加された電子系に対して,  $z$  軸を磁場に平行方向にとると, 速度  $\mathbf{v}$  の電子に加わるローレンツ力は,  $\mathbf{F} = -e\mathbf{v} \times \mathbf{B}$  で  $xy$  面内成分のみ持つ. 有効質量が等方的な場合, 伝導率テンソル (5.2) は, ローレンツ力の対称性によって

$$\mathbf{j} = \frac{ne^2}{m^*} \begin{pmatrix} A_l & -A_t & 0 \\ A_t & A_l & 0 \\ 0 & 0 & A_z \end{pmatrix} \mathbf{E} \quad (5.14)$$

という形になる. 簡単に図 5.3 にあるように,  $y$  方向が有限で  $x$  方向に帯状に伸びた試料に電場  $\mathbf{E} = (\mathcal{E}_x, 0, 0)$  を加えた場合を考える.  $j_y$  によって運ばれたキャリアは図 5.3 のように試料の端にたまって試料内部に電場  $\mathbf{E}_{\text{int}} = (0, \mathcal{E}_y, 0)$  を形成し, 定常状態では  $j_y = 0$  である.

このように電流と磁場に垂直な電場を生ずる効果をホール効果 (Hall effect),

$$R_H = \frac{\mathcal{E}_y}{J_x B_z} \quad (5.15)$$

に相当する比例係数をホール係数 (Hall coefficient) と呼ぶ. ホール電場  $\mathcal{E}_y$  は  $j_y = 0$  より,

$$\mathcal{E}_y = -(A_t/A_l)\mathcal{E}_x \quad (5.16)$$

であるから,  $\mathbf{j} = \hat{\sigma}\mathbf{E}$  で定義される伝導度テンソルは

$$\sigma_{xx} = \frac{ne^2}{m^*} A_l = \frac{ne^2}{m^*} \left\langle \frac{\tau}{1 + (\omega_c\tau)^2} \right\rangle_E, \quad \sigma_{xy} = \frac{ne^2}{m^*} \left\langle \frac{\omega_c\tau^2}{1 + (\omega_c\tau)^2} \right\rangle_E, \quad (5.17)$$

$$R_H = -\frac{1}{ne} \frac{A_t}{\omega_c(A_l^2 + A_t^2)} \quad (5.18)$$

などと求まる. 磁場が弱く,  $\omega_c\tau \ll 1$  であれば,

$$R_H = -\frac{1}{ne} \frac{\langle \tau^2 \rangle_E}{\langle \tau \rangle_E^2} = \frac{1}{n(-e)} \frac{\Gamma(2s+5/2)\Gamma(5/2)}{(\Gamma(s+5/2))^2} = \frac{r_H}{n(-e)} \quad (5.19)$$

となり,  $s$  がわかればホール係数の測定からキャリア濃度とキャリアの符号を知ることができる (正孔の場合は  $-e$  が  $e$  で置換される).  $r_H$  はホール因子 (Hall factor) と呼ばれ, 高温では散乱機構に依存するが, 多くの場合 1 前後の値を取り, 一定緩和時間近似 ( $s = 0$ ) の範囲や低温でフェルミ縮退している場合などは 1 となる (表 5.1 参照).  $\tau$  が定数 ( $s = 0$ ) の近似を行うと, マックスウェル分布でなくても (5.19) は成立し, 括弧内に示した良く知られた表式となる.

電場  $\mathcal{E}$  に対して, 電子が平均して獲得する速さを  $v$  とすると, **移動度** (mobility) は  $v/|\mathcal{E}|$  で定義され, 緩和時間近似では,

$$\mu = \frac{v}{|\mathcal{E}|} = \frac{nev}{ne|\mathcal{E}|} = \frac{j}{ne|\mathcal{E}|} = \frac{\sigma}{ne} = \sigma|R_H| = \frac{e\tau}{m^*} \quad (5.20)$$

のように書かれる.

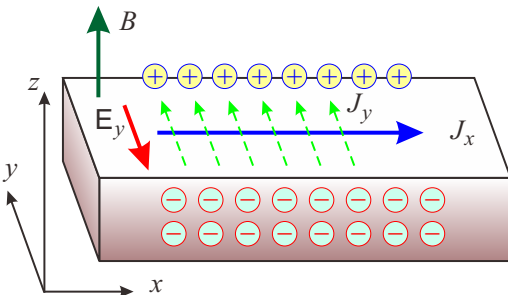


図 5.3 磁場が  $z$  方向にかかっている時,  $x$  方向に電流を流すと, ローレンツ力により  $y$  方向の電流  $J_y$  が流れるが, 試料の端にたまった電荷による電場 (ホール電場) によって打ち消され, 定常状態ではゼロになる.

散乱機構	$E$ 指数	$T$ 指数	ホール因子
音響フォノン	-1/2	-3/2	1.18
イオン化不純物 (弱遮蔽)	+3/2	+3/2	1.93
イオン化不純物 (強遮蔽)	+1/2	+1/2	1.18
中性不純物	0		1.00
圧電フォノン	+1/2		1.10

表 5.1 様々な散乱機構のホール因子.  $E, T$  は散乱時間エネルギー依存指数であるが, ここでは解説を略す. 文献 [1] などを見よ.

### 5.1.5 様々な散乱

ボルツマン方程式を緩和時間近似で考えてきたが, 緩和にはフォノンその他の固体内自由度との散乱など様々な機構が寄与する. 各緩和機構に対してそれぞれ緩和時間近似を考え, 各緩和時間を  $\tau_\alpha$  のように指数付けすると, 各緩和の頻度 ( $\propto \tau_\alpha^{-1}$ ) が全体の緩和に加算的に働くと考えて得られるマティーンセンの規則

$$\tau^{-1} = \sum_{\alpha} \tau_{\alpha}^{-1} \quad (5.21)$$

が良く成立する. 緩和時間近似で古典的な電気伝導を扱う場合, キャリアの散乱は各種の散乱の平均時間間隔 (散乱時間) とマティーンセンの規則 (5.21) を通して緩和時間に繰り込まれる. 従って, それぞれの散乱過程の物理的性格は, 例えばある系のパラメーターに対する散乱時間の依存性が異なれば, このパラメーターに対する電気伝導度の依存性を見ることでどのような散乱機構が主に電気伝導を制限しているかがわかる. バンド電子 (正孔) の散乱現象は, バンド電子の様々な特徴, また散乱の要因により極めて多岐にわたる (図 5.4). 本節では, 代表的な散乱機構とその特徴を, 更にごく一部について列挙する.

**フォノン散乱**: 格子振動を量子化したものがフォノンである. フォノンは波数  $k_p \rightarrow 0$  で運動エネルギー  $E(k_p) \rightarrow 0$  となる分散を持つ音響フォノンと,  $E(k_p \rightarrow 0)$  が有限となる光学フォノンに大別できる. これは, ごく平たくには隣接する振動ユニット (構造の簡単な結晶では構成原子) の振動位相が同位相 (音響) か逆位相 (光学) かの違いによる. 格子振動は, バンド電子から見れば周期ポテンシャルの歪みであり, これにより散乱を生じる. 散乱の際に反跳によって原子核の位置にも変化が生じ, フォノン側にも散乱となる. フォノン散乱は, 一般には電子系から見るとエネルギーのやり取りを伴う非弾性散乱である.

音響フォノン散乱による緩和時間のエネルギー依存性は一般に  $\tau(E) = a_{ph} E^{-1/2}$  である. エネルギー重み付き平均散乱時間  $\langle \tau_{ph} \rangle_E$  は,

$$\langle \tau_{ph} \rangle_E = a_{ph} (k_B T)^{-1/2} \frac{\Gamma(2)}{\Gamma(5/2)} = \frac{8\sqrt{\pi} a_{ph}}{3\sqrt{k_B T}} \quad (5.22)$$

となる. 高温近似ではフォノンのエネルギー分布により  $a_{ph} \propto (k_B T)^{-1}$  であるから, 音響フォノン散乱によって制限される移動度  $\mu_{ph}$  の温度依存性は

$$\mu_{ph} \propto \langle \tau \rangle_E \propto (k_B T)^{-3/2} \quad (5.23)$$

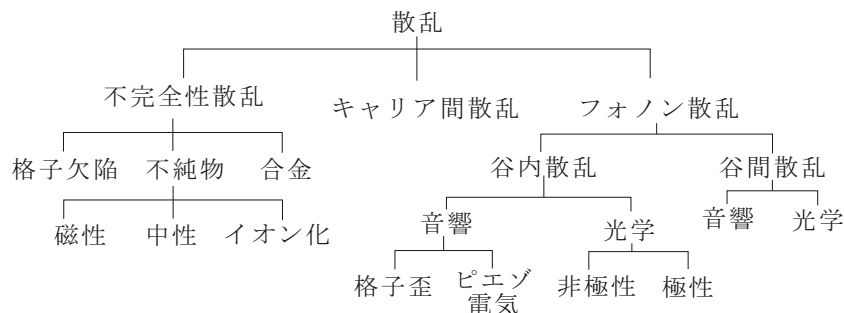


図 5.4 要因等による散乱の分類. 要因, 形態, エネルギーのやり取りなどにより様々な分類法がある.

のようになる。一方、光学フォノンは  $k \approx 0$  でもエネルギーが大きく、弱い電場に対する伝導には影響しない。一方、強い電場で電子が熱平衡から大きく外れて運動するような、ホットエレクトロン伝導においては光学フォノン散乱は大きな影響を及ぼす。

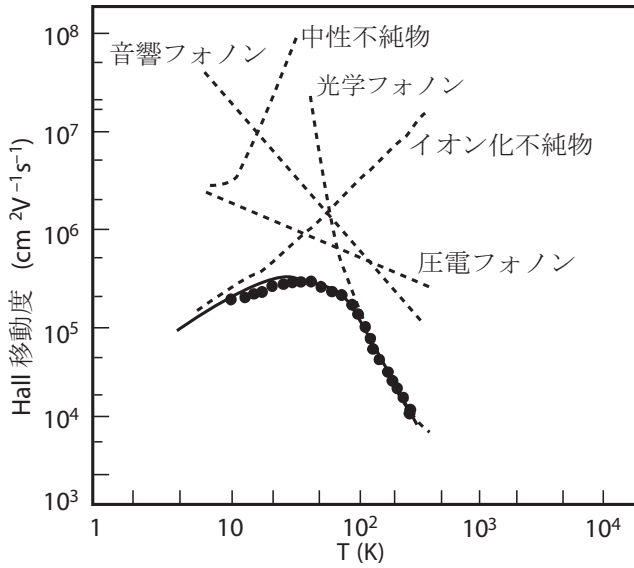


図 5.5 GaAs の Hall 効果から求めた移動度 (実験値, 黒丸) と, (5.21) に様々な散乱機構とその温度依存性を考え, 実験値にフィットした結果 (実線). 破線は, 各散乱機構による温度依存性. [?]

**イオン化不純物散乱**: 固体中の不純物原子はしばしば電子を放出して正イオン, あるいは捕獲して負イオンとなり, バンド電子に対してクーロンポテンシャルを形成し, 散乱を引き起こす。ただし, 大抵は周辺の電荷キャリアにより遮蔽されるため, 距離  $r$  に対して  $1/r$  のクーロン型ではなく,  $e^{-r/L_D}/r$  の湯川型として働く。イオン化不純物がスピン由来の磁気モーメントを持つ場合は, 磁性不純物散乱の側面も持ち, 内部自由度により近藤効果のような特異な現象が生じる。内部自由度がない場合は, 単純ポテンシャル散乱で弾性散乱である。

湯川ポテンシャルによるキャリアの散乱に関しては, 遮蔽が弱く  $L_D$  が長い場合は, キャリアがマックスウェル分布の場合

$$\tau_{\text{ion}} \propto T^{3/2}, \quad \mu_{\text{ion}} \propto \frac{T^{3/2}}{\ln(1+x) - \frac{x}{1+x}}, \quad x \equiv \frac{24m^* \lambda k_B T}{\hbar^2} \quad (5.24)$$

となる寄与を与える。遮蔽が強く,  $L_D$  が非常に短い場合, 散乱はデルタ関数ポテンシャル的になり,

$$\tau_{\text{ion}} \propto T^{1/2}, \quad \mu_{\text{ion}} \propto T^{1/2} \quad (5.25)$$

である。

GaAs の Hall 効果と電気伝導度から求めた移動度に対して, 式 (5.21) に様々な散乱機構とその温度依存性を考えてフィットした結果を図 5.5 に示した。破線が, 夫々個別の散乱機構による移動度への制限を示しており, これらで制限された結果として移動度が決まっていることがわかる。

## 5.2 熱伝導と電気伝導

ボルツマン方程式の中で位相空間内の勾配に起因する左辺 2 項について, それぞれがドリフト電流, 拡散電流を生じることを見たが, 両者がゼロでない場合を考える必要がある現象もある。それが本副節のテーマ熱電効果である。半導体内に温度勾配があると, これに応じて熱の流れ, 熱流 (heat current, thermal flux) が生じる。熱の運び手には, 電荷と異なり, 電荷キャリア以外に格子振動 (フォノン phonon) が存在し, 後者はフォノン・ドラッグ (phonon drag) 効果と呼ばれる。が, ここではキャリアによる熱流のみを考える。また, 以下の議論ではしばらく, ジュール発熱 (Joule heating) は考えない。

### 5.2.1 熱伝導度

濃度  $n$  のキャリアによる  $x$  方向の熱流密度 (thermal flux density)  $j_{qx}$  を

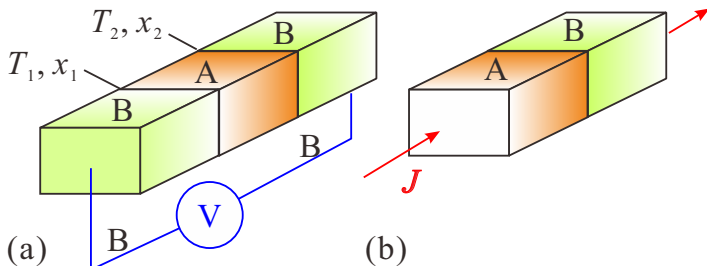
$$j_{qx} = \langle n v_x (E - \mu) \rangle = \int_0^\infty v_x (E - \mu) f(E) \mathcal{D}(E) dE \quad (5.26)$$

で定義する。すなわち、温度勾配 (temperature gradient)  $\nabla T$  がある時、キャリア熱伝導度  $\kappa_n$  (thermal conductivity) を

$$\kappa_n = -\frac{j_{qx}}{\partial T/\partial x} \quad (5.27)$$

で定義する。ベクトル表記では、 $j_q = -\hat{\kappa}\nabla T$ 。

## 5.2.2 熱電効果



(5.27) のようにキャリアによる熱流が生じているとき、何らかの形で電気的な効果が生じていると考えられる。このような、温度勾配と電気効果の複合効果を熱電効果 (thermoelectric effect) という。

左図 (a) のように、有限幅の伝導体 A の端の温度をそれぞれ  $T_1, T_2$  として、ここに別の伝導体 B をつなぎ、これを  $T_1, T_2$  の間の一定温度のところまで引っ張り、入力抵抗無限大の電圧計をつなぐと、定常状態では電流は流れないので、両端には温度勾配による電流の導体 A, B による差を補償して流れなくするための電圧  $V_{AB}$  が立つ。これをゼーベック効果 (Seebeck effect), この電圧対温度差 ( $\Delta T = T_1 - T_2$ ) の比

$$S_{AB} = \frac{V_{AB}}{\Delta T} \quad (5.28)$$

をゼーベック係数 (Seebeck coefficient) という。一方、(b) のように、A, B の接合を考え両端を同じ温度にした状態で外部から電流  $J$  を流すとこれによる熱流  $Q$  が生じる。接合面に電荷がたまらないとすると、 $J$  は両導体で共通であるが、その熱流との比は異なるため、接合面では熱流が不連続となりこのため発熱あるいは吸熱現象が生じる。これをペルチエ効果 (Peltier effect) といい、発熱速度  $Q_{AB}$  と  $J$  の比

$$\Pi_{AB} = \frac{Q_{AB}}{J} \quad (5.29)$$

をペルチエ係数 (Peltier coefficient) という。これを (a) のような BAB の接合で行えば、同じ電流が2つの接合で反対方向に流れることになるので、一方の接合で吸熱が起これば、他方では同じだけの発熱が生じることになる。

また、異種伝導体の接合でなく一様な導体であっても、電流  $J$  と温度勾配 ( $x$  方向とする)  $\partial T/\partial x$  (temperature gradient) が存在すると吸熱または発熱が生じる。これらの積と単位長さ当りの発熱  $\partial Q/\partial x$  とは比例関係にあり、これをトムソン効果 (Thomson effect), その係数

$$\tau = \frac{\partial Q/\partial x}{J(\partial T/\partial x)} \quad (5.30)$$

をトムソン係数 (Thomson coefficient) と呼ぶ。

これらの間には、

$$\Pi_{AB} = S_{AB}T, \quad \tau_A - \tau_B = T \frac{dS_{AB}}{dT} \quad (5.31)$$

という簡単な関係が成立し、ケルビンの関係式 (あるいはトムソンの関係式, Kelvin relations or Thomson relations) (付録 5B) という。これより、

$$S_A(T) \equiv \int_0^T \frac{\tau_A(T')}{T'} dT' \quad (5.32)$$

などとすると、

$$S_{AB} = S_A - S_B \quad (5.33)$$



であり、組み合わせによらない物質固有のゼーベック係数  $S$  が定義できることになる。

以上から、結局、ゼーベック効果とはいわゆる熱起電力のことであり、温度差  $\Delta T$  がある時にこの温度差領域に  $V$  だけの電位差が生じているとすると、 $V$  は  $\Delta T$  に比例し、その比例係数がゼーベック係数である。ただし、実際に測定するとなると、電位差を測定するにはリードを付けて電圧計まで引っ張ってこなくてはならないが、リードにも熱起電力が存在するから、電圧計に現れる電圧は、リードの熱起電力を差し引いたものになる。(5.33)はその事を示しており、熱電対 (thermocouple) は逆に2種類の物質のゼーベック係数を知ることによって温度差  $\Delta T$  を得るためのセンサーである。

### 5.2.3 ボルツマン方程式と熱電係数

熱電効果を考えるため、ボルツマン方程式の緩和時間近似 (3.20), (3.21) を考える。定常状態を考えるため、 $\partial f/\partial t = 0$  とし、再度方程式を書いておくと便宜のため変数を少し書き換え、

$$\mathbf{v} \cdot \nabla f + \frac{\mathbf{F}}{m} \nabla_v f = -\frac{f - f_0}{\tau(E)}. \quad (5.34)$$

熱平衡からのずれは小さいとし、左辺の被微分分布関数  $f$  を2項とも熱平衡分布関数  $f_0$  で置き換える近似をする。

温度勾配  $\nabla T$  がある場合に  $\nabla f_0$  を次のように変形する。まず、

$$\nabla f_0 = \nabla T \frac{\partial f_0}{\partial T}.$$

ここで、 $f_0$  には、 $E$  と  $T$  は常に  $-(E - E_F)/k_B T$  という組み合わせで現れるから、これを形式的に  $a$  と置くと、

$$\frac{\partial f_0}{\partial T} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{\partial E}{\partial a} \frac{\partial a}{\partial T} = \frac{\partial f_0}{\partial E} (-k_B T) \frac{E - E_F}{k_B T^2} = \frac{\partial f_0}{\partial E} \frac{E_F - E}{T} \quad \text{より}$$

$$\nabla f_0 = \nabla T \frac{E_F - E}{T} \frac{\partial f_0}{\partial E}. \quad (5.35a)$$

$$\text{また } \nabla_v f_0 = \nabla_v E \frac{\partial f_0}{\partial E} = m \mathbf{v} \frac{\partial f_0}{\partial E}. \quad (5.35b)$$

電場  $\mathbf{E}$  と温度勾配  $\nabla T$  が存在する場合に、(5.34) を (5.35) を使って書き換えると、

$$f = f_0 - \tau(E) \mathbf{v} \cdot \left[ -e \mathbf{E} + \frac{E_F - E}{T} \nabla T \right] \frac{\partial f_0}{\partial E}. \quad (5.36)$$

ゼーベック係数に適用してみる。 $x$  方向に電場  $\mathcal{E}_x$  がかかっているとする。 $x$  方向の電流は、

$$j_x = -e \langle n v_x \rangle = -e \int_0^\infty v_x f(E) \mathcal{D}(E) dE = e \int_0^\infty v_x^2 \tau \left[ -e \mathcal{E}_x + \frac{E_F - E}{T} \frac{\partial T}{\partial x} \right] \frac{\partial f_0}{\partial E} \mathcal{D}(E) dE.$$

ゼーベック係数は  $j_x = 0$  の場合に測定されるから、上記を0と置くと、

$$\begin{aligned} S = \frac{\mathcal{E}_x}{\partial T / \partial x} &= \int_0^\infty v_x^2 \tau \frac{E_F - E}{eT} \frac{\partial f_0}{\partial E} \mathcal{D}(E) dE \Bigg/ \int_0^\infty v_x^2 \tau \frac{\partial f_0}{\partial E} \mathcal{D}(E) dE \\ &= \frac{1}{eT} \left[ E_F - \int_0^\infty \tau E^2 \frac{\partial f_0}{\partial E} \mathcal{D}(E) dE \Bigg/ \int_0^\infty \tau E \frac{\partial f_0}{\partial E} \mathcal{D}(E) dE \right] \end{aligned} \quad (5.37)$$

となる。ここで、 $v_x^2$  を  $2E/3m$  で置き換えている。

以上の扱いを物理的に見ると、(5.36) で右辺の被積分項の内、前節で見たように、第1項は電場によるドリフト電流を表し、第2項は温度分布による拡散電流を表している。これらをキャンセルすることでゼーベック係数が得られるわけであるが、従ってゼーベック効果とは拡散電流によって試料内に電荷分布が生じ、これによって発生した電場によるドリフト電流が拡散電流をちょうどキャンセルして定常状態を生じたものと見ることが出来る。

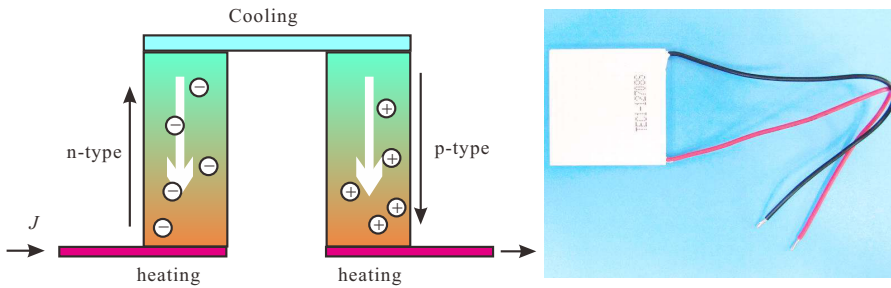


図 5.6 左：ペルチエ素子の概念図．p 型半導体と n 型半導体を交互に貼りあわせて電流を流し，キャリアの流れは一方方向として片方の端から反対方向へ熱を移動する．右：ペルチエ素子の写真．秋月電子通商通販サイトより．

マックスウェル分布近似をして， $\partial f_0/\partial E = -f_0/k_B T$  とし，更に  $\tau \propto E^s$  のような依存性を持つとすると，

$$S = -\frac{1}{eT} \left[ \frac{\langle \tau E \rangle_E}{\langle \tau \rangle_E} - E_F \right] = -\frac{1}{eT} \left[ \left( \frac{5}{2} + s \right) k_B T - E_F \right]. \quad (5.38)$$

これから， $S$  の温度依存性を測定することで， $E_F$  および  $s$  を測定できる．また，上記は電子の場合についての計算であるが，正孔については， $-e$  が  $+e$  に変化することから， $S$  の測定からキャリアの電荷符号もわかる．このマックスウェル分布近似の結果が，キャリア濃度その他の物質定数にほとんどよらず，主要な緩和機構に依存する  $\tau$  の  $E$  に対するべきと  $E_F$  で決まっていることに違和感を感じる方もいるかもしれない．が，上記のように，拡散電流とドリフト電流のバランスであると考えれば，両者の中に入っている物質定数を代表するパラメーターである拡散定数と移動度との間にはアインシュタインの関係 (5.13) が成立するから，これら物質定数が温度を残して両辺でキャンセルアウトすることが自然に理解される．キャリア濃度も両辺に入ってキャンセルし，これが「電流」がバランスの一方に入っているためにキャリア濃度が物理量として残るホール係数との違いになっている．また，ペルチエ効果，トムソン効果についても，境界条件が異なるだけで物理的起源は同じであり，ケルビンの関係式が成立することも当然である．

## 5.2.4 ペルチエ素子

ケルビンの関係式により，ペルチエ係数もキャリアの電荷符号によってその符号が変わる．これを利用して，n 型半導体，p 型半導体を伝導体として交互に貼り合わせ，片方で吸熱，反対側で発熱を起こすように，すなわち，一方的な熱流を生じさせるようにしたものをペルチエ素子と言う．

ペルチエ素子は，PC の CPU の冷却にファンと組み合わせて一時は良く使用された．また，古くから，寝室用の冷蔵庫など，騒音を極力抑えたい場所での冷却にも使用されている．

## 付録 4C：半導体の格子振動 (続き)

前回に続いて，3 次元結晶格子振動の例として，閃亜鉛鉱型結晶の格子振動について簡単に見ておく．

### 4C.2 閃亜鉛鉱型結晶の格子振動

単位胞内に 2 種類の原子がいる 3 次元結晶の例として閃亜鉛鉱型 (ZB) 結晶を取り上げ，格子振動を考える．ブラベー格子は fcc であるが，ZB 結晶構造は，fcc の「格子点」に 1 個の原子を置いた「fcc 結晶」を 2 種類の原子について，すなわち 2 つの格子定数  $a$  を共通とする結晶を考え，これを  $a(1/4, 1/4, 1/4)$  だけずらすことで得ることができる．この結晶の原子の変位ベクトルを  $\mathbf{u}_{\alpha, \mathbf{R}}$  で表す．ここで， $\alpha$  は，上記 fcc 結晶をそれぞれ「副格子」と考え，そのインデックス， $\mathbf{R}$  は格子点で，煩雑を避けるため格子点のインデックスは略している．格子運動エネルギーは

$$E_K = \sum_{\alpha, \mathbf{R}} \frac{1}{2} M_{\alpha} \dot{\mathbf{u}}_{\alpha, \mathbf{R}}^2 \quad (4C.6)$$

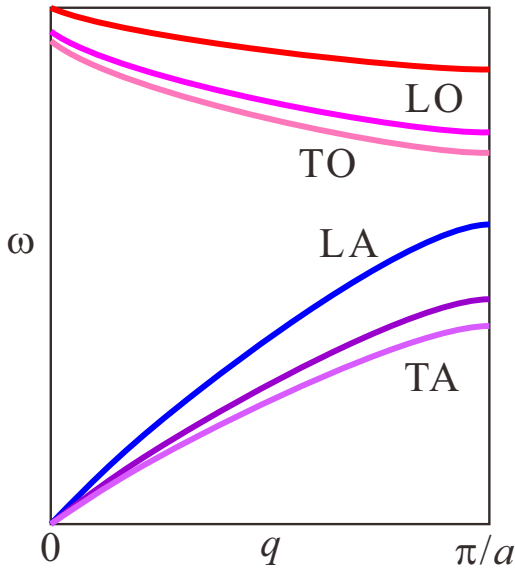


図 4C.3 閃亜鉛鉱型結晶の格子振動モードの分散模式図.

である．一方，ポテンシャルエネルギーは，各ポテンシャル  $V(\mathbf{r})$  を 2 次まで展開して

$$E_P = \sum_{\alpha\alpha', \mathbf{R}\mathbf{R}', jj'} u_{\alpha, \mathbf{R}}^j u_{\alpha', \mathbf{R}'}^{j'} \frac{\partial^2 V}{\partial u_{\alpha, \mathbf{R}}^j \partial u_{\alpha', \mathbf{R}'}^{j'}}, \quad j = x, y, z \quad (4C.7)$$

とする．運動方程式は，例えば，ラグランジアン  $\mathcal{L} \equiv E_K - E_P$ ，一般座標  $q_k \equiv u_{\alpha, \mathbf{R}}^j$  を定義し，ラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_k} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_k} = 0$$

から得ることができ，(4C.6)，(4C.7) より，

$$M_\alpha \ddot{u}_{\alpha, \mathbf{R}}^j = - \sum_{\alpha', \mathbf{R}', j'} \frac{\partial^2 V}{\partial u_{\alpha, \mathbf{R}}^j \partial u_{\alpha', \mathbf{R}'}^{j'}} u_{\alpha', \mathbf{R}'}^{j'} \equiv - \sum_{\alpha', \mathbf{R}'} \mathbf{C}_{\alpha\alpha', \mathbf{R}\mathbf{R}'} \mathbf{u}_{\alpha', \mathbf{R}'} \quad (4C.8)$$

となる．最右辺はテンソル-ベクトル形式で書いたものである．テンソル  $\mathbf{C}$  は「力の定数」に相当するもので，原子の組み合わせ  $\alpha\alpha'$ ，単位胞の相対位置  $\mathbf{R}'' = \mathbf{R}' - \mathbf{R}$  だけによるため， $\mathbf{C}_{\alpha\alpha', \mathbf{R}\mathbf{R}} = \mathbf{C}_{\alpha\alpha'}(\mathbf{R}'')$  とし，

$$M_\alpha \ddot{u}_{\alpha, \mathbf{R}}^j = - \sum_{\alpha, \mathbf{R}''} \mathbf{C}_{\alpha\alpha'}(\mathbf{R}'') \mathbf{u}_{\alpha', \mathbf{R}+\mathbf{R}''} \quad (4C.9)$$

と変形できる．この方程式は， $\mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}'$  という格子点間シフトに対して不変であるから，Bloch 関数

$$\mathbf{u}_{\alpha, \mathbf{R}}(t) = \mathbf{u}_\alpha(\mathbf{q}, t) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_\alpha) \quad (4C.10)$$

の形に解を書くことができる．時間依存性として， $\omega$  での振動を考え，

$$\mathbf{u}_{\alpha, \mathbf{r}}(t) = \frac{1}{\sqrt{M_\alpha}} \mathbf{u}_\alpha(\mathbf{q}, \omega) \exp[i(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_\alpha - \omega t)] \quad (4C.11)$$

と置く．これを (4C.9) へ代入して，

$$\omega^2 \mathbf{u}_\alpha(\mathbf{q}, \omega) = \sum_{\alpha'} \left[ \frac{1}{\sqrt{M_\alpha M_{\alpha'}}} \sum_{\mathbf{R}} \mathbf{C}_{\alpha\alpha'}^{jj'}(\mathbf{R}) \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}) \right] \mathbf{u}_{\alpha'}(\mathbf{q}, \omega) \equiv \sum_{\alpha'} \mathbf{D}_{\alpha\alpha'}(\mathbf{q}) \mathbf{u}_{\alpha'}(\mathbf{q}, \omega) \quad (4C.12)$$

となる．

(4C.12) がトリビアルでない解を持つために，

$$|D_{\alpha\alpha'}^{jj'}(\mathbf{q}) - \omega^2 \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{jj'}| = 0 \quad (4C.13)$$

である．分散関係は，これを数値的に解いて得られることになる．6 次方程式であり 6 個のモードを持つが，音響モード，光学モードがそれぞれ 3 個ずつになる．更にこれら 3 個はそれぞれ横波 (transverse) 2 個と縦波 (longitudinal) 1 個に分けることができる．名前付けとして，TA, LA, TO, LO の 4 つの命名が可能である．

## 付録 5A : 電流磁気効果

ドリフト電流に戻り, 磁束密度  $\mathbf{B}$  に対する応答を考える. 外力を, ローレンツ力  $\mathbf{F} = -e(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B})$  とし, 式 (5.4) の緩和時間近似 (5.5) を考え,  $f_1 \equiv f - f_0$  とすると,

$$-\frac{e}{\hbar}(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{k}} = -\frac{f_1}{\tau} \quad (\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}) \quad (5A.1)$$

である. 左辺第1項にかかる  $\partial f / \partial \mathbf{k}$  の  $f$  は  $f_0$  で近似しよう. 第2項は,  $dE = \mathbf{v} \cdot d\mathbf{p}$  より  $\partial f_0 / \partial \mathbf{k} = \hbar(\partial f_0 / \partial E)\mathbf{v}$  で,  $f_0$  の項は  $\mathbf{v} \times \mathbf{B}$  と直交し, 消える. (磁場による力は  $\mathbf{v}$  と直交し, 仕事をしない.) 第2項は  $f_1$  の項まで拾うと

$$-e\mathbf{v} \cdot \mathbf{E} \frac{\partial f_0}{\partial E} - \frac{e}{\hbar}(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{k}} = -\frac{f_1}{\tau} \quad (5A.2)$$

を得る. ここで, 電場の次元を持つベクトル  $\mathbf{E}_a$  を

$$f_1 = e\tau(\mathbf{v} \cdot \mathbf{E}_a) \frac{\partial f_0}{\partial E} \quad (5A.3)$$

を満たすもの, として導入する. これは, 図 3.3 に模式的に示したようにローレンツ力によってフェルミ球がシフトすると考え, シフト原因を電場の形で代表させたものである.

$$-\mathbf{v} \cdot \mathbf{E} = -\mathbf{v} \cdot \mathbf{E}_a + \frac{e\tau}{m}(\mathbf{v} \times \mathbf{B}) \cdot \mathbf{E}_a, \quad \therefore \mathbf{E} = \mathbf{E}_a - \frac{e\tau}{m^*}\mathbf{B} \times \mathbf{E}_a \quad (5A.4)$$

である. 方程式 (5A.4) の解は次で与えられる.

$$\mathbf{E}_a = \frac{1}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \left[ \mathbf{E} + \frac{e\tau}{m^*}\mathbf{B} \times \mathbf{E} + \left( \frac{e\tau}{m^*} \right)^2 (\mathbf{B} \cdot \mathbf{E})\mathbf{B} \right], \quad (5A.5)$$

$$\omega_c = \frac{e|\mathbf{B}|}{m^*} \quad (5A.6)$$

はサイクロトロン周波数である. 以上より,  $f_1$  は次のように与えられる.

$$f_1 = \frac{e\tau\mathbf{E}}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \cdot \left[ \mathbf{v} + \frac{e\tau}{m^*}\mathbf{v} \times \mathbf{B} + \left( \frac{e\tau}{m^*} \right)^2 (\mathbf{B} \cdot \mathbf{v})\mathbf{B} \right] \frac{\partial f_0}{\partial E}. \quad (5A.7)$$

$\mathbf{B} = (0, 0, B_z)$ ,  $\mathbf{E} = (\mathcal{E}_x, \mathcal{E}_y, 0)$  と与えられる場合を考える.  $v_z = 0$  より (5A.7) を使って  $f_1$  が

$$f_1 = e \frac{\partial f_0}{\partial E} \left[ v_x \left( \frac{\tau}{1 + (\omega_c \tau)^2} \mathcal{E}_x - \frac{\omega_c \tau^2}{1 + (\omega_c \tau)^2} \mathcal{E}_y \right) + v_y \left( \frac{\omega_c \tau^2}{1 + (\omega_c \tau)^2} \mathcal{E}_x + \frac{\tau}{1 + (\omega_c \tau)^2} \mathcal{E}_y \right) \right] \quad (5A.8)$$

と計算される. これから, 例えば  $j_x = -en\langle v_x \rangle$  を求めるには,  $f = f_0 + f_1$  で  $v_x$  の期待値を取る.  $f_0$  での期待値はゼロ, また  $v$  の奇関数成分は  $\mathbf{k}$  の積分により落ちるから,

$$j_x = 2 \int (-e)v_x f(\mathbf{k}) \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} = -\frac{e^2}{4\pi^3} \int \frac{\tau v_x^2}{1 + (\omega_c \tau)^2} (\mathcal{E}_x - (\omega_c \tau)\mathcal{E}_y) \frac{\partial f_0}{\partial E} d\mathbf{k}. \quad (5A.9)$$

(5A.9) の被積分関数は,  $v_x^2$  以外の部分は熱平衡時と同じで, 運動エネルギー  $E$  の関数である. 一般に関数  $\xi(E)$  に対して, 当分配則より

$$\int v_x^2 \xi(E) d\mathbf{k} = \frac{2}{3m^*} \int E \xi(E) d\mathbf{k}. \quad (5A.10)$$

半導体で高温域のマックスウェル近似  $f_0 = A \exp(-E/k_B T)$  を使い, 状態密度  $\mathcal{D}(E) = A_D E^{1/2}$  として, (5A.10) を使い,

$$\frac{\partial f_0}{\partial E} = \frac{f_0}{-k_B T}, \quad n = A_D \int_0^\infty f_0 E^{1/2} dE = \frac{2A_D}{3k_B T} \int_0^\infty E^{3/2} f_0 dE$$

である。これらを (5A.9) に適用すると、

$$j_x = \frac{ne^2}{m^*} \left[ \left\langle \frac{\tau}{1 + (\omega_c\tau)^2} \right\rangle_E \mathcal{E}_x - \left\langle \frac{\omega_c\tau^2}{1 + (\omega_c\tau)^2} \right\rangle_E \mathcal{E}_y \right], \quad (5A.11a)$$

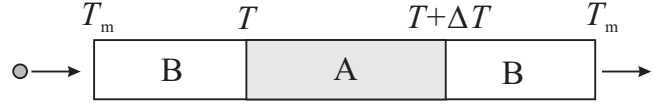
$$\equiv (ne^2/m^*)(A_l\mathcal{E}_x - A_t\mathcal{E}_y) \quad (A_l \text{ と } A_t \text{ の定義}) \quad (5A.11b)$$

が得られる。 $\langle \dots \rangle_E$  の意味は、(5.10) と同じである。  $j_y$  も同様に得られ、  $xy$  面内の伝導度テンソルが次のように求まる。

$$\mathbf{j} = \frac{ne^2}{m^*} \begin{pmatrix} A_l & -A_t \\ A_t & A_l \end{pmatrix} \mathbf{E}. \quad (5A.12)$$

## 付録 5B : ケルビンの関係式

右図のように、2種の金属 A, B の BAB 接合を考える。金属 B の両端を温度  $T_m$  に保ち、単位電荷を一方の端から他方の端へと準静的に移動する。2つの接合の温度を図のように  $T, T + \Delta T$  とする。また、両端の間の電圧を  $V_{AB}$  とする。



準静的仮定であることから熱力学第1, 第2法則より

$$V_{BA} + \Pi_{BA}(T) - \Pi_{BA}(T + \Delta T) + (\tau_B - \tau_A)\Delta T = 0$$

$$\frac{\Pi_{BA}(T)}{T} - \frac{\Pi_{BA}(T + \Delta T)}{T + \Delta T} + \frac{\tau_B - \tau_A}{T}\Delta T = 0$$

である。微分形として、

$$\frac{dV_{BA}}{dT} - \frac{d\Pi_{BA}}{dT} + \tau_B - \tau_A = 0, \quad \frac{d}{dT} \left( \frac{\Pi_{BA}}{T} \right) = \frac{\tau_B - \tau_A}{T}.$$

2番目の式より

$$\tau_B - \tau_A = T \frac{d}{dT} \left( \frac{\Pi_{BA}}{T} \right) = \frac{d\Pi_{BA}}{dT} - \frac{\Pi_{BA}}{T}$$

であるから、A, B の順番を入れ替えれば、

$$\therefore S_{AB} = \frac{\Pi_{AB}}{T}, \quad \frac{dS_{AB}}{dT} = \frac{\tau_A - \tau_B}{T} \quad (5B.1)$$

が得られる。

## 参考文献

- [1] M. Lundstrom “Fundamentals of carrier transport” 2nd ed. (Cambridge, 2000).
- [2] K. Fletcher, P.N. Butcher, J. Phys. C **5**, 212- 224 (1972).