

電子の運動と輸送現象 ← 金属の電気や熱は自由電子が運ぶ

(1) 群速度と位相速度

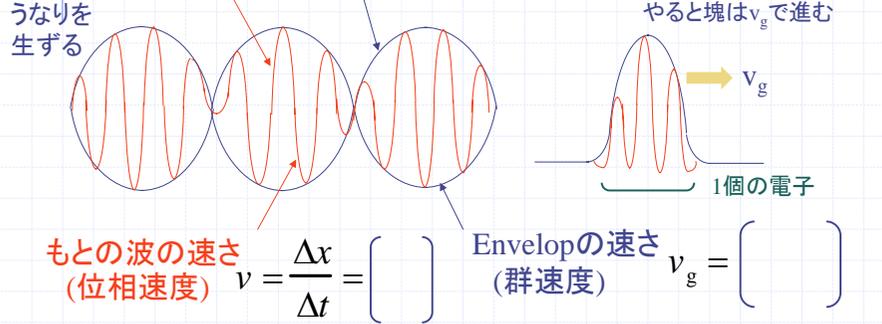
一般の波 $U = U_0 e^{i(kx - \omega t)}$

わずかに周波数の違う波 $\omega \pm \Delta\omega$, $k \pm \Delta k$ の重ね合わせ

$$U = U_0 [e^{i[(k+\Delta k)x - (\omega+\Delta\omega)t]} + e^{i[(k-\Delta k)x - (\omega-\Delta\omega)t]}]$$

$$= U_0 e^{i(kx - \omega t)} [e^{i(\Delta k \cdot x - \Delta\omega \cdot t)} + e^{-i(\Delta k \cdot x - \Delta\omega \cdot t)}]$$

$$= 2U_0 e^{i(kx - \omega t)} \cos(x\Delta k - t\Delta\omega)$$

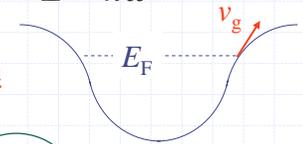


(2) エネルギーバンドが $E(k)$ のとき

$E = \hbar\omega$

$v_g = \frac{\partial\omega}{\partial k} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k}$

エネルギーバンドの接線



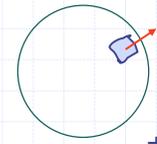
3次元では

$\vec{v}_g = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{\partial E(k)}{\partial k_x}, \frac{\partial E(k)}{\partial k_y}, \frac{\partial E(k)}{\partial k_z} \right)$

さらに i で微分して

$\frac{\partial v_g}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} \frac{\partial k}{\partial t}$

フェルミ面の垂線



力積
力 動いた距離

外部電場 ε を δt だけかけたときの仕事は $\delta E = -e\varepsilon v_g \delta t$

一方 $\delta E = \left(\frac{\partial E}{\partial k} \right) \delta k = \hbar v_g \delta k$ だから $-e\varepsilon v_g \delta t = \hbar v_g \delta k$ より $\hbar \frac{\partial k}{\partial t} = \left[\right]$

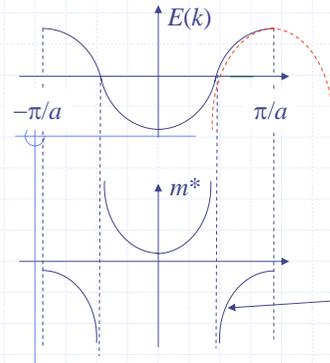
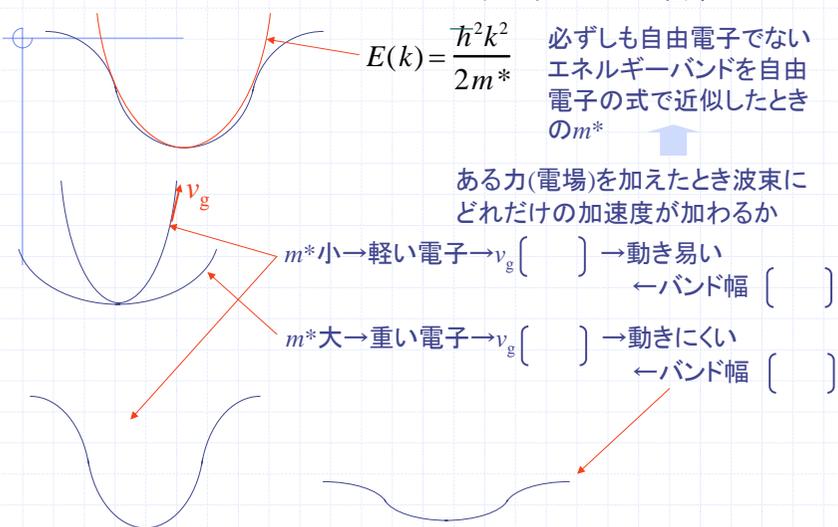
これより $\frac{\partial v_g}{\partial t} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} (-e\varepsilon)$

$ma = F$ → 加速度 $1/m^*$ 力

別解: $p = \hbar k$ を微分して $\frac{\partial p}{\partial t} = \hbar \frac{\partial k}{\partial t} = F = -e\varepsilon$

よって $\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2}$

有効質量 effective mass
= エネルギーバンドの曲率



一次元強結合近似のエネルギーバンドの有効質量

$\frac{\partial^2 E}{\partial k^2} = \left[\right]$

$m^* = -\frac{\hbar^2}{2\beta a^2 \cos ka}$

バンドの上半分では $m^* < 0$ ホールの波束は逆方向に加速される。(あたかも+電荷をもったごとく)

ほとんどつまっているバンド



$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2|m^*|} < 0$

エネルギーが上の方ほど安定(風船のようなもの)

ホール: $m^* < 0, E < 0$, 正電荷 をもった粒子を考えればよい。

(3) 電気伝導

電場 ϵ があるときの運動方程式 (古典力学!)

$$m \frac{dv}{dt} + \frac{m}{\tau} v = -e\epsilon$$

加速度 摩擦力 電場による力

1) 力を切ったとすると $\epsilon=0$ だから

$$\frac{dv}{dt} = \left[\begin{array}{c} \\ \\ \end{array} \right] \Rightarrow v = \left[\begin{array}{c} \\ \\ \end{array} \right] \quad \tau: \text{緩和時間}$$

電子は平均 τ の時間内に散乱されて $v=0$ になる。

2) $\epsilon \neq 0$ で平衡になったとすると $\frac{dv}{dt} = 0$ だから

$$v = \left[\begin{array}{c} \\ \\ \end{array} \right] \text{ よって電流密度は } j = nev = \left[\begin{array}{c} \\ \\ \end{array} \right] \text{ だから}$$

$$\text{電気伝導度は } \sigma = \frac{j}{\epsilon} = \left[\begin{array}{c} \\ \\ \end{array} \right]$$

$$\text{あるいは移動度 } \mu = \frac{e\tau}{m} \text{ を使って } \sigma = \left[\begin{array}{c} \\ \\ \end{array} \right]$$

電気抵抗率 $\rho = \frac{1}{\sigma} \propto \frac{1}{\tau}$ のなかで金属では温度依存するのは τ

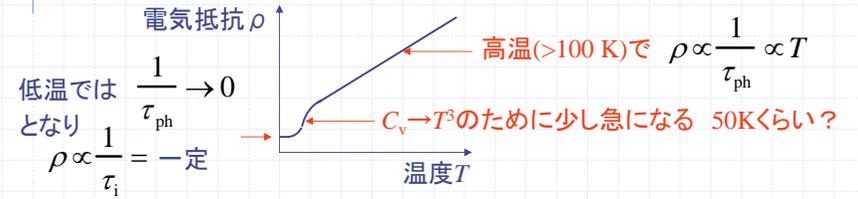
$$\text{実際には } \frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_{ph}} + \frac{1}{\tau_i}$$

フォノンによる散乱

不純物による散乱(温度によらない)

$$\frac{1}{\tau_{ph}} = C_v \cdot T \quad \text{高温(室温以上の温度)では } \frac{1}{\tau_{ph}} \propto T$$

格子比熱: 高温では一定(Dulong-Petitの法則)

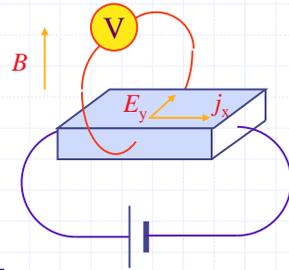


不純物による散乱による一定値(残留抵抗)

金属の抵抗は低温ほど小さくなり、極低温で一定値となる。

(4) Hall効果

x方向に電流 j_x を流し
z方向に磁場 B をかけながら
y方向の起電力 E_y を測る。



磁場+電場中で電子にかかる力は

$$\vec{F} = e(\vec{v} \times \vec{B} + \vec{E})$$

ローレンツ力 電場中の力 \rightarrow 起電力

y方向に電流は流れないから

$$F_y = ev_x B - eE_y = 0 \Rightarrow E_y = \left[\begin{array}{c} \\ \\ \end{array} \right]$$

$$\text{これに } j_x = nev_x \text{ を入れて } E_y = \left[\begin{array}{c} \\ \\ \end{array} \right] j_x B$$

R_H : Hall係数 cf. hole: 正孔

ホール係数 $R_H > 0$ ホール
 $R_H < 0$ 電子

$$R_H \rightarrow \text{キャリアー濃度 } n \xrightarrow{\text{ホール}} \left[\begin{array}{c} \\ \\ \end{array} \right] \mu = \frac{e\tau}{m} \text{ が求められる。}$$

(5) 熱伝導率 金属の熱伝導は主に自由電子による。

フォノン(格子振動)による熱伝導率との類推から、自由電子が運ぶ熱の熱伝導率は

$$\kappa = \frac{1}{3} C_v v_F l_F \quad \text{平均自由行程(フェルミレベルでの)} \quad l_F = v_F \tau$$

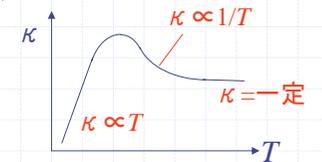
x, y, z の3方向
あるので1/3

$$\kappa = \frac{1}{3} \frac{\pi^2}{3} D(E_F) k_B^2 T \cdot v_F \cdot v_F \tau$$

$$= \frac{\pi^2 N k_B^2 T \tau}{3m} \quad D(E_F) = \frac{3N}{2E_F} = \frac{3N}{mv_F^2}$$

$$E_F = \frac{1}{2} m v_F^2$$

$$\frac{\kappa}{\sigma} = \frac{\frac{\pi^2 N k_B^2 T \tau}{3m}}{\frac{Ne^2 \tau}{m}} = \left[\begin{array}{c} \\ \\ \end{array} \right] T$$



$$\frac{\kappa}{\sigma T} = L \quad \text{Lorenz数=一定 (Wiedeman-Franzの法則)}$$

高温	$\sigma \propto 1/T \rightarrow \kappa = \left[\begin{array}{c} \\ \\ \end{array} \right]$
中間	$\sigma \propto 1/T^2 \rightarrow \kappa \propto \left[\begin{array}{c} \\ \\ \end{array} \right]$
低温	$\sigma = \text{一定} \rightarrow \kappa \propto \left[\begin{array}{c} \\ \\ \end{array} \right]$

さまざまな物質の熱伝導率

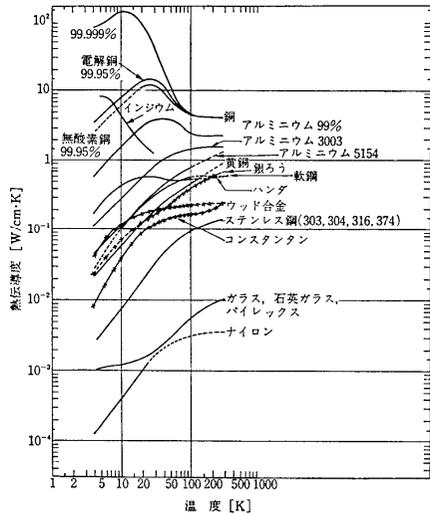


図 5.2 熱伝導率 (BOC 社, "Cryogenic Data Chart" より)

(6) サイクロトロン振動 磁場中の自由電子は円運動をする。

自由電子の運動方程式

$$\frac{dp}{dt} = m \frac{dv}{dt} = e\vec{v} \times \vec{B} \quad \text{ローレンツ力}$$

磁場中 B/z のとき

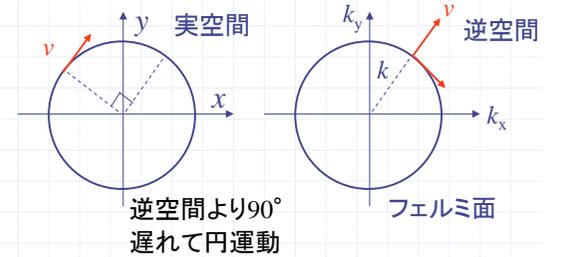
$$\frac{dv_x}{dt} = -\frac{eB}{m} v_y = -\omega_c v_y \quad \frac{dv_y}{dt} = \omega_c v_x \quad \omega_c = \frac{eB}{m}$$

電子はxy面内で円運動をする。

$$\begin{cases} v_x = v_0 \cos \omega_c t \\ v_y = v_0 \sin \omega_c t \end{cases}$$

これより

$$\begin{cases} x = -\frac{v_0}{\omega_c} \sin \omega_c t \\ y = \frac{v_0}{\omega_c} \cos \omega_c t \end{cases}$$



ちなみに

$$|r| = \frac{v_0}{\omega_c} = \frac{m}{eB} v_0 = \frac{|p|}{eB}$$

また

$$\frac{dE(k)}{dt} = \frac{dE}{dp} \frac{d\vec{p}}{dt} = \vec{v} \cdot (e\vec{v} \times \vec{B}) = 0$$

\vec{v} と \vec{B} の外積は $\perp \vec{v}$ 。しかるに \perp なもの内積は0。

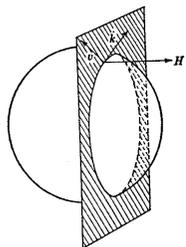
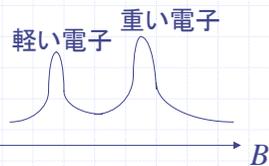
したがって電子はエネルギー一定の面(フェルミ面)上を動く(左下図)。

$\omega_c = \frac{eB}{m}$ を満たすマイクロ波を吸収する。
サイクロトロン共鳴

$\hbar\omega_c = \text{一定}$

m^* を求める実験法

マイクロ波の吸収



(7) 量子振動

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

前項のような円運動は水素の1s軌道と同じように量子化される。

(円周)=(波長)×(整数) ボーアの量子化条件

$$2\pi r = n\lambda = n \frac{h}{p} \quad \rightarrow \quad r \cdot p = n\hbar$$

円運動では $|r| = \frac{|p|}{eB}$ だったから $\frac{p}{eB} \cdot p = n\hbar$

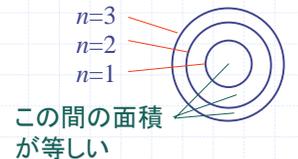
運動エネルギー

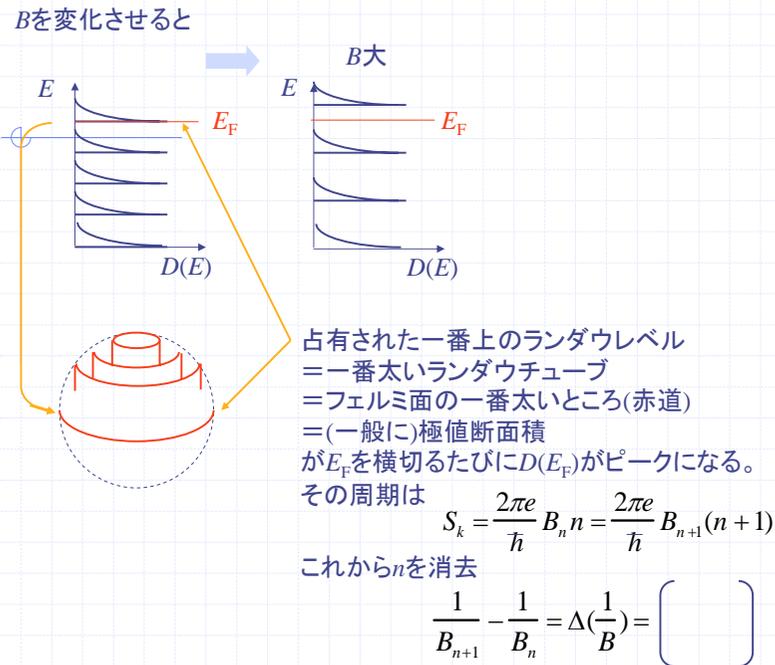
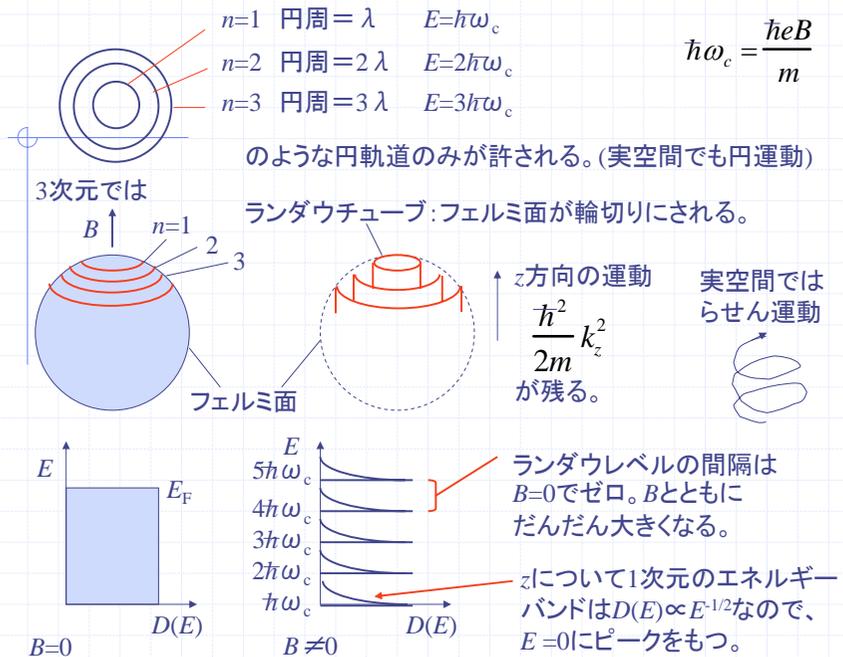
$$\begin{aligned} E &= \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} 2 \frac{eB}{\hbar} n + \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2 \\ &= \left[\quad \right] n + \frac{\hbar^2}{2m} k_z^2 \end{aligned}$$

$$k^2 = \frac{eB}{\hbar} n \quad S_k = \pi(k_x^2 + k_y^2) \quad \text{円の面積を使って}$$

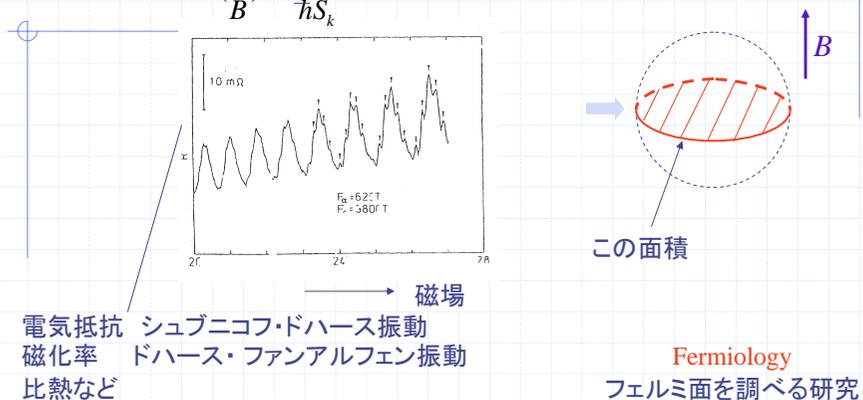
$$S_k = \frac{2\pi eB}{\hbar} n \quad S_k \text{は } \frac{2\pi eB}{\hbar} \text{ の}$$

整数倍に量子化される。

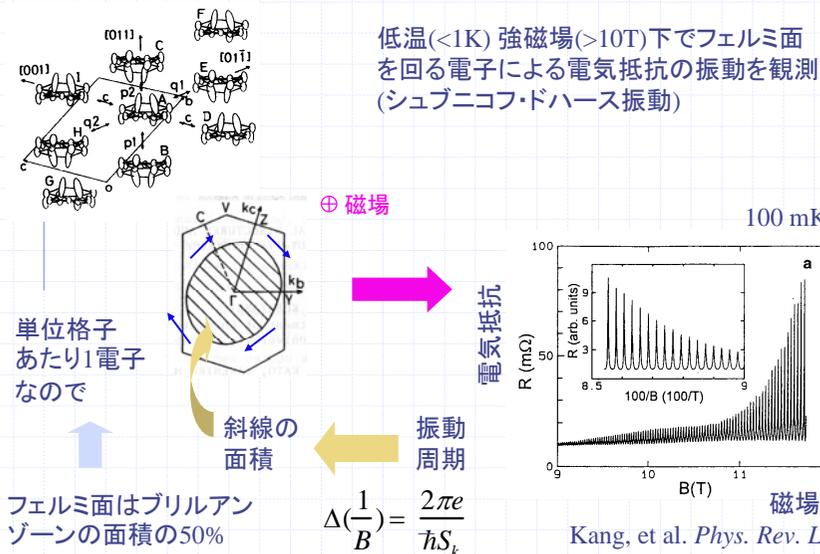




低温強磁場で磁場をスキャンすると金属のあらゆる
 性質に周期 $\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{2\pi e}{\hbar S_k}$ の振動現象が見られる。



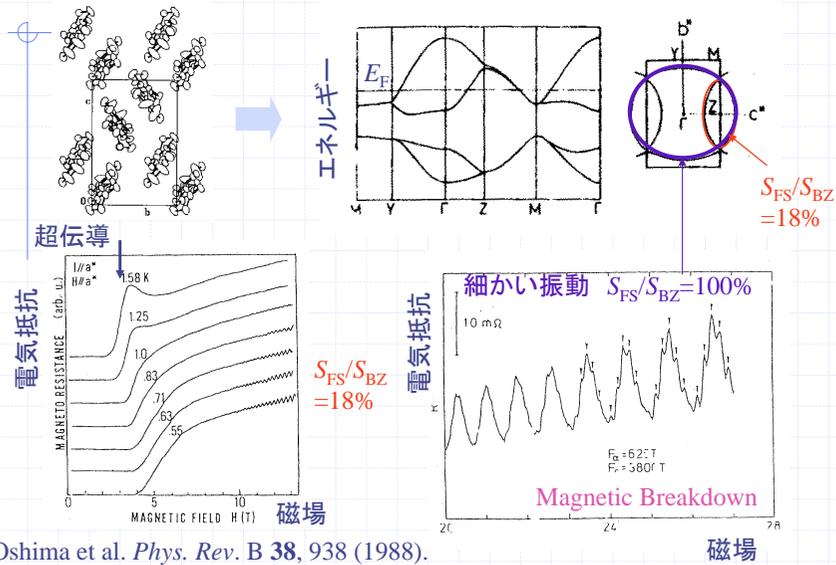
β -(BEDT-TTF)₂I₃のシュブニコフ・ドハース振動



D. Shoenberg, *Magnetic Oscillations in Metals*, Cambridge (1984).
 J. Wosnitza, *Fermi Surfaces of Low-Dimensional Organic Metals and Superconductors*, Springer (1996).
 M. V. Kartsovnik, *Chem. Rev.* **104**, 5737 (2004).

κ -(BEDT-TTF)₂Cu(NCS)₂のシュブニコフ・ドハース振動

単位格子に4分子 → 単位格子に2電子 → $S_{FS}/S_{BZ}=100\%$

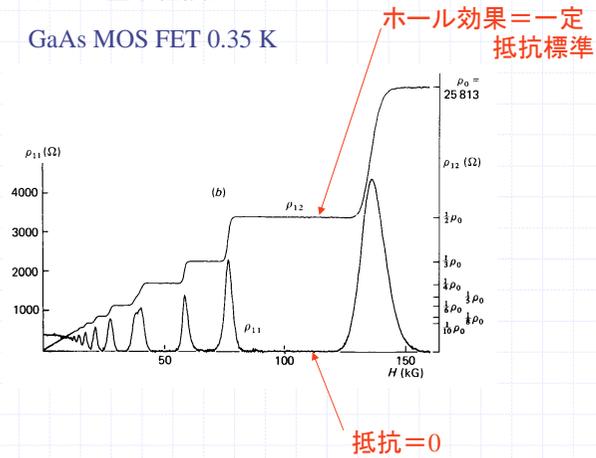


Oshima et al. *Phys. Rev. B* **38**, 938 (1988).

量子ホール効果

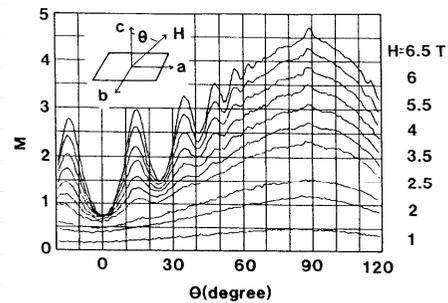
シュブニコフ・ドハースの振幅が大きくなって $R \rightarrow 0$ に達したもの。
 B が大きくなってランダウレベル数個になったとき。
($n \rightarrow 1$ 量子極限)

GaAs MOS FET 0.35 K



角度依存磁気抵抗振動(AMRO)

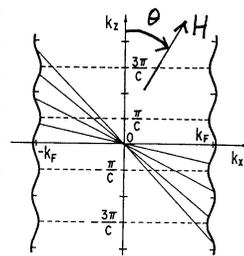
θ -(BEDT-TTF)₂I₃



梶田振動(山地振動)

Kajita, *Solid State Commun.* **70**, 1189 (1989).
Kartsovnik, *JETP Lett.* **48**, 541 (1988).
Yamaji, *J. Phys. Soc. Jpn.* **58**, 1520 (1989).

磁場を傾けながら
電気抵抗を測定



$$\tan \theta = \frac{n \frac{\pi}{c}}{k_F}$$

$$ck_F \tan \theta = n\pi$$

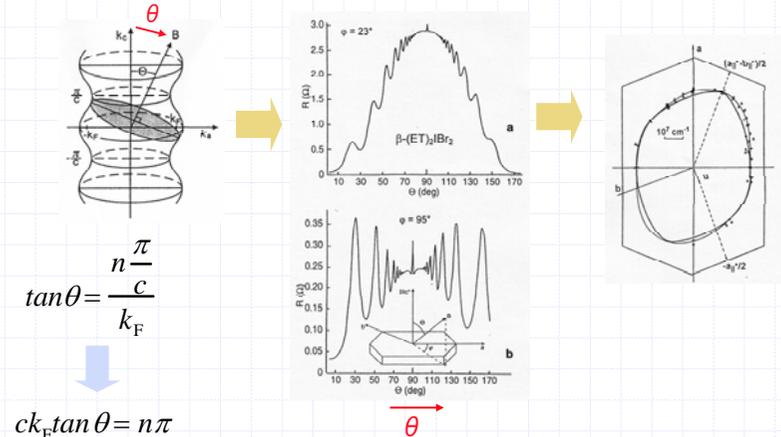
角度依存磁気抵抗振動(AMRO)

磁場を傾けながら
電気抵抗を測定

β -(BEDT-TTF)₂I₃

振動の間隔

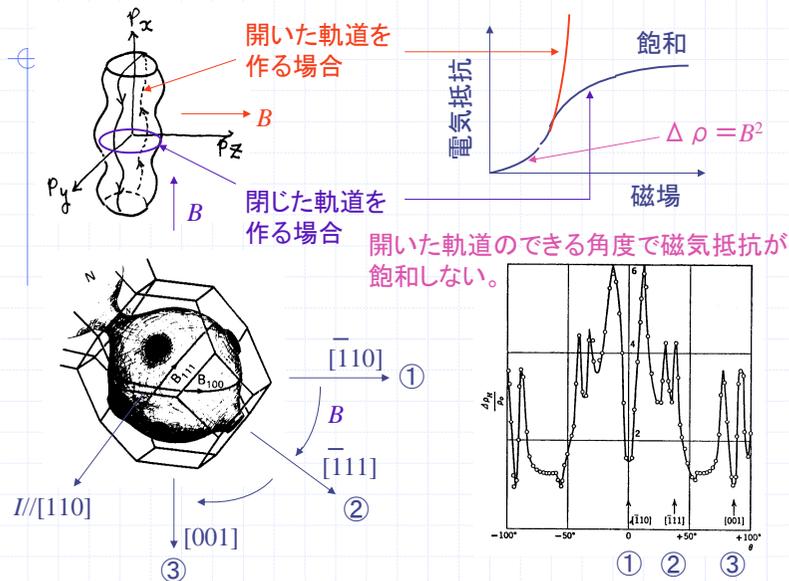
k_F の位置



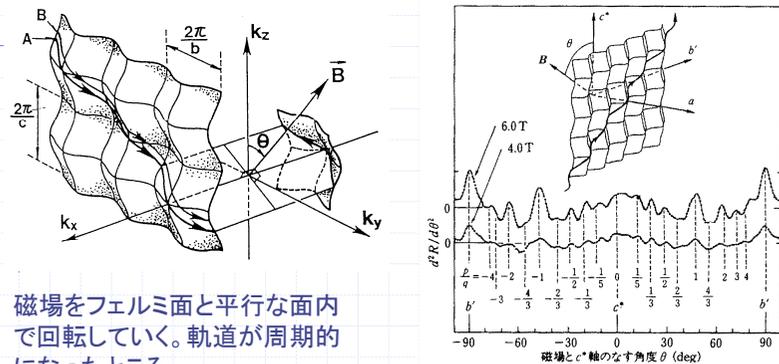
$$\tan \theta = \frac{n \frac{\pi}{c}}{k_F}$$

$$ck_F \tan \theta = n\pi$$

従来の角度依存磁気抵抗: 銅のフェルミ面



開いた(一次元的)フェルミ面におけるLebed振動



金属自由電子の磁化率 (パウリ常磁性)

磁場をかけると ↓ よりも ↑ の方が安定になる。

$$E_{\uparrow} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu H$$

$$E_{\downarrow} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \mu H$$

磁化 $M = \mu(N_{\uparrow} - N_{\downarrow})$

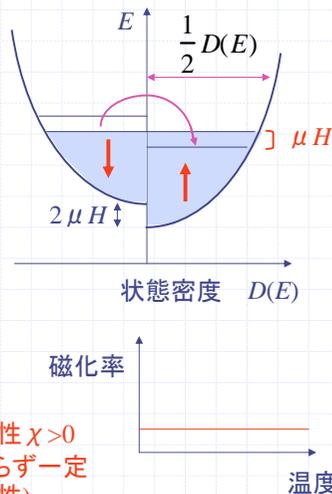
$$= \mu \frac{1}{2} D(E) \times 2\mu H$$

磁化率 $\chi = \frac{M}{H} = \mu^2 D(E_F)$

金属の常磁性 $\chi > 0$ は温度によらず一定 (パウリ常磁性)

電子比熱係数 $\gamma = \frac{\pi^2}{3} D(E_F) k_B^2$ だから $\frac{\chi}{\gamma} = \left[\frac{\mu^2 D(E_F)}{\frac{\pi^2}{3} D(E_F) k_B^2} \right] = \text{一定}$ Wilson比

有効質量が変わっても χ と γ の比は一定。



金属の光学的性質(プラズモン)

金属に光をあてたとき、交流電場はどう入るか。

$$D(\omega) = \epsilon_0 E(\omega) + P \quad D(\omega) = \epsilon \epsilon_0 E(\omega)$$

両式から $\epsilon(\omega) = \frac{D(\omega)}{\epsilon_0 E(\omega)} = 1 + \frac{P(\omega)}{\epsilon_0 E(\omega)}$

E によってゆすられる電子の運動方程式 $m \frac{d^2 x}{dt^2} = -eE$

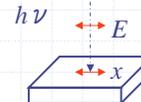
$E, x \propto e^{i\omega t}$ とすると $-m\omega^2 x = -eE \rightarrow x = \left[\frac{eE}{m\omega^2} \right]$

$P = -nex = \left[\frac{-ne^2 E}{m\omega^2} \right]$ プラズマ振動数

これを上の式に入れて $\epsilon(\omega) = \left[1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \right] = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$

Maxwell方程式 $\mu_0 \frac{\partial^2 D}{\partial t^2} = \nabla^2 E$ に $E \propto e^{i(Kr - \omega t)}$ を入ると

$$\mu_0 \epsilon_0 \epsilon \omega^2 = K^2 \rightarrow \omega^2 - \omega_p^2 = c^2 K^2$$



$$\omega^2 - \omega_p^2 = c^2 K^2$$

$\omega < \omega_p \rightarrow K$ 虚数

金属中で $E \propto e^{-Kr}$ と減衰

光はなかに入らないで全反射: 金属光沢

ω_p 通常の金属: 近紫外 有機半導体: 近赤外

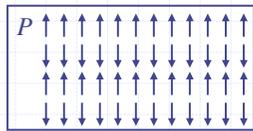
$\omega > \omega_p \rightarrow K$ 実数

$E \propto e^{-iKr}$ 金属も紫外線には透明

$$\omega = \omega_p \rightarrow D=0 \rightarrow E = -\frac{1}{\epsilon_0} P = \frac{nex}{\epsilon_0}$$

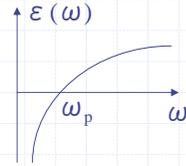
$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -\frac{ne^2}{\epsilon_0} x \rightarrow \frac{d^2 x}{dt^2} + \omega_p^2 x = 0$$

電子は ω_p の固有振動をする: プラズマ振動

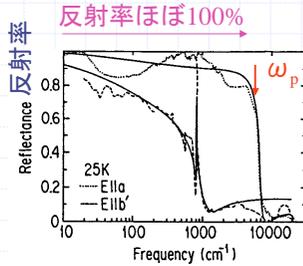


縦波の疎密波

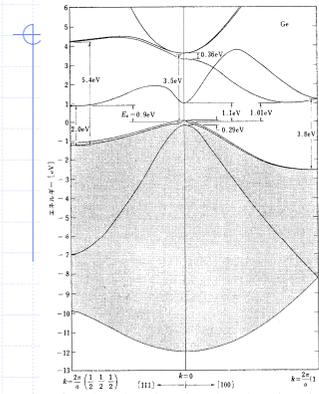
$$\epsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$



(TMTSF)₂PF₆



半導体とデバイス



エネルギーギャップ (バンドギャップ)

C	5.47 eV
Si	1.12 eV
Ge	0.66 eV

半導体

Geのエネルギーバンド

$E_C - E_F \gg k_B T$ なので
フェルミ-ディラック分布

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E_i - \mu}{k_B T}} + 1} \rightarrow e^{-\frac{E_i - \mu}{k_B T}}$$

ボルツマン分布を考えればよい。

$$\text{電子数 } N_e = \int D(E) f(E) dE = N_e^0 e^{-\frac{E_C - E_F}{k_B T}}$$

$$\text{ホール数 } N_p = N_p^0 e^{\frac{E_V - E_F}{k_B T}}$$

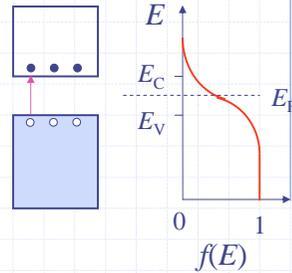
$$\text{だから } N_e \cdot N_p = N_e^0 N_p^0 e^{\frac{E_V - E_F}{k_B T} - \frac{E_C - E_F}{k_B T}} = N_e^0 N_p^0 e^{-\frac{E_g}{k_B T}} \quad E_g = E_C - E_V$$

一定 T, E_g ではホール数が減少すると E_F が上昇して電子数が増加する。

真性半導体: $N_e = N_p$ より、もし $N_e^0 = N_p^0$ (電子とホールの有効質量が等しい) なら

$$E_F - E_V = E_C - E_F \rightarrow E_F = \left[\dots \right]$$

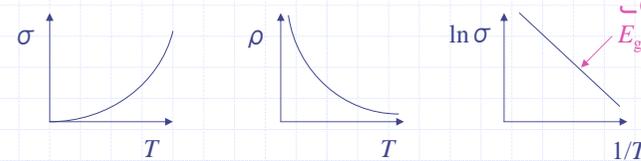
フェルミレベルはエネルギーギャップの真中にある。



$$N_e = N_p = \sqrt{N_e^0 N_p^0} e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$$

$$\text{電気伝導度 } \sigma \text{ は } \sigma = N_e e \mu_e + N_p e \mu_p \propto e^{-\frac{E_g}{2k_B T}}$$

半導体の電気伝導はキャリアー濃度で決まり、低温で小さくなる。



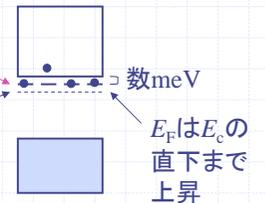
ドーピング

Si中にP, Asなどを入れる。
5電子: ドナー

余分の1電子はドナーレベルから容易に熱励起されて結構動き回る。
→ σ 数桁大きくなる。

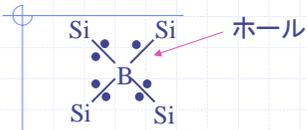
多数キャリアー $N_e \gg N_p$ 少数キャリアー

ドナーレベル



N型半導体
Negative

Si中にB, Alなどを入れる。
3電子:アクセプター

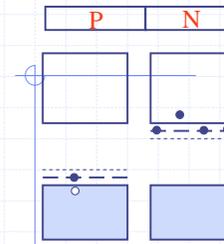


多数キャリア $N_p \gg N_e$ 少数キャリア

アクセプター
レベル

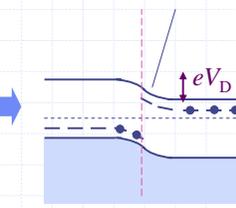
P型半導体
Positive

PN接合



接合では必ず $E_F = \text{一定}$
になるようにポテンシ
ヤルが曲がる。

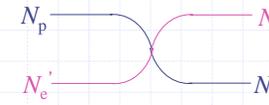
接合付近で多数キャ
リアーが居なくなる。
→正味+



→欠乏層
(Depletion Layer)

接合面が多数キャ
リアーと反対符号
に分極する。

キャリアが居ない
ので、PN接合の抵抗
の大部分は接合面によ
る。



順方向バイアス



+が引かれるので電気が流れる。

電子注入

ホール注入

ポテンシャルが
 $V_D - V$ に低くなる。

逆方向バイアス



電流は流れない。



N領域での多数キャリア

$$N_e = N_e^0 e^{-\frac{E_c - E_F}{k_B T}}$$

P領域での少数キャリア

$$N_e' = N_e^0 e^{-\frac{E_c - E_F + eV_D}{k_B T}} \rightarrow N_e' = N_e e^{-\frac{eV_D}{k_B T}}$$

バイアスVをかけるとこれは

$$N_e' = N_e e^{-\frac{e(V_D - V)}{k_B T}} \text{ となる。}$$

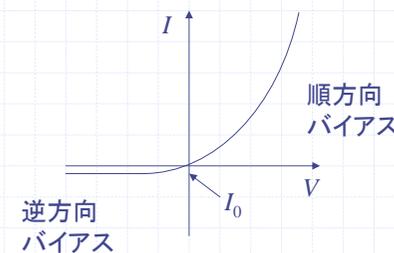
N→Pへの多数キャリアの移動 (電子の拡散電流) $\propto N_e$

P→Nへの少数キャリアの移動 (電子の発生電流) $\propto N_e'$

$$\text{全電流 } I \propto N_e' - N_e = I_0 (e^{eV/k_B T} - 1)$$

(ホールについても同様の式が成立)

($I_0 = N_e e^{-eV_D/k_B T}$ はVによらない。)



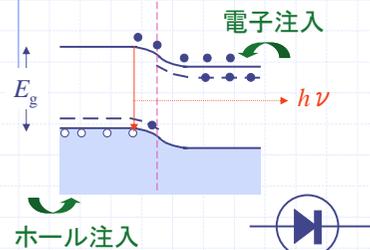
順方向のみ電流が流れる。
(ダイオード)



特殊なダイオード

発光ダイオード

順方向バイアスで注入されたキャリアが再結合するとき光放出

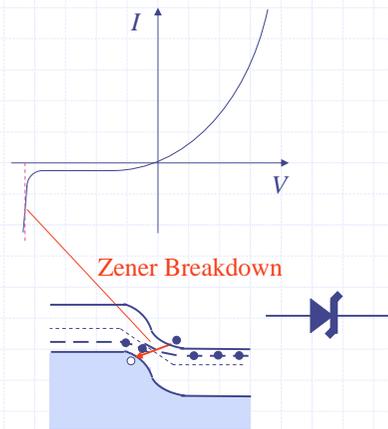


LED: Light Emitting Diode
EL: Electroluminescence

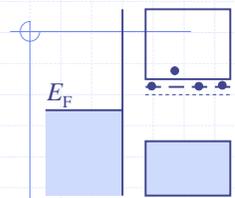
$h\nu$ の大きさは E_g で決まる。

ツェナーダイオード

逆方向バイアスをかけて基準電圧を発生。



金属半導体接合



金属の $E_F < N$ 型半導体の E_F の場合

E_F をそろえる。

空乏層ができる。

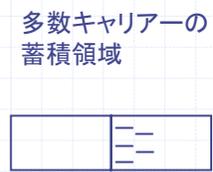
ダイオードになる。
Schottky Diode



順方向
逆方向

Schottky Barrier

金属の $E_F > N$ 型半導体の E_F の場合: Ohmic contact

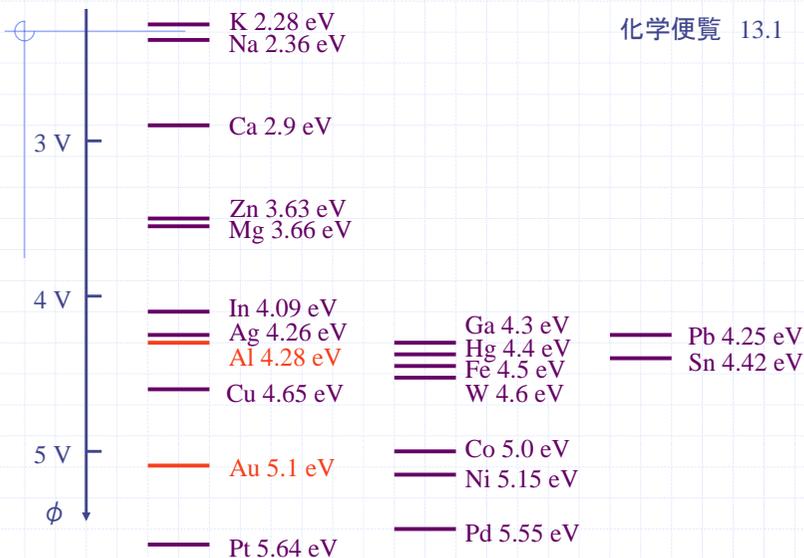


多数キャリアの蓄積領域

どちらのバイアスでも自由に動ける。

金属の仕事関数(work function)

E_F の位置、半導体のイオン化ポテンシャルに相当



トランジスタ

電界効果トランジスタ

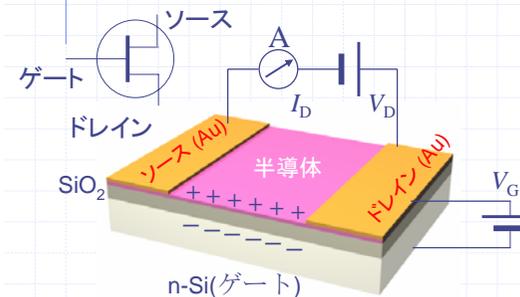
FET: Field Effect Transistor

接合型FET

MOS-FET (Metal Oxide)

N-チャンネルとP-チャンネルの2種類がある。

低電流、デジタル向け。

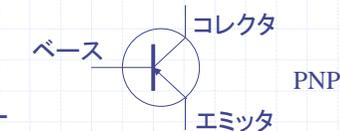


バイポーラ(接合型)トランジスタ



エミッタ ベース コレクタ

PN接合を、薄いベースを介して2つつなげたもの。
NPNとPNPの2種類がある。
大電流、アナログ向け。



トランジスタ

電界効果トランジスタ

FET: Field Effect Transistor

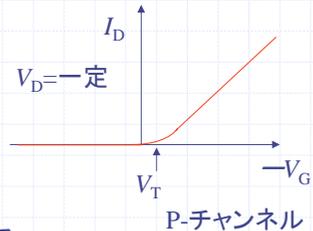
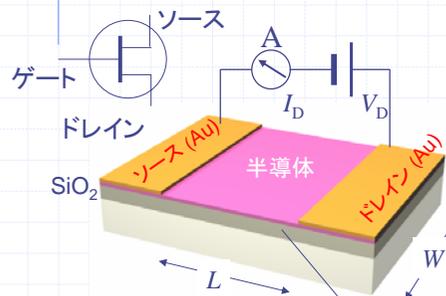
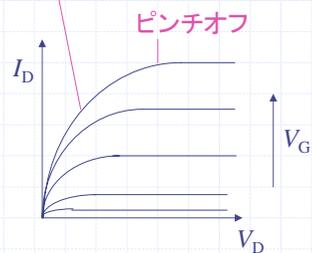
接合型FET

MOS-FET (Metal Oxide)

N-チャンネルとP-チャンネル
の2種類がある。

低電流、デジタル向け。

$$I_D = \frac{W\mu C}{L} \left((V_G - V_T)V_D - \frac{1}{2}V_D^2 \right)$$



C: キャパシタンス