

§1. 序論

Simon 等は Graphite acceptor Compounds の一つである C_nHNO_3 ($n=2,3,4$) の DHVA 効果の周期を説明するために、低温では インターカラント が 超格子をつくり それをつくるポテンシャルによって新しいフェルミ面が出現するものと考えた。¹⁾ 以下では解析に便利な $C_{16}HNO_3$ を考えることにしよう。インターカラントが整列しているときには、フェルミ面(正孔)は、独立なエッジ U, U' のまわりに画いた大小二つの円筒より出来ている。これらのバンドの分散関係は, Blinowski-Rigaux モデルにより与えられる。²⁾ 図1に示すように U, U' のまわりのフェルミ面は重ならなから、DHVA 効果の周期は 2 個観測されるのみであり、Simon 等の観測した多数の周期は説明出来なから。¹⁾

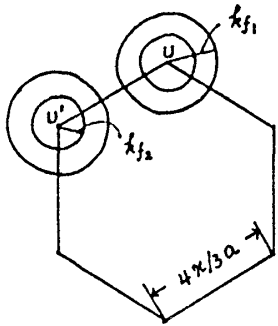


図1. 第2 ステージ $C_{16}HNO_3$ のブリルアン領域とフェルミ面。
 $a = 2.46 \text{ \AA}$, $k_{f1} = 0.265 \text{ \AA}^{-1}$,
 $k_{f2} = 0.130 \text{ \AA}^{-1}$.

Fuzellier³⁾ によると、低温において インターカラント HNO_3 が、グラファイト母体の格子と commensurate な ordering をしめ、単位格子は、グラファイトのそれの 16 倍 ($4a \times 4a$) に拡大され、従って、ブリルアン領域は $1/16$ の面積に減少する。新しい、ブリルアン領域において、 k_{f1} , k_{f2} の円を画くと、 k_{f1} の円は隣り同位差を合わせ、新しいフェルミ面が形成される。^{1,3)}

ゆえゆえは、これに従って、DHVA の周期の強度を評価し、実験と矛盾しないことを示した。⁴⁾ Simon 等は、図2に与えられている、 α, β, γ 軌道 および ω とこれらのハートニックス $2\alpha, \beta-\alpha, \beta-2\alpha, \dots$ を観測される周期と関連つけた。

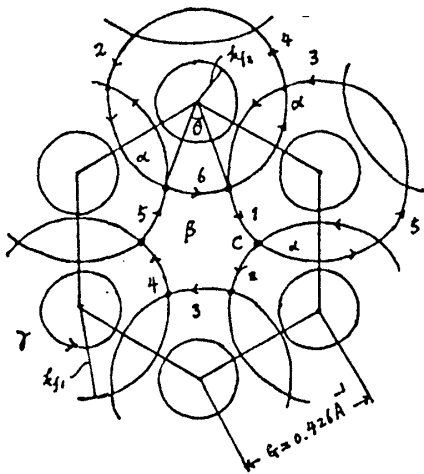


図2. インターカラントの整列による $C_{16}HNO_3$ のフェルミ面。 α, γ は正孔, β は電子軌道である。

ゆえゆえ、図2のようなフェルミ面が形成されているとすれば、磁場を C 軸方向に加えるとき、電流磁気効果も図1の場合に反対のものとして著しく変った振舞を呈するはずである。以下において、Falicov-Siervert の理論⁵⁾ に従って、伝導度テンソル σ_{xx}, σ_{yy} の表式を求めよう。

α 軌道の正孔は、 σ_{xx}, σ_{yy} に等しく加えておけばよいので考慮しない。田沼等は $C_{24}SbCl_5$ について、同様な DHVA 効果を観測しているから、⁶⁾ ゆえゆえの理論を拡張することにより論ずることが出来る。

$C_{24}SbCl_5$ では、 $C_{16}HNO_3$ では異なる γ を持つ、lower band (γ) も存在するから

変化、共振吸収の現象が基となる。

§2. Magnetic Breakdown とともなうときの電流磁気効果

図2で示されている変Cにおいては、キャリアは確率 Q で、ブランク交差 (BRと略記) の $1 \rightarrow 2$ の経路をとる一方、確率 P で Magnetic Breakdown (MBと略記) をして自由正孔の軌道をとる可能性もあるから、このような事情を考慮した電流磁気効果の理論が必要となるが、これは Falicov-Sierad によって与えられている。⁵⁾

図2から容易に分かるように、軌道の相互な segments は、レンス軌道 α が関係した6個と、 β -軌道の1~6を合わせて、12個存在する。従って、segmentsの遷移を記述するマトリックスは 12×12 の行列となり複雑であるので、以下の簡単化をする。

レンス軌道 α を無視し、BRの確率 A 、MBの確率 B に α -軌道の存在を無視しておき、 α -軌道の伝導率への寄与は別に考慮する。このようにすると、計算は簡単化される。

すなわち、

$$\begin{cases} A = \text{---} = \text{---} + \text{---} + \text{---} + \dots = Q + QP + QP^2 + QP^3 + \dots = Q + \frac{QP}{1-Q} = Q + \frac{QP}{1+Q} \\ B = \text{---} = \text{---} + \text{---} + \text{---} + \dots = P + P^2 + P^2Q + P^2Q^2 + \dots = \frac{P}{1-Q} = \frac{P}{1+Q} \end{cases} \quad (2.1)$$

さらに、 $P+Q=1$ の関係を用いて、(2.1)より直ちに $A+B=1$ が得られる。よく知られているように、MBの確率 P は、次式で与えられる。

$$P = \exp(-H_0/H), \quad H_0/H \cong \Delta E^2 / \hbar \omega E_F \quad (2.2)$$

ΔE は、BR、MBに起因するキャリアエネルギー、 ω はマイクロトン角周波数、 E_F はフェルミエネルギー。軌道セグメント間の遷移を与える Transition Matrix M は以下のようである。

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 0 & 0 & B & 0 & 0 & A \\ A & 0 & 0 & B & 0 & 0 \\ 0 & A & 0 & 0 & B & 0 \\ 0 & 0 & A & 0 & 0 & B \\ B & 0 & 0 & A & 0 & 0 \\ 0 & B & 0 & 0 & A & 0 \end{pmatrix} \quad (1 \sim 6 \text{ は 図2の軌道の segments である}) \quad (2.3)$$

Chambers の path integral の方法を MB が存在する場合に拡張して、伝導度テンソル σ_{ij} は t_0 のようにあらわされる。⁵⁾

$$\sigma_{ij} = -\frac{2e^2 s}{(2\pi)^3 \hbar} \sum_{\epsilon=1}^n \int dE \frac{df_0}{dE} \int dx_2 \int_{t_0}^{t_0} v_i(t';l) I_j(t';l) dt', \quad I_j(t';l) = e^{-t'/\tau} \left\{ \int_0^{t'} dt'' v_j(t'';l) e^{t''/\tau} + K_j(l) \right\} \quad (2.4)$$

($s = eH/\hbar c$, $n=6$, t_0 : 11個の segment を通過するのに要する時間),

$$K_j = \begin{pmatrix} k_j^{(1)} \\ \vdots \\ k_j^{(n)} \end{pmatrix}, \quad V_j = \begin{pmatrix} V_j^{(1)} \\ \vdots \\ V_j^{(n)} \end{pmatrix}, \quad V_j(r) = \int_0^{t_0} v_j(t^{\prime}, r) e^{i\omega t^{\prime}} dt^{\prime}. \quad (2.5)$$

とおく。

$$K_j = \sum_{p=1}^n M^p \cdot V_j e^{-p\omega t/\tau} = M e^{-\omega t/\tau} [1 - M e^{-\omega t/\tau}]^{-1} \cdot V_j. \quad (2.6)$$

$v_{x,y}(t, \ell)$ は ℓ -番目 ($\ell=1, 2, \dots, 6$) の segment の起点と終点 P_j での ℓ 成分速度成分である。7成分速度を v_F とする。

$$v_x(t, \ell) = -v_F \sin(\omega t + \phi_\ell), \quad v_y(t, \ell) = v_F \cos(\omega t + \phi_\ell), \quad (2.7)$$

と与えられる。

$$[1 - M e^{-\omega t/\tau}]^{-1} \equiv Y = \begin{pmatrix} \vdots \\ \dots \\ Y_{ij} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \text{とおく。} \quad Y_{ij} = Y_{i+p, j+p} \pmod{6} \quad \text{なる関係があり、独立な}$$

Y_{ij} の値はつきのようになる。

$$\begin{cases} Y_{11} = (1 + 3a^2b + b^3)\Delta^{-1}, & Y_{21} = (-a + 2ab^3 - 2a^3b)\Delta^{-1}, & Y_{31} = (a^2 - 2a^2b^3 + a^4b + b^2 + b^5)\Delta^{-1}, \\ Y_{41} = -(a^3 + 3ab^2)\Delta^{-1}, & Y_{51} = (a^4 - b - b^6)\Delta^{-1}, & Y_{61} = (-a^5 + 2a^3b^2 + 2ab - ab^4)\Delta^{-1}, \\ \Delta = -a^6 + 3a^4b^2 + 6a^2b - a^2b^4 + 2b^3 + b^6 + 1, & a = -A e^{-\omega t/\tau}, & b = -B e^{-\omega t/\tau}. \end{cases} \quad (2.8)$$

また $K_j(\ell)$ は

$$K_j(\ell) = e^{-\omega t/\tau} \sum_{p=1}^6 (A Y_{\ell-1, p} + B Y_{\ell+2, p}) V_j(p). \quad (2.9)$$

以上の結果を利用して、 σ_{xx}, σ_{xy} を磁場の関数として計算できる。(2.9)の表式において、

$v_x(t, \ell) I_j(t, \ell)$ は速度相関を与えたものであるが、 $I_j(t, \ell)$ の $\{\dots\}$ の第1項からは、同じ segment 内の相関があらわれ、他方 $K_j(\ell)$ は異なる segment 間の相関を与えて、これが MB に関係する項である。 $M e^{-\omega t/\tau} = \delta_{\ell, \ell+1}$ とすれば、MB を考えない通常の Chambers の式に帰着する。

$\omega\tau \gg 1$ の場合の意味があるので、それに対して、 σ_{xx}, σ_{xy} の表式を求める。最初に注意しておきたいのは、 $\omega\tau$ は $L > \lambda_D$ 軌道 α での寄与が含まれていない。

さて、 $\omega > \omega_c$ の式より、 $\int dk_x = (e/c) v_F H t_0$ ($\int dk_x$ は軌道 k の ω 成分)

$$t_0 = \hbar\theta / s v_F, \quad (s = eH/kc) \quad (\theta \text{ は } \omega/\omega_c \text{ と一致しない}) \quad (2.10)$$

より、 $t_0/\tau = \theta/\omega\tau \ll 1$ である。 $e^{-\omega t/\tau} \doteq 1$ としてよい。

$$\begin{cases} \sigma_{xx} \doteq \sigma_{xx}^{(0)} \left(\frac{3}{\pi}\right) (1 - \cos\theta) \left\{ 1 + \frac{3(A-B)(4B-1)}{|\omega\tau| B^2 A} \theta \right\}, & \sigma_{xx}^{(0)} = \frac{Ne^2\tau}{m(1+\omega^2\tau^2)}, \\ \sigma_{xy} \doteq |\sigma_{xy}^{(0)}| \frac{3}{\pi} \left\{ (\sin\theta - \theta) + \frac{3\sqrt{3}(B-A)}{|\omega\tau| B^2 A} \theta (1 - \cos\theta) \right\}, & \sigma_{xy}^{(0)} = \sigma_{xx}^{(0)} |\omega\tau|. \end{cases} \quad (2.11)$$

σ_{xx} の $\{\dots\}$ の中の第2項に注目しよう。 $H_0 > H_c$ である。(2.1), (2.2) より $A > B$, $4B > 1$ なる領域があり、正の値となるが、十分磁場が強くなると $A \approx 2H_0/H = 2\omega_0/\omega$ ($\omega_0 = eH_0/mc$), $B \approx 1$ となり $\{\dots\} \approx 1 - \gamma_0/\omega_0\tau \approx 1$ となる。一方、 σ_{yy} の $\{\dots\}$ も γ 比。

第1項は負であり、第2項は $H_0 > H_c$ 負、 $H_0 < H_c$ 正となる。磁場増加と共に、電子軌道 β の寄与が減って、自由正孔の軌道への遷移を許していると考えられる。

一般的な考察から分るように、⁵⁾ MBの効果は総和時間 τ の代りに有効総和時間 τ_{eff} を導入すると同じである。 τ_{eff} は

$$1/\tau_{eff} = 1/\tau + C\omega_0, \quad (C \sim 1). \quad (2.12)$$

従って、磁気抵抗 $\rho = \sigma_{xx}/(\sigma_{xx}^2 + \sigma_{yy}^2)$ は $\omega\tau > 1$ なる磁場で飽和阻率遷移の τ は $\omega\tau < 1$ より大きい磁場 $\omega\tau_{eff} > 1$ で遷移される。田沼等の研究は $C_{24}SbCl_5$ ⁶⁾ では upper band の breakdown field $H_0^{(1)}$ は小さく、lower band のものはより大きいと考えられている。もし両者の差がかなり大きければ、図3のように、

$\sigma_{xx}^{(tot)} = \sigma_{xx}^{(1)} + \sigma_{xx}^{(2)}$ が2段階の減少を許す可能性が示されるかも知れない。⁷⁾

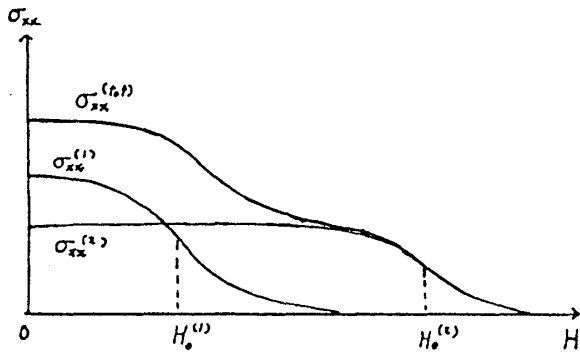


図.3 2種類のバンド 1, 2 が異なる breakdown field $H_0^{(1)}, H_0^{(2)}$ をもつときの σ_{xx} の H の振舞。

ここで全く考えがつかぬ α -軌道の寄与を加えておけばはるかによい。これを単に相加的に加えておけば良いのは、粗つぼの近似であったことは留意しておく必要がある。

文献

- 1) Ch. Simon, F. Batallan, I. Rosenman and H. Fuzellier: *Phys. Rev.* **23** (1981) 2386.
- 2) J. Blinowski and C. Rigaux: *J. Physique*: **41** (1980) 667; J. Blinowski, N. H. Hau, C. Rigaux and J. P. Vieren: *J. Physique* **41** (1980) 47.
- 3) I. Rosenman, F. Batallan, Ch. Simon and H. Fuzellier: *Proc. 15th Int. Conf. Phys. Semic. Kyoto*, 1980, *J. Phys. Soc. Japan* **49** (1980) Suppl. A 923.
- 4) 杉原 硬: 「インターバンド遷移の機構と特性」, 第1回研究会報告書 (1981) p. 44.
- 5) L. M. Falicov and P. R. Sievert: *Phys. Rev.* **135** (1965) A88.
- 6) 田沼静一, 高橋正文, 家系34: 「インターバンド遷移の機構と特性」, 第1回研究会報告書 p. 40
- 7) 田沼教授の suggestion.