Письма в ЖЭТФ, том 46, вып. 7, стр. 267–270 *10 октября 1987 г.*

АНОМАЛИИ ТЕРМОЭДС ПОЛУМЕТАЛЛОВ ПРИ МЕЖДОЛИННОМ РАССЕЯНИИ НОСИТЕЛЕЙ НА ПОВЕРХНОСТИ

В.А.Козлов, К.А.Сахаров

Показано, что в области гелиевых температур существенную роль в формировании термоэдс чистых массивных полуметаллов играют процессы междолинного рассеяния носителей на поверхности кристалла (ПМР). Предлагается экспериментальная ситуация по проверке эффекта.

Принято считать, что термоэлектрические свойства полуметаллов в области гелиевых температур определяются эффектом увлечения носителей тока фононами. Последнее утверждение базируется на двух экспериментальных фактах. Во-первых, наблюдаемые значения термоэлектродвижущей силы α существенно превосходят диффузионную термоэдс вырожденного электронного газа, во-вторых, в пользу него свидетельствует температурная зависимость коэффициента термоэдс, характерная для соответствующей зависимости фононных длин пробегов, а также размерный максимум, коррелирующий с максимумом в фононной теплопроводности [1–3].

Однако, чистые массивные монокристаллы полуметаллов типа висмута имеют в этом отношении определенную специфику, поскольку при точном равенстве концентраций электронов n^- и дырок n^+ эффект фононного увлечения не должен проявляться. В этом случае импульс, получаемый фононами от электрического поля (π – подход Херринга) оказывается пропорциональным $(n^+ - n^-)$ и термоэдс фононного увлечения обращается в ноль. Следует отметить, что данный вывод справедлив только в случае, когда рассеяние происходит внутри электрон-фононной системы и не зависит от степени анизотропии как электрон-дырочного, так и фононного спектров. Для раскомпенсации системы и появления среднего дрейфа фононов, необходим дополнительный механизм рассеяния носителей, при котором потеря импульса электронами и дырками неодинакова. В совершенных образцах роль такого механизма может играть поверхность образца. Поскольку длины пробега носителей в висмуте ($T = 4{,}2$ K) $l^{\pm}$ составляют десятые доли миллиметра, то вклад от фононного увлечения в термоэдс массивного кристалла должен содержать малый параметр l/d, где d – поперечный размер образца. С этой точки зрения результаты работ [2, 3] кажутся несколько парадоксальными по сравнению с данными предыдущих авторов [1]. Несмотря на то, что в [2, 3] исследовались монокристаллы с существенно большей величиной отношения $\gamma = \rho_{300\mathrm{K}}/\rho_{4,2\mathrm{K}}$ и большего поперечного сечения, полученные значения термоэдс $\alpha \simeq 100$ мВ/К оказались на порядок выше, нежели в [1] ($\gamma \simeq 150$). Объяснение указанного эффекта в рамках классического размерного эффекта наталкивается на принципиальные трудности. Хотя авторы [4] и получили значения в максимуме порядка $\alpha \approx 20 + 30$ мВ/К, вычисления, проделанные в работе [5] в рамках более реалистической модели спектра носителей с учетом их анизотропии рассеяния на фононах, приводят к максимальному вкладу фононного увлечения на уровне 5 – 7 мВ/К, т. е. лучше согласуются с данными [1].

В настоящей работе указано на иную причину аномально высоких значений термоэдс. Как было показано в работе [6], в многодолинных материалах в приповерхностных областях кристалла существуют градиенты неравновесных концентраций, спадающие до объемных значений на расстояниях порядка диффузионной длины L, что с точки зрения фононного увлечения можно трактовать как концентрационную раскомпенсацию. Естественно, что максимальный эффект должен возникать, когда $d/L < 1$ и отсутствует механизм выравнивания концентрации носителей из разных долин. Однако, в этом пределе становится неизбежным проявление ПМР. Физически ясно, что максимальные термоэдс увлечения наблюдаются при слабом ПМР, т. к. в противоположном случае концентрационная раскомпенсация становится пренебрежимо малой. Следует также учесть, что рассеяние электронов и дырок на фононах при $T < 5$ К не является упругим и тем самым при рассчете кинетических коэффициентов необходимо использовать вариационную процедуру решения кинетического уравнения с учетом поверхности.

Система уравнений для функции распределения носителей φ долины β и фононов в пренебрежении междолинным рассеянием в объеме имеет вид

$$v_z \frac{\partial \varphi^{\beta}}{\partial z} - e^{\beta}(\mathbf{E}\mathbf{v}) = \hat{I}\{\varphi^{\beta}, \psi_q\} \qquad (1)$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial q} \vec{\nabla}\mathrm{T} \frac{\partial F^0}{\partial T} = \hat{I}\{\psi_q, \psi_q\} \qquad (2)$$

Здесь символами $\hat{I}$ обозначены интегралы столкновения носителей с фононами и фононов друг с другом. Граничные условия на поверхностях пластинки $z = \pm d$

$$\varphi^{\gtrless\beta}(v^*, \pm d) = \chi^{\pm}, \qquad (3)$$

где v^* – скорость отраженных носителей. Коэффициенты $\chi^{\pm}$ впоследствии находятся из условия интегрального баланса потоков на поверхности. С учетом междолинного рассеяния на поверхности соответствующие уравнения имеют вид

$$\langle v_z \varphi^{\gtrless\beta}\rangle = -\sum_{\beta'} d_{\beta\beta'}\langle v_z \varphi^{\lessgtr\beta'}\rangle, \qquad (4)$$

где $d_{\beta\beta}$ и $d_{\beta\beta'}$ – вероятности внутри и междолинного рассеяния на поверхности, а угловые скобки означают $\langle x\rangle = (2/\hbar^3)\int x(\partial f^0/\partial\epsilon)\,d^3k$. Опуская громоздкие выкладки, выпишем результаты для функции распределения:

$$\varphi^{\gtrless\beta} = \overline{\varphi}^{\beta}(z) + \left[\chi^{\pm} - \overline{\varphi}(\pm d)\right]\exp\left(-\frac{\pm z + d}{l}\right) + \frac{s^2\tau_{ph}}{T}\nabla_x T\lambda^{\beta}_{xi}k_i\left[1 - \exp\left(-\frac{\pm z + d}{l}\right)\right] \pm$$

$$\pm\frac{1}{l}\int_{\mp d}^{z} e^{\beta}(\epsilon_i l_i)\exp\left(\pm\frac{z' - z}{l}\right)dz', \qquad (5)$$

где введены обозначения $\overline{\varphi} = \langle\varphi\rangle / \langle 1\rangle$,

$$\epsilon = \left[E_x, E_y, E_z - \frac{1}{e}\left(\frac{d}{dz}\overline{\varphi}\right)\right], \quad l = \left(\frac{\tau}{m}\right)_{zz}\frac{1}{\sqrt{\epsilon_{zz}}}, \quad l_i = \tau_{ij}v_j,$$

ϵ_{ik} – тензор обратных эффективных масс, τ_{ph} – время релаксации в фононной подсистеме, τ_{ik} – тензор "время релаксации" носителей при рассеянии на равновесных фононах, $\lambda_{ik} = (\hat{A}R\hat{A}^{-1})$ описывает фононный спектр R в преобразованной системе координат, s – скорость звука. Следует отметить, что компоненты τ_{ik} не отвечают временам релаксации упругого рассеяния, а соответствуют формальной записи проводимости в стандартном виде. Численные значения соответствующих компонент приведены в [5]. Условие самосогласования [7] приводит к интегральному уравнению на $\overline{\varphi}$:

$$\overline{\varphi} - \frac{1}{2l}\int_{-d}^{d}\overline{\varphi}\exp\left(-\frac{|z' - z|}{l}\right)dz' = (E_x l_x + \chi^{+})\exp\left(\frac{z - d}{l}\right) - (E_x l_x - \chi^{-})\exp\left(-\frac{z + d}{e}\right). \qquad (6)$$

Для упрощения задачи рассмотрим наиболее симметричные случаи ориентации долин относительно поверхности образца, когда $\vec{\nabla}\mathbf{T} \parallel C_2$, а ось C_3 совпадает с нормалью к поверхности и $\vec{\nabla}\mathbf{T} \parallel C_3$, а ось C_2 параллельна нормали. В этих случаях можно считать поле E_z равным нулю. Уравнение (6) имеет точное решение и функция распределения полностью определяется. Выражение для термоэдс фононного увлечения α^{Σ} можно получить из уравнения для средней плотности тока в пластине обычным образом. Для интересующих нас случаев получим:

$$\alpha^{\Sigma}_{xx} = \frac{n_0 s^2\tau_{ph}}{T\sigma^{\Sigma}}\sum_{\beta} e^{\beta}\left\{\left(\lambda^{\beta}_{xx} - \frac{\lambda^{\beta}_{xz}\sigma^{\beta}_{xz}}{\sigma^{\beta}_{zz}}\right)\left[\left(1 - \frac{l}{2d}\left(1 - \exp\left(-\frac{2d}{l}\right)\right)\right]\right. +$$

$$\left. + \frac{\lambda^{\beta}_{xz}\sigma^{\beta}_{xz}}{\sigma^{\beta}_{zz}} d_{ee}d / [l(1 - d_{ee}) + d_{ee}d]\right\}, \qquad (7)$$

где d_{ee} – описывает междолинные перебросы из электронной в электронную долины. Как и следовало ожидать α^{Σ} максимальна при $d_{ee} \approx 0$.

Для дальнейшего анализа интерес представляет случай, отвечающий толстым пластинкам в смысле классического размерного эффекта (однако, $d < L$), в противоположном пределе ПМР пренебрежимо мало влияет на величину термоэдс, поскольку носитель тока, отразившись от поверхности не успевает проявить свою принадлежность другой долине. Если имеет место неравенство $(l/d) < d_{ee}$, α^{Σ}_{xx} определяется выражением:

$$\alpha^{\Sigma}_{xx} = \frac{n_0 s^2 e\tau_{ph}}{T\sigma^{\Sigma}}\left\{\left(\frac{l^{-} - l^{+}}{d}\right) + \frac{\lambda^{-}_{xz}\sigma^{-}_{xz}}{\sigma^{-}_{zz}}\frac{l}{d_{ee}d}\right\}. \qquad (8)$$

Второе слагаемое в (8) оказывается доминирующим при выполнении указанных выше условий. В случае, когда вероятность междолинного рассеяния мала $d_{ee} = 0{,}03$, значения термоэдс увлечения при данных ориентациях могут превысить 100 мВ/К. Принципиально важным оказывается факт, что полученный результат позволяет в независимом эксперименте оценить величину ПМР, поскольку все параметры в (8), за исключением d_{ee} могут быть вычислены или измерены с достаточной точностью. Учитывая, что численные значения величины d_{ee} можно связать также и с симметрией двумерной решетки на поверхности,измерения термоэдс чистых массивных монокристаллов висмута при различных ориентациях кристаллических осей по отношению к плоскостям, ограничивающим поверхность кристалла, позволят яснее понять природу ПМР.

Литература

1. *Коренблит И.Я., Кузнецов Н.Е., Шалыт С.С.* ЖЭТФ, 1969, **56**, 8.
2. *Копылов В.Н., Межов-Деглин Л.П.* Письма в ЖЭТФ, 1972, **15**, 269.
3. *Boxus J., Issi J.-P.* J. Phys., 1977, **C10**, 397.
4. *Медведев Э.С., Копылов В.Н., Межов-Деглин Л.П.* ФНТ, 1975, **1**, 1192.
5. *Козлов В.А., Сахаров К.А.* ФТТ, 1984, **26**, 1823.
6. *Рашба Э.И.* ЖЭТФ, 1965, **48**, 1427.
7. *Горкун Ю.И.* УФЖ, 1971, **16**, 657.

Поступила в редакцию
15 июня 1987 г.
После переработки
21 августа 1987 г.

Московский
физико-технический институт