

П'ЄЗООПР ВІСМУТА ПРИ ГЕЛІЄВИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

В даній роботі проведено обчислення та аналіз тензора питомого опору в деформованих кристалах вісмуту з метою пошуку умов для підвищення термоефективності матеріалу. Показано, що анізотропія питомого електроопору для дводолинної моделі значно перевищує анізотропію $\hat{\rho}$ у відсутності деформації.

В роботі [1] показано, що в області температур $T < 8\text{K}$ температурозалежну частину опору, яка добре узгоджується з експериментальними даними, можна описати в наближенні, що електрони розсіюються в основному на фононах. При температурі порядку 4К анізотропія електропровідності електронів обумовлена в основному анізотропією ефективних мас, яка у вісмуті має досить помітну величину. Але після сумування по еліпсоїдах анізотропія електропровідності (опору) кристала складає не більше 20%.

Оскільки вісмут володіє непоганими термоелектричними властивостями, бажано було б знайти такі умови, за яких фізичні величини, які визначають термоефективність матеріалу, були б оптимальними. Сюди відноситься й анізотропія питомого опору, й анізотропія термоЕРС. Покращити вказані властивості можна, наприклад, за допомогою деформації кристала вісмуту. При цьому відбувається перерозподіл електронів, і симетрія кінетичних тензорів знижується.

Обчислимо тензор питомого опору в деформованих кристалах вісмуту. Енергетичний спектр електронів і дірок такий, як і в роботі [1].

Запишемо тензор електропровідності для i -го еліпсоїда в кристалографічній системі координат у виді:

$$\hat{\sigma}^{(i)} = e\mu_{11}^{(i)} N_i \left[\hat{I} + (K_2 - 1)\hat{I}^{(2)} + (K_3 - 1)\hat{I}^{(3)} + K_4 \left(\hat{I}^{(23)} + \hat{I}^{(32)} \right) \right], \quad (1)$$

де $\mu_{11}^{(i)}$ - рухливість електронів вздовж бінарної осі (вздовж осі Ox системи координат, зв'язаної з i -тим еліпсоїдом). Параметри K_2, K_3, K_4 визначені формулами

$$\begin{aligned} K_2 &= k_2 \cos^2 \eta + k_3 \sin^2 \eta + k_4 \sin 2\eta, \\ K_3 &= k_2 \sin^2 \eta + k_3 \cos^2 \eta - k_4 \sin 2\eta, \\ k_4 &= \frac{1}{2}(k_3 - k_2) \sin 2\eta + k_4 \cos 2\eta. \end{aligned} \quad (2)$$

k_2, k_3, k_4 - параметри анізотропії рухливості в головних осях еліпсоїда мас:

$$k_2 = \frac{\sigma_{22}^{(i)}}{\sigma_{11}^{(i)}}; \quad k_3 = \frac{\sigma_{33}^{(i)}}{\sigma_{11}^{(i)}}; \quad k_4 = \frac{\sigma_{23}^{(i)}}{\sigma_{11}^{(i)}};$$

$k_2=0.015, k_3=0.467$ [1].

$$\left(\hat{I}\right)_{ik} = \delta_{ik}, \quad \left(\hat{I}^{(2)}\right)_{ik} = \delta_{i2}\delta_{k2}, \quad \left(\hat{I}^{(3)}\right)_{ik} = \delta_{i3}\delta_{k3}, \quad \left(\hat{I}^{(23)}\right)_{ik} = \delta_{i2}\delta_{k3}.$$

Зауважимо, що в формулі (1) ми в подальшому не будемо враховувати компоненту σ_{23} тензора $\hat{\sigma}$ в головних осях еліпсоїда мас, яка обумовлена поворотом еліпсоїдів на кут η і є значно менше від інших.

Вважатимемо, що вісь механічного напруження напрямлена вздовж осі "1" розрахункової системи координат і складає кут φ з віссю Ox кристалографічної системи координат. Основним припущенням теорії, що торкається впливу деформації на кінетичні ефекти, є врахування тільки зміщення долин під впливом деформації вздовж енергетичної шкали.

Позначимо через $n_j = N_j / N$ відносне число електронів в j -ій долині, яке, взагалі кажучи, залежить від напрямку та величини деформуючої сили. Тензор питомий електро-провідності кристала $\hat{\sigma}$ в розрахунковій системі координат можна записати тоді наступним чином ($N=3.02 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ - загальне число електронів в долинах, $N=\sum N_j$).

$$\hat{\sigma} = e\mu_{11}N[\hat{I} + (K_2 - 1)\hat{a} + (K_3 - 1)\hat{I}^{(3)} + K_4\hat{b}], \quad (3)$$

де

$$a_{ik} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - \Delta_1^- \cos 2\varphi + \frac{\sqrt{3}}{2} \Delta_- \sin 2\varphi & \Delta_1^- \sin 2\varphi + \frac{\sqrt{3}}{2} \Delta_- \cos 2\varphi & 0 \\ \Delta_1^- \sin 2\varphi + \frac{\sqrt{3}}{2} \Delta_- \cos 2\varphi & 1 + \Delta_1^- \cos 2\varphi - \frac{\sqrt{3}}{2} \Delta_- \sin 2\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\Delta_1^- = n_1 - \frac{\Delta_+}{2}, \quad \Delta_- = n_2 - n_3, \quad \Delta_+ = n_2 + n_3,$$

$$\hat{b} = \alpha(\hat{I}^{(13)} + \hat{I}^{(31)}) + \beta(\hat{I}^{(23)} + \hat{I}^{(32)}),$$

$$\alpha = \Delta_1^- \sin \varphi - \frac{\sqrt{3}}{2} \Delta_- \cos \varphi, \quad (4)$$

$$\beta = \Delta_1^- \cos \varphi + \frac{\sqrt{3}}{2} \Delta_- \sin \varphi$$

Величини Δ_1^- , Δ_- визначають ступінь нееквівалентності різних груп долин.

Оскільки

$$\hat{\sigma}\hat{\rho} = \hat{\rho}\hat{\sigma} = \hat{I},$$

то інвертуючий тензор $\hat{\sigma}$, знаходимо

$$\hat{\rho} = \frac{(e\mu_{11}N)^2}{|\hat{\sigma}|} [K_2K_3\hat{I} - K_3(K_2 - 1)\hat{a} - K_2K_4\hat{b} + K_4(K_2 - 1)\hat{c} + (F_{33}^{(a)}(K_2 - 1)^2 - K_2(K_3 - 1))\hat{I}^{(3)} + K_4^2\hat{F}^{(b)}] \quad (5)$$

Тут $\hat{c} = \hat{a}\hat{b} + \hat{b}\hat{a}$,

$\hat{F}^{(b)}$ - тензор, побудований з алгебраїчних доповнень елементу b_{ik} матриці \hat{b} , $F_{33}^{(a)}$ - алгебраїчне доповнення елементу a_{33} матриці \hat{a} , $|\hat{\sigma}|$ - визначник матриці

$$|\hat{\sigma}| = (e\mu_{11}N)^3 \left\{ K_3(K_2 + (K_2 - 1)^2 F_{33}^{(a)}) + K_4^2 Sp\hat{F}^{(b)} + K_4^2(K_2 - 1)Sp\hat{F}^{(b)} \right\} \quad (6)$$

Перейдемо до аналізу виразу (5). З останнього можна зробити висновок, що для довільної орієнтації осі механічного напруження і величини P усі компоненти $\hat{\rho}$ відмінні від нуля. Це пов'язано як з несиметричною орієнтацією деформуючої сили по відношенню до еліпсоїдів, так і з різним ступенем нееквівалентності долин для заданої орієнтації деформуючої сили.

Найбільш простий вид тензор $\hat{\rho}$ має у випадку симетричної орієнтації осі механічного напруження. Наприклад, якщо вісь деформації орієнтована вздовж бінарної осі кристала ($\varphi=0^\circ$), то долини, які розташовані не на осі деформації, еквівалентні між собою і відрізняються числом n_j від першої долини. При деформації кристала ці долини піднімаються вгору, і електрони переходять в долину, розташовану на осі деформації. При достатньо великому значенні P ($P \geq P_{\max}$) відбувається фазовий перехід [2] типу $3e+1d \rightarrow 1e+1d$, і всі електрони зосереджуються в I-ій долині. Навпаки, якщо $\varphi=90^\circ$ (вісь деформації напрямлена вздовж бісекторної осі кристала) відбувається фазовий перехід типу $3e+1d \rightarrow 2e+1d$.

У першому випадку

$$\rho_{ik} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \rho_{22} & \rho_{23} \\ 0 & \rho_{23} & \rho_{33} \end{pmatrix}, \quad (7)$$

а у другому

$$\rho_{ik} = \begin{pmatrix} \rho_{11} & 0 & \rho_{13} \\ 0 & \rho_{22} & 0 \\ \rho_{13} & 0 & \rho_{33} \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Вирази для компонент ρ_{ik} при довільному P для розглядуваних випадків можуть бути легко отримані з (5). Для граничного випадку $P=P_{\max}$ $\hat{\rho}$ у першому випадку співпадає з тензором питомого опору для однієї долини, а у другому

(дводолинна модель) має вид

$$\begin{aligned} \rho_{11} &= \frac{4}{e\mu_{11}N} \frac{K_3}{K_3(3+K_2) - K_4^2}, \\ \rho_{22} &= \frac{4}{e\mu_{11}N} \frac{1}{1+3K_2}, \quad \rho_{13} = \frac{2}{e\mu_{11}N} \frac{K_1}{K_3(K_2+3) - K_4^2}, \\ \rho_{33} &= \frac{1}{e\mu_{11}N} \frac{3(1+K_2)^2 + 4K_2}{K_3(1+3K_2)[K_3(K_2+3) - K_4^2]}. \end{aligned} \quad (9)$$

Співставляючи (9) з компонентами $\hat{\rho}$ при $P=0$

$$\rho_{11}(0) = \rho_{22}(0) = \frac{2}{e\mu_{11}N} \frac{1}{1+K_2}; \quad \rho_{33}(0) = \frac{1}{e\mu_{11}N K_3},$$

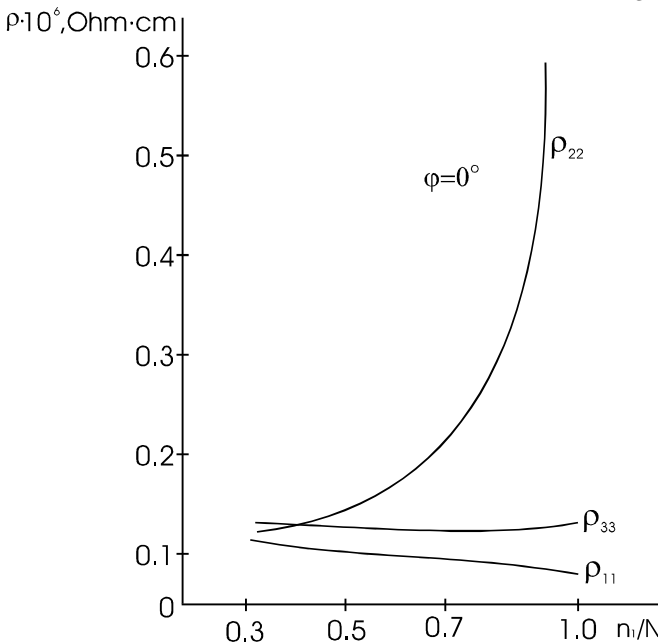


Рис.1. Залежність компонент тензора ρ' езоопору від відносного числа електронів n_1 в 1-ій долині ($\varphi=0^\circ$).

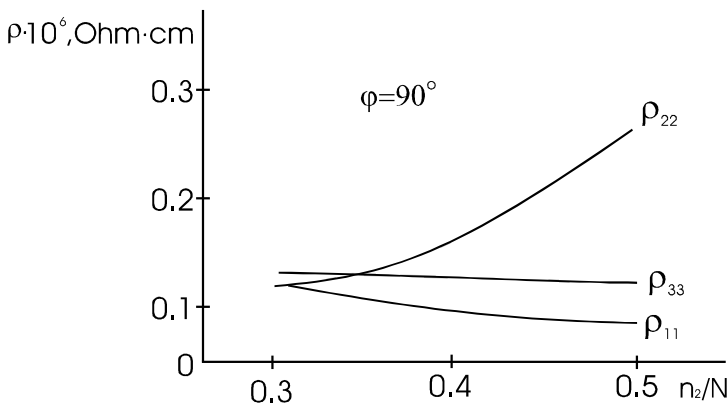


Рис.2. Залежність компонент тензора п'єзоопору від відносного числа електронів n_2 в долинах, які опускаються ($\varphi=90^\circ$).

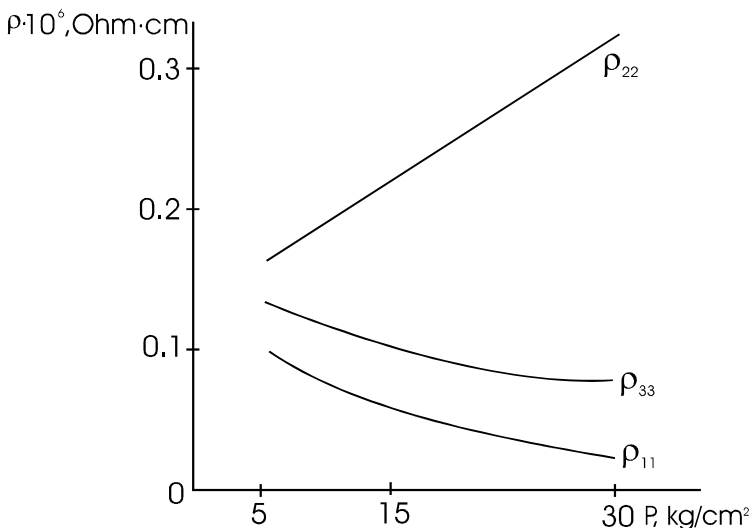


Рис.3. Деформаційна залежність компонент тензора питомого опору для випадку $\varphi=0^\circ$.

бачимо, що анізотропія питомого електроопору для дводолинної моделі значно перевищує анізотропію $\hat{\rho}$ у відсутності деформації.

Значний вплив деформації на анізотропію питомого опору

ілюструють рис.1 і рис.2, де приведені розрахункові криві за умови, що число електронів при деформації зберігається.

В роботі [2] показано, що при деформації вісмуту, число електронів, взагалі кажучи, не зберігається. В цій же роботі приведена концентрація електронів в еліпсоїдах в залежності від величини механічного напруження P .

На рис.3 приведена деформаційна залежність компонент тензора питомого опору для випадку $\varphi=0^\circ$, яка розрахована з експериментальними значеннями ρ_j в кожній долині. З рисунку видно, що анізотропія питомого опору менше, ніж у випадку, коли загальне число електронів не залежить від величини механічного напруження. Саме залежністю N від P можна пояснити приведену на рисунку більш слабку залежність ρ_{jk} від P . Звичайно більш цікавим є співставлення розрахунку з прямими вимірами $\hat{\rho}$, які, на жаль, відсутні. Зауважимо також, що з такого співставлення можна було б зробити певний висновок щодо параметрів анізотропії K_2 і K_3 .

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Винник В.С., Коренблит И.Я., Охрем Е.А., Самойлович А.Г. Спротивление висмута при низких температурах // ЖЭТФ. - 1981. - **81**, №5. - С. 2031-2041.
2. Изменение зонной структуры и электронные фазовые переходы у висмута и сплавов Bi-Sb при деформациях типа одноосного растяжения / Брандт Н.Б., Кульбачинский В.А., Минина Н.Я., Широких В.Д. // ЖЭТФ.-1980.-**78**, №3. - С.1114-1131.

SUMMARY

BUDA I.S., OKHREM O.A.

PIESORESISTANCE OF BISMUTH AT HELIUM TEMPERATURES

Tensor of the electrical resistance in the deformed bismuth single crystal has been calculated. It has been shown that the electrical resistance anisotropy of the two-valleys model is more than without deformation.