

УДК 537

Горський П.В.



Горський П.В.

Інститут термоелектрики НАН і МОН України,
вул. Науки, 1, Чернівці, 58029, Україна

**ЕЛЕКТРОПРОВІДНІСТЬ ФУНКЦІОНАЛЬНИХ, У ТОМУ
ЧИСЛІ ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНИХ, МАТЕРІАЛІВ, ЩО
ОПИСУЮТЬСЯ МОДЕЛЛЮ ФІВАЗА, У КВАЗІКЛАСИЧНІЙ
ОБЛАСТІ МАГНІТНИХ ПОЛІВ**

Розробка, оптимізація й використання тих або інших функціональних, у тому числі термоелектричних, матеріалів для створення конкретних приладів, елементів і систем припускає їх досить точний опис, у тому числі на основі певних модельних уявлень про їхній зонний спектр і механізми розсіювання носіїв заряду в них. У ряді випадків характер зонного спектра цих матеріалів прямо визначає область їх застосування. Діючим інструментом експериментальної перевірки, а найчастіше й формування, згаданих модельних уявлень є, наприклад, дослідження осциляцій Шубнікова де Гааза при різних орієнтаціях магнітного поля. Однак для традиційної квазікласичної теорії, що враховує лише осциляції часу релаксації, у рамках якої, як правило, проводиться обробка й інтерпретація експериментальних результатів, несуттєві конкретний характер непараболічності зонного спектра носіїв заряду та кінцева довжина поверхні Фермі уздовж напрямку магнітного поля. Це може приводити до неточностей у визначенні, наприклад, концентрації носіїв заряду, а також до суперечливості даних про зонний спектр матеріалу, отриманих різними методами. Тому в роботі запропонована вдосконалена теорія осциляцій Шубнікова де Гааза у функціональних, у тому числі термоелектричних, шаруватих матеріалах, що описуються моделлю Фіваза. Розрахунки проведені в рамках застосовності закону Ома для випадку, коли електричне і квантуюче магнітне поля паралельні один одному й перпендикулярні шарам. При цьому враховано три фактори: осцилююча залежність часу релаксації від магнітного поля в області застосовності квазікласичного наближення, непараболічність зонного спектра носіїв заряду, що описується моделлю Фіваза, і кінцева довжина поверхні Фермі уздовж напрямку магнітного поля.

Ключові слова: ефект Шубнікова де Гааза, модель Фіваза, час релаксації, густина станів, квазікласичне наближення.

Development, optimization and use of these or other functional, including thermoelectric, materials for creation of specific devices, elements and systems supposes their adequately precise description on the basis of certain model assumptions of their band spectrum and the mechanisms of charge carrier scattering in them. In some cases the character of band spectrum of these materials directly determines their range of application. An efficient tool of experimental verification, and not infrequently of formation of the above model assumptions, is for instance, investigation of the Shubnikov-de Haas oscillations with different orientations of a magnetic field. However, for a conventional quasi-classical theory taking into account only relaxation time oscillations, in the framework of which, as a rule, processing and interpretation of the experimental results takes place, the specific character of nonparabolicity of charge carrier band spectrum and finite extension of the Fermi surface along the direction of a magnetic field are

inessential. This can result in the uncertainty of determination of, for instance, charge carrier concentration, as well as in the controversy of data on the band spectrum of material obtained by different methods. Therefore, the paper introduces an improved theory of the Shubnikov-de Haas oscillations in functional, including thermoelectric, layered materials described by the Fivaz model. The calculations are performed in the framework of Ohm's law applicability for the case when the electric and quantizing magnetic fields are parallel to each other and perpendicular to the layers. In so doing, three factors are taken into account, namely the oscillating dependence of relaxation time on a magnetic field in the range of application of quasi-classical approximation, the nonparabolicity of charge carriers band spectrum described by the Fivaz model and finite extension of the Fermi surface along the direction of a magnetic field.

Key words: Shubnikov-de Haas effect, Fivaz model, relaxation time, density of states, quasi-classical approximation.

Вступ

Ефект Шубнікова де Гааза є діючим інструментом вивчення зонного спектра та механізмів розсіювання носіїв заряду у функціональних матеріалах, у тому числі термоелектричних. Дослідженням термоелектричних матеріалів у сильних магнітних полях, у тому числі з використанням даного ефекту, присвячений ряд робіт [1-3]. Дослідження ефекту Шубнікова де Гааза при різних орієнтаціях магнітного поля дозволяє в рамках теорії Ліфшиця-Косевича [4] відновити форму поверхні Фермі, а також визначити концентрацію та часи релаксації носіїв заряду. Однак, досить часто в реальних кристалах спостерігаються відхилення від теорії Ліфшиця-Косевича, внаслідок чого, наприклад, концентрації носіїв заряду, визначені з ефекту Шубнікова де Гааза й з ефекту Холла, можуть значно різнитися між собою. Причинами такої розбіжності, зокрема, можуть бути непараболічність зонного спектра носіїв заряду й кінцева довжина поверхні Фермі уздовж напрямку магнітного поля, які не враховуються традиційною теорією Ліфшиця-Косевича. Внаслідок цього, наприклад, при нульовій концентрації носіїв заряду, ця теорія, принаймні, формально, дає фізично некоректний результат: поверхні Фермі немає, а осциляції є. Теорія електропровідності кристалів, що описуються моделлю Фіваза [5], вільна від цих обмежень, побудована в роботі [6], у якій показано, що ефекти непараболічності можуть бути добре вираженими й у випадку замкнених поверхонь Фермі. Однак у цій роботі зроблене істотне модельне припущення про те, що час релаксації поздовжнього квазіімпульсу залежить тільки від цього квазіімпульсу й не осцилює при зміні магнітного поля. У той же час із результатів робіт [7, 8] випливає, що у випадку, коли у вузькій міні-зоні, що описує рух електронів перпендикулярно шарам, укладається досить багато рівнів Ландау, то вирішальний внесок в осциляції електропровідності вносить саме залежність часу релаксації від магнітного поля. Цей час залежить уже не від поздовжнього квазіімпульсу окремо, а від енергії електрона в цілому. У силу вищесказаного метою даної статті є побудова послідовної теорії осциляцій Шубнікова де Гааза з врахуванням усіх трьох факторів, а саме: осциляцій часу релаксації, непараболічності зонного спектра в рамках моделі Фіваза й кінцевої довжини поверхні Фермі уздовж напрямку магнітного поля.

Виведення і аналіз формули для поздовжньої електропровідності

При виведенні формули для поздовжньої електропровідності будемо додержуватися методики, описаної в роботі [8], однак модифікуємо цю методику з урахуванням замкнутості

поверхні Фермі і її кінцевої довжини уздовж напрямку магнітного поля. Енергетичний спектр носіїв заряду в термоелектричному матеріалі, що описується моделлю Фіваза, у квантуючому магнітному полі, перпендикулярному шарам, визначається так:

$$\varepsilon(n, k_z) = \mu^* B(2n+1) + \Delta(1 - \cos ak_z). \quad (1)$$

У цій формулі n, k_z – відповідно номер рівня Ландау та складова квазіімпульсу в напрямку, перпендикулярному шарам, $\mu^* = \mu_B m_0 / m^*$, μ_B, m_0, m^* – відповідно магнетон Бора, маса вільного електрона й ефективна маса електрона в площині шару, Δ, a – відповідно півширина міні-зони в напрямку, перпендикулярному шарам і відстань між трансляційно еквівалентними шарам, B – індукція магнітного поля.

Час релаксації поздовжнього квазіімпульсу будемо вважати, як при традиційному підході, обернено пропорційним густині електронних станів у магнітному полі. Користуючись формулою Пуассона й враховуючи розширення рівнів Ландау внаслідок зіткнень, що залежить від магнітного поля B та енергії електрона ε час релаксації у випадку енергетичного спектра (1) можна записати так:

$$\tau(\varepsilon, B) = \frac{\pi\tau_0}{\kappa_\varepsilon} \left\{ 1 - 2 \exp(-\pi k T_{D0} \chi_\varepsilon / \mu^* B) \left[\cos\left(\pi \frac{\varepsilon - \Delta}{\mu^* B}\right) \left[C_0 J_0(\pi \Delta / \mu^* B) + \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + 2 \sum_{r=1}^{\infty} (-1)^r C_{2r} J_{2r}(\pi \Delta / \mu^* B) \right] - 2 \sin\left(\pi \frac{\varepsilon - \Delta}{\mu^* B}\right) \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r C_{2r+1} J_{2r+1}(\pi \Delta / \mu^* B) \right] \right\}^{-1}. \quad (2)$$

У цій формулі τ_0, T_{D0} – відповідно час релаксації й температура Дінгла для відкритої поверхні Фермі під час відсутності магнітного поля, $\kappa_\varepsilon = \arccos(1 - \varepsilon/\Delta)$ для замкнених ізоенергетичних поверхонь, і $\kappa_\varepsilon = \pi$ для відкритих ізоенергетичних поверхонь, $C_0 = \kappa_\varepsilon, C_m = \sin m \kappa_\varepsilon / m$, $J_n(x)$ – функції Бесселя першого роду дійсного аргументу. Тому для відкритих поверхонь (2) переходить у формулу роботи [8]. Крім того формула (2), на відміну від формули роботи [8], явно враховує й ту обставину, що при відсутності поверхні Фермі осциляції Шубнікова де Гааза відсутні.

Для обчислення електропровідності термоелектричного матеріалу нам знадобиться ще сума модулів поздовжніх швидкостей електронів по зайнятим підзонам Ландау. Згідно [8] з врахуванням (1) вона зводиться до обчислення інтегралу виду:

$$I = \int_0^{\infty} \cos \left[\pi \left(\frac{\varepsilon}{\mu^* B} - x \right) \right] \sqrt{2 \left(\frac{\varepsilon - \mu^* Bx}{\Delta} \right) - \left(\frac{\varepsilon - \mu^* Bx}{\Delta} \right)^2} dx. \quad (3)$$

Однак верхня межа інтегрування в даному інтегралі некоректна. За аналогією з формулою (2) верхня межа інтегрування повинна бути рівна $\varepsilon/\mu^* B$. Таке твердження вірне тому, що згідно з формулою підсумовування Пуассона змінна інтегрування x походить від суттєво позитивної величини $2n+1$ у формулі (1). Зазначене обмеження також явно враховує відсутність осциляцій Шубнікова де Гааза при відсутності поверхні Фермі [6]. Тому відповідно до методики [8] з врахуванням (2), а також коректної верхньої межі в (3), формула для повної

електропровідності термоелектричного матеріалу при низьких температурах при нехтуванні польовою й температурною залежністю хімічного потенціалу приймає наступний вид:

$$\sigma = \sigma_0 + \sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3. \quad (4)$$

При цьому:

$$\sigma_0 = \frac{8\pi^3 e^2 m^* a \tau_0 \Delta^2}{h^4} \left(1 - \frac{\sin 2\kappa_\zeta}{2\kappa_\zeta} \right), \quad (5)$$

$$\sigma_1 = 2\sigma_0 R_T R_D \left\{ \cos \left(\pi \frac{\zeta - \Delta}{\mu^* B} \right) \left[\bar{C}_0 J_0 \left(\frac{\pi \Delta}{\mu^* B} \right) + 2 \sum_{r=1}^{\infty} (-1)^r \bar{C}_{2r} J_{2r} \left(\frac{\pi \Delta}{\mu^* B} \right) \right] - \right. \\ \left. - 2 \sin \left(\pi \frac{\zeta - \Delta}{\mu^* B} \right) \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r \bar{C}_{2r+1} J_{2r+1} \left(\frac{\pi \Delta}{\mu^* B} \right) \right\}, \quad (6)$$

$$\sigma_2 = -\frac{8\pi^3 e^2 m^* a \tau_0 \Delta^2}{h^4} R_T R_D \left\{ \cos \left(\pi \frac{\zeta - \Delta}{\mu^* B} \right) \left[(\tilde{C}_0 - \tilde{C}_2) J_0 \left(\frac{\pi \Delta}{\mu^* B} \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + \sum_{r=1}^{\infty} (-1)^r (2\tilde{C}_{2r} - \tilde{C}_{2r+2} - \tilde{C}_{2r-2}) J_{2r} \left(\frac{\pi \Delta}{\mu^* B} \right) \right] + \right. \\ \left. + \sin \left(\pi \frac{\zeta - \Delta}{\mu^* B} \right) \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r (2\tilde{C}_{2r+1} - \tilde{C}_{2r+3} - \tilde{C}_{|2r-1|}) J_{2r+1} \left(\frac{\pi \Delta}{\mu^* B} \right) \right\}, \quad (7)$$

$$\sigma_3 = -\frac{8\pi^3 e^2 m^* a \tau_0 \Delta^2}{h^4} R_D^2 \left\{ \left[\bar{C}_0 J_0 \left(\frac{\pi \Delta}{\mu^* B} \right) + 2 \sum_{r=1}^{\infty} (-1)^r \bar{C}_{2r} J_{2r} \left(\frac{\pi \Delta}{\mu^* B} \right) \right] \times \right. \\ \left. \times \left[(\tilde{C}_0 - \tilde{C}_2) J_0 \left(\frac{\pi \Delta}{\mu^* B} \right) + \sum_{r=1}^{\infty} (-1)^r (2\tilde{C}_{2r} - \tilde{C}_{2r+2} - \tilde{C}_{2r-2}) J_{2r} \left(\frac{\pi \Delta}{\mu^* B} \right) \right] + \right. \\ \left. + 2 \left[\sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r \bar{C}_{2r+1} J_{2r+1} \left(\frac{\pi \Delta}{\mu^* B} \right) \right] \left[\sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r (2\tilde{C}_{2r+1} - \tilde{C}_{2r+3} - \tilde{C}_{|2r-1|}) J_{2r+1} \left(\frac{\pi \Delta}{\mu^* B} \right) \right] \right\}, \quad (8)$$

У формулах (5) – (8) ζ – хімічний потенціал газу носіїв заряду в матеріалі, $C_0 = \kappa_\zeta = \arccos(1 - \zeta/\Delta)$ для замкнених поверхонь Фермі, і $C_0 = \kappa_\zeta = \pi$ для відкритих поверхонь Фермі, $\bar{C}_m = \sin m\bar{C}_0/m$, $\tilde{C}_m = \bar{C}_m/\bar{C}_0$. Понижувальні множники R_T та R_D мають такий вигляд:

$$R_T = \frac{\pi^2 kT/\mu^* B}{sh(\pi^2 kT/\mu^* B)}, \quad (9)$$

$$R_D = \exp(-\pi kT_{D0} \kappa_\zeta / \mu^* B). \quad (10)$$

Перший з них відомим чином враховує температурне «розмиття» осциляцій, а другий пов'язаний з розширенням рівнів Ландау внаслідок розсіювання електронів на іонах домішки. Саме це розсіювання є домінуючим в області існування осциляцій Шубнікова де Гааза. Непараболічність зони провідності термоелектричного матеріалу у формулах (6) – (8) проявляється в наявності функцій Бесселя, а кінцева довжина поверхні Фермі уздовж напрямку

поля впливає на осциляції Шубнікова де Гааза через модулюючі коефіцієнти \bar{C}_m та \tilde{C}_m , які перетворюються відповідно в нуль і одиницю при $\zeta = 0$, тобто при зникненні поверхні Фермі. Таким чином, якщо поверхня Фермі зникає, то осциляції Шубнікова де Гааза зникають «у принципі», а не «по ймовірності» і не «у середньому». У цьому полягає одне з основних відмінностей пропонованого підходу від традиційного.

Складові поздовжньої електропровідності, що входять у формулу (4), можуть бути проінтерпретовані в такий спосіб. Складова σ_0 є електропровідністю термоелектричного матеріалу при низьких температурах під час відсутності магнітного поля. Складова σ_1 визначає обумовлений осциляціями часу релаксації основний внесок в осциляції Шубнікова де Гааза в області застосовності квазікласичного наближення. Складова σ_2 проявляє себе навіть під час відсутності осциляцій часу релаксації. Вона обумовлена власне квантуванням фазового простору в магнітному полі й може стати домінуючою при зростанні індукції магнітного поля. В області ж застосовності квазікласичного наближення складова σ_2 приводить лише до зсуву фази й деякого перенормування амплітуди основних осциляцій, обумовлених складовою σ_1 . Складова σ_3 описує так звані «повільні» осциляції [8], частота яких не залежить від перерізів поверхні Фермі площинами, перпендикулярними магнітному полю. Внаслідок цього «повільні» осциляції не піддані температурному «розмиттю», а загасають тільки в силу процесів розсіювання. Але ці осциляції зникають нарівні зі звичайними «швидкими» осциляціями при зникненні поверхні Фермі.

Аналіз показує, що в наближенні ефективної маси залишаються тільки складові $\sigma_0, \sigma_1, \sigma_2$ й вони, відповідно, рівні:

$$\sigma_0 = \frac{32\pi^3 e^2 m^* a \tau_0 \Delta \zeta}{3h^4}, \quad (11)$$

$$\sigma_1 = 2\sigma_0 R_T R_D \sqrt{\frac{\mu^* B}{\Delta}} \left[\cos\left(\frac{\pi \zeta}{\mu^* B}\right) C\left(\sqrt{\frac{\zeta}{\mu^* B}}\right) + \sin\left(\frac{\pi \zeta}{\mu^* B}\right) S\left(\sqrt{\frac{\zeta}{\mu^* B}}\right) \right], \quad (12)$$

$$\sigma_2 = -\frac{32\pi^2 e^2 m^* a \tau_0 \Delta^2}{h^4} R_T R_D \left(\frac{\mu^* B}{\Delta}\right)^{3/2} \left[\sin\left(\frac{\pi \zeta}{\mu^* B}\right) C\left(\sqrt{\frac{\zeta}{\mu^* B}}\right) - \cos\left(\frac{\pi \zeta}{\mu^* B}\right) S\left(\sqrt{\frac{\zeta}{\mu^* B}}\right) \right]. \quad (13)$$

У формулах (12) і (13) $C(x)$ і $S(x)$ – косинус- і синус-інтеграли Френеля відповідно. Оскільки $C(0) = S(0) = 0$, то в цьому випадку також врахований факт зникнення осциляцій при зникненні поверхні Фермі. Переходу до традиційного квазікласичного наближення в цих формулах відповідає умова $\zeta/\mu^* B \gg 1$. Тоді $C(x) = S(x) \approx 0.5$ й ми одержуємо:

$$\sigma_1 = \sigma_0 R_T R_D \sqrt{\frac{2\mu^* B}{\Delta}} \cos\left(\frac{\pi \zeta}{\mu^* B} - \frac{\pi}{4}\right). \quad (14)$$

Формула (14) відповідає традиційній теорії Ліфшиця-Косевича для поверхні Фермі з єдиним екстремальним, а саме, максимальним, перерізом площиною $k_z = 0$, перпендикулярною магнітному полю. Саме ця формула, або її модифікації для випадків більш складних поверхонь Фермі з багатьма екстремальними перерізами площинами, перпендикулярними магнітному

полю, як правило, використовується при обробці експериментальних даних по ефекту Шубнікова де Гааза у функціональних, у тому числі термоелектричних, матеріалах, у випадку, коли електричне й магнітне поля паралельні один одному. Цілком аналогічно формула для складової σ_2 здобуває вид:

$$\sigma_2 = -\frac{16\sqrt{2}\pi^2 e^2 m^* a \tau_0 \Delta^2}{h^4} R_T R_D \left(\frac{\mu^* B}{\Delta}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{\pi\zeta}{\mu^* B} - \frac{\pi}{4}\right). \quad (15)$$

З формул (14) і (15) видно, що у випадку кристалів, що описуються моделлю Фіваза, умова застосовності традиційного підходу, при якому нехтується складовими σ_2 й σ_3 , має вигляд $\mu^* B/\Delta \ll 1$. У цьому випадку, наприклад, складова σ_2 приблизно в $\Delta/\mu^* B$ раз менша σ_1 . Але в сильно анізотропних кристалах відношення $\mu^* B/\Delta$ не занадто мале або навіть велике в порівнянні з одиницею, у силу чого складова σ_2 не тільки не є нехтовно малою, але може стати домінуючою. У цьому випадку вірна теорія, розвинена в роботі [6].

Використовуючи стандартні тригонометричні формули, сумарну осцилюючу частину електропровідності для замкненої поверхні Фермі в умовах застосовності квазікласичного наближення можна записати у вигляді:

$$\sigma_{os} = \sigma_0 R_T R_D \sqrt{1+a^2} \sqrt{\frac{2\mu^* B}{\Delta}} \cos\left(\frac{\pi\zeta}{\mu^* B} - \frac{\pi}{4} + \varphi\right). \quad (16)$$

Параметри a й φ описують, відповідно, перенормування амплітуди осциляцій і їх зсув по фазі. Ці параметри визначаються в такий спосіб:

$$a = 3\mu^* B/2\pi\zeta, \varphi = \arctg a. \quad (17)$$

Отже, в умовах застосовності квазікласичного наближення, коли $\mu^* B/\Delta \ll 1$, перенормування амплітуди й фазовий зсув осциляцій Шубнікова де Гааза в порівнянні із традиційною теорією Ліфшиця-Косевича малі за умови, що для конкретної замкненої поверхні Фермі відношення ζ/Δ не занадто мале в порівнянні з одиницею.

З формули (16) формально випливає, що непараболічність, описувана моделлю Фіваза, ніяк не проявляє себе в осциляціях Шубнікова де Гааза, якщо поверхні Фермі замкнені. Однак у дійсності це невірно. Справа в тому, що при одній і тій же концентрації носіїв заряду й замкненій поверхні Фермі енергія Фермі носіїв заряду в термоелектричному матеріалі, що описується моделлю Фіваза, трохи менша, ніж у наближенні ефективної маси. Така відмінність обумовлена тим, що при одній і тій же енергії $\varepsilon < 2\Delta$, тобто за умови замкнутості ізоенергетичних поверхонь, густина станів у моделі Фіваза більша, ніж у наближенні ефективної маси. Тому навіть у квазікласичному наближенні, як це випливає з формул (16) і (17), згадана непараболічність повинна проявляти себе у зменшенні частоти осциляцій, їхньому запізнюванні по фазі й деякій зміні їх відносного внеску. Непараболічність проявляється ще більш рельєфно, якщо замість квазікласичної формули (16) користуватися точними формулами (5) – (8) у рамках моделі Фіваза й (11) – (13) у наближенні ефективної маси. Це видно з рис. 1, який показує, що непараболічність, що описується моделлю Фіваза, приводить до запізнювання осциляцій по фазі й досить відчутному зменшенню їх амплітуди. Це зменшення, так само як і

запізнювання по фазі, пояснюється тим, що густина станів у моделі Фіваза більша, і, отже, частота осциляцій і час релаксації менші, ніж у наближенні ефективної маси.

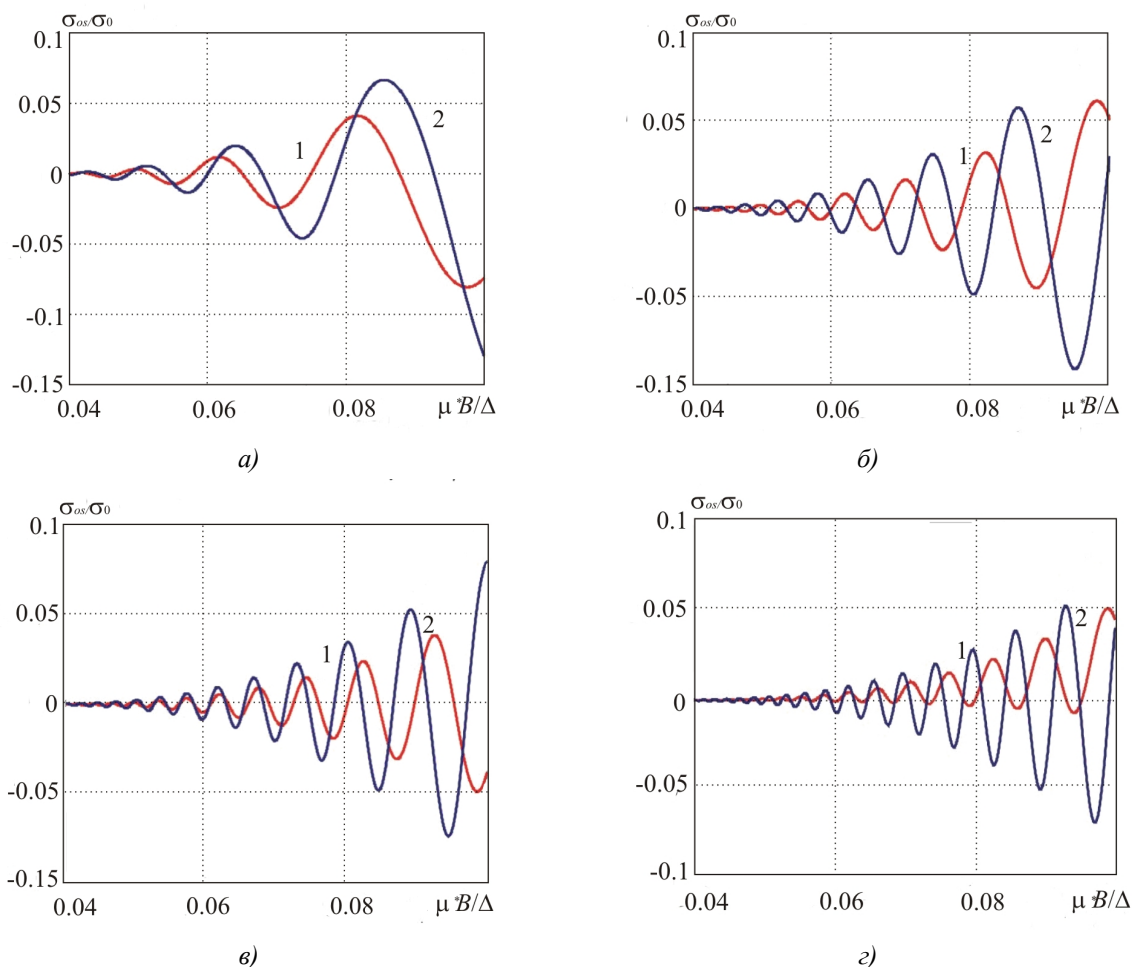


Рис. 1. Польова залежність осцилюючої частини електропровідності термоелектричного матеріалу із замкнутою поверхнею Фермі відповідно до точних формул при значенні ζ/Δ рівному: а)-0.5; б)-1; в)-1.5; з)-2. На кожному рисунку залежності 1 (червоні) побудовані в рамках моделі Фіваза, залежності 2 (сині) – у наближенні ефективної маси.

Для порівняння на рис. 2 наведена польова залежність осцилюючої частини поздовжньої електропровідності термоелектричного матеріалу в рамках теорії Ліфшиця-Косевича.

Для побудови графіків узяті такі зонні параметри кристала: $\Delta = 0.01$ еВ, $m^* = 0.01m_0$. Ці параметри відповідають досить сильній анізотропії кристала, оскільки, якщо прийняти $a = 3$ нм, то виходить, що відповідне відношення ефективних мас у напрямках перпендикулярно й паралельно шарам становить 85, хоча це далеко не межа для шаруватих функціональних матеріалів, у тому числі термоелектричних. Крім того прийнято, що $T = 3$ К і $T_D = 1.5$ К. При таких параметрах магнітні поля, зазначені на графіках, відповідають діапазону від 0.04 до 0.1 Тл. Також бралось до уваги, що за умови сталості концентрації носіїв заряду й абсолютному нулі температури хімічний потенціал ζ електронного газу в моделі Фіваза пов'язаний з хімічним потенціалом ζ_{em} у наближенні ефективної маси наступним співвідношенням:

$$(\zeta/\Delta - 1)\arccos(1 - \zeta/\Delta) + \sqrt{2\zeta/\Delta - (\zeta/\Delta)^2} = (2\zeta_{em}/\Delta)^{3/2}/3. \quad (18)$$

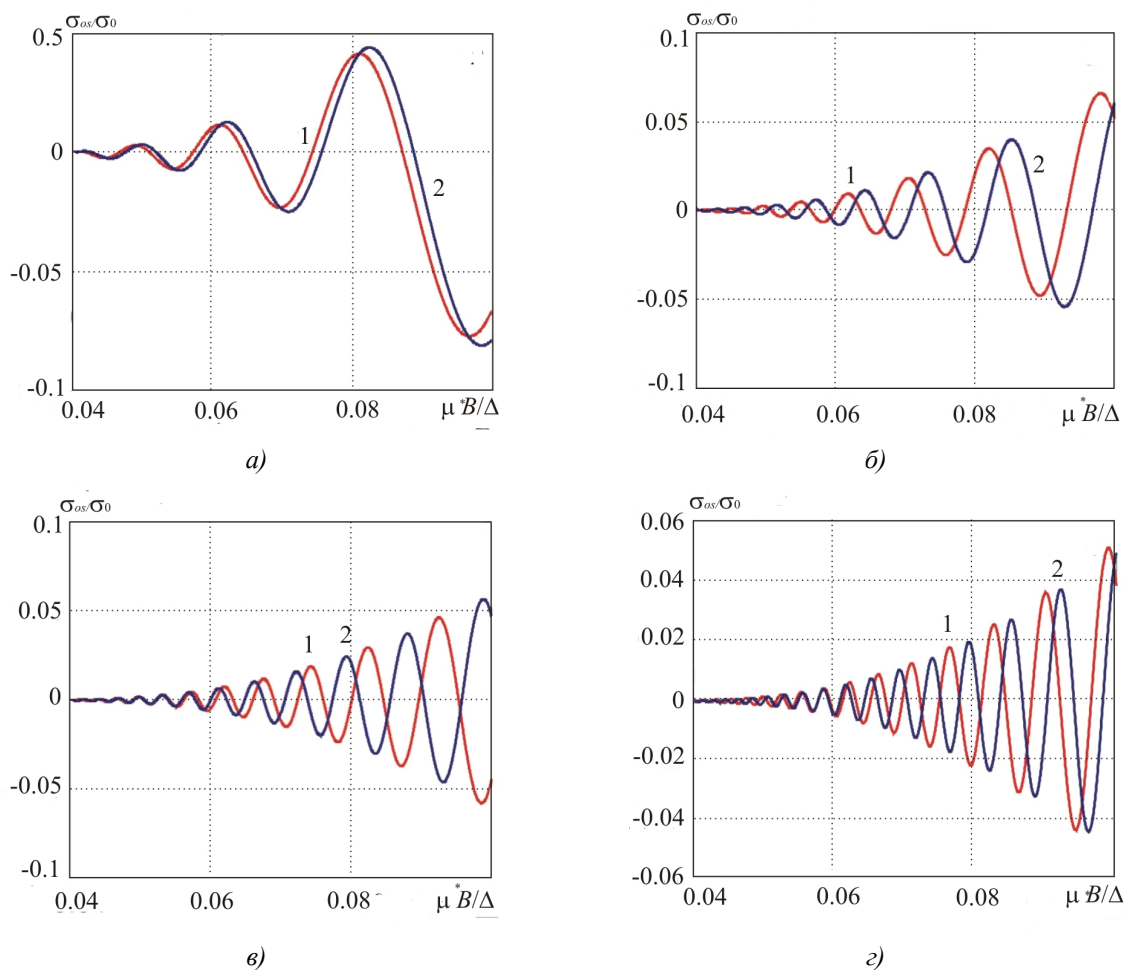


Рис. 2. Польова залежність осцилюючої частини електропровідності термоелектричного матеріалу із замкнутою поверхнею Фермі в рамках теорії Ліфшиця-Косевича при значенні ζ/Δ рівному:

а)-0.5; б)-1; в)-1.5; г)-2. На кожному рисунку залежності 1 (червоні) побудовані в рамках моделі Фіваза, залежності 2 (сині) – у наближенні ефективної маси.

З порівняння рисунків 1 і 2 видно, що при кожному значенні відношення ζ/Δ залежності 1 і 2 побудовані по точних формулах, відрізняються між собою значно сильніше, ніж ті ж залежності, побудовані в рамках теорії Ліфшиця-Косевича. Це має місце тому, що в рамках теорії Ліфшиця-Косевича враховується тільки непрямий вплив непараболічності, що описується моделлю Фіваза, на поздовжню електропровідність термоелектричного матеріалу. Цей вплив виявляється через величину енергії Фермі, тобто через частоту осциляцій Шубнікова де Гааза, і через фактор Дінгла, оскільки він залежить від густини станів на рівні Фермі, і за інших рівних умов він тим сильніше знижує амплітуду осциляцій, чим більша ця густина. Точні ж формули враховують не тільки непрямий, але й прямий вплив непараболічності на осциляції провідності через функції Бесселя. Моделні параметри не «прив'язувались» до якого-небудь конкретного матеріалу, але вони можуть бути близькими, наприклад, до параметрів наногетероструктур, що створюються на кремнії [9]. Крім того в точних формулах явно врахована кінцева довжина поверхні Фермі уздовж напрямку магнітного

поля. При обумовлених параметрах задачі відносний внесок осцилюючої частини електропровідності досягає 5-7%. Це суттєво більше, ніж у типових металах, де цей внесок рідко перевершує 0.1%. Остання обставина істотно спрощує процес дослідження зонної структури таких функціональних, у тому числі термоелектричних матеріалів.

Крім того, з рисунка 1 видно, що в міру зростання відношення ζ/Δ , тобто концентрації носіїв заряду, відмінність між залежностями, побудованими з врахуванням і без врахування непараболічності, що описується моделлю Фіваза, зростає. Найбільш сильна відмінність зазначених залежностей прослідковується при $\zeta/\Delta = 2$, тобто для «перехідної» поверхні Фермі. Це має місце тому, що зазначена поверхня не має дотичних площин, перпендикулярних напрямку магнітного поля, у той час як при будь-якому позитивному значенні $\zeta/\Delta < 2$ є дві такі площини, паралельні площині $k_z = 0$ й симетрично розташовані щодо неї.

На закінчення необхідно відзначити ряд додаткових обставин, що визначають справедливість і область застосовності результатів, отриманих у даній роботі. По-перше, результати даної роботи справедливі тоді, коли осцилююча частина електропровідності є малою величиною в порівнянні з постійною частиною. По-друге, у роботі [8], де осцилююча частина електропровідності розглядалася для випадку сильно відкритих поверхонь Фермі, відзначено, що в цьому випадку крім фазового зсуву, обумовленого співвідношеннями (17), існує додатковий зсув фаз осциляцій електропровідності порядку kT_D/Δ . Із проведеного автором роботи [8] порівняння його розрахунків з експериментом випливає, що цей зсув досить великий. Але тоді виходить, що проведений автором [8] розгляд в області, де внесок осцилюючої частини електропровідності малий, невірний, оскільки у випадку $kT_D/\Delta \geq 1$ довжина вільного пробігу електрона мала або, у всякому разі, недостатньо велика в порівнянні з відстанню між трансляційно еквівалентними шарами, і, отже, необхідно застосовувати інші підходи, наприклад, описані в роботах [7, 10]. Однак обговорення даного питання виходить за рамки цієї статті.

Висновки

1. В умовах осцилюючої залежності часу релаксації від магнітного поля непараболічність зонного спектра функціональних, у тому числі термоелектричних, матеріалів, що описується моделлю Фіваза, проявляє себе в запізнюванні осциляцій поздовжньої електропровідності по фазі й зменшенні їх амплітуди. Ці особливості проявляються при замкнених поверхнях Фермі.
2. Непараболічність зонного спектра проявляється тим рельєфніше, чим більша концентрація носіїв заряду. Особливості прояву непараболічності головним чином обумовлені корінними відмінностями між густинами електронних станів у моделі Фіваза й у наближенні ефективної маси.
3. Отримані в статті результати можна використовувати для діагностики зонної структури матеріалів, описуваних моделлю Фіваза, при замкнених поверхнях Фермі.

Автор висловлює подяку акад. Анатичуку Л.І. за схвалення теми досліджень, а також за корисне й конструктивне обговорення отриманих результатів, що сприяло поліпшенню якості статті.

Література

1. Влияние магнитного поля, упругого растяжения и размеров на термоэлектрические свойства нанонитей висмута / А.А. Николаева, Л.А. Конопко, Д.В. Гицу [и. др] // Термоэлектричество. – 2008. -№2. – С.21-37.
2. Николаева А.А Термоэлектрические свойства монокристаллических нитей *Bi-Sn* с различной кристаллографической ориентацией при упругих деформациях / А.А. Николаева, Л.А. Конопко, А.К. Цуркан, Т.Е. Хубер // Термоэлектричество. – 2009. -№3. – С.44-62.
3. Bodiul P., Gitsu D., Ivanov G., Nikolaeva A., Para G. Peculiarities of impurity states in bismuth and doping anomaly of some transport phenomena. // Thermoelectricity. – 1999. –No1. – P.13-21.
4. Шенберг Д. Магнитные осцилляции в металлах. / Д. Шенберг // – М.: Мир, 1986, 680с.
5. Fivaz R.F. Theory of layer structures. // J.Phys.Chem.Sol. – 1967. –Vol.28. – No5. – P.839-845.
6. Gorskyi P.V. Can layered structure effects be observed if Fermi surface is closed?//Ukr.Phys.J. – 2010. – Vol.55. -No12. – P.1296-1304.
7. Laikhtman B., Menashe D. Resistance magneto-oscillations of superlattices.// Phys.Rev.B. – 1995. – Vol.52. – No12. – P.8974-8979.
8. Grigoriev P.D. Theory of the Shubnikov-de Haas effect in quasi-two-dimensional metals. // Phys.Rev.B. – 2003. – Vol.67. – P.144401-1-144401-8.
9. Баграев Н.Т. Осцилляции Шубникова-де Гааза и де Гааза-ван Альфена в кремниевых наноструктурах. / Н.Т. Баграев, Е.С. Брилинская, Д.С. Гец [и. др] ФТП. – 2011. – Т.45. – Вып.11. – С.1503-1508.
10. Gvozdikov V. M. Incoherence, metal-to-insulator transition and magnetic quantum oscillations of interlayer resistance in an organic conductor. // Phys.Rev.B. – 2007. – Vol.76. – P.23125-1-23125-12.

Надійшла до редакції 10.06.2014