

**Горский П.В.**

Горский П.В.

Институт термоэлектричества НАН и МОН Украины,  
ул. Науки, 1, Черновцы, 58029, Украина**ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ, В ТОМ  
ЧИСЛЕ ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ, МАТЕРИАЛОВ,  
ОПИСЫВАЕМЫХ МОДЕЛЬЮ ФИВАЗА, В  
КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЙ ОБЛАСТИ МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ**

*Разработка, оптимизация и использование тех или иных функциональных, в том числе термоэлектрических, материалов для создания конкретных приборов, элементов и систем предполагает их достаточно точное описание, в том числе на основе определенных модельных представлений об их зонном спектре и механизмах рассеяния носителей заряда в них. В ряде случаев характер зонного спектра этих материалов прямо определяет область их применения. Действенным инструментом экспериментальной проверки, а зачастую и формирования, упомянутых модельных представлений является, например, исследование осцилляций Шубникова-де Гааза при различных ориентациях магнитного поля. Однако для традиционной квазиклассической теории, учитывающей лишь осцилляции времени релаксации, в рамках которой, как правило, производится обработка и интерпретация экспериментальных результатов, несущественны конкретный характер непараболичности зонного спектра носителей заряда и конечная протяженность поверхности Ферми вдоль направления магнитного поля. Это может приводить к неточностям в определении, например, концентрации носителей заряда, а также к противоречивости данных о зонном спектре материала, полученных различными методами. Поэтому в работе предложена усовершенствованная теория осцилляций Шубникова-де Гааза в функциональных, в том числе термоэлектрических, слоистых материалах, описываемых моделью Фиваза. Расчеты проведены в рамках применимости закона Ома для случая, когда электрическое и квантующее магнитные поля параллельны друг другу и перпендикулярны слоям. При этом учтены три фактора: осциллирующая зависимость времени релаксации от магнитного поля в области применимости квазиклассического приближения, непараболичность зонного спектра носителей заряда, описываемая моделью Фиваза, и конечная протяженность поверхности Ферми вдоль направления магнитного поля.*

**Ключевые слова:** эффект Шубникова-де Гааза, модель Фиваза, время релаксации, плотность состояний, квазиклассическое приближение.

*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.

## Введение

Эффект Шубникова-де Гааза является действенным инструментом изучения зонного спектра и механизмов рассеяния носителей заряда в функциональных материалах, в том числе термоэлектрических. Исследованиям термоэлектрических материалов в сильных магнитных полях, в том числе с использованием данного эффекта, посвящен ряд работ [1-3]. Исследование эффекта Шубникова-де-Гааза при различных ориентациях магнитного поля позволяет в рамках теории Лифшица-Косевича [4] восстановить форму поверхности Ферми, а также определить концентрацию и времена релаксации носителей заряда. Однако весьма часто в реальных кристаллах наблюдаются отклонения от теории Лифшица-Косевича, вследствие чего, например, концентрации носителей заряда, определенные из эффекта Шубникова-де Гааза и из эффекта Холла, могут значительно различаться между собой. Причинами такого расхождения, в частности, могут быть непараболичность зонного спектра носителей заряда и конечная протяженность поверхности Ферми вдоль направления магнитного поля, которые не учитываются традиционной теорией Лифшица-Косевича. Вследствие этого, например, при нулевой концентрации носителей заряда, эта теория, по крайней мере, формально, дает физически некорректный результат: поверхности Ферми нет, а осцилляции есть. Теория электропроводности кристаллов, описываемых моделью Фиваза [5], свободная от этих ограничений, построена в работе [6], в которой показано, что эффекты непараболичности могут быть хорошо выраженными и в случае замкнутых поверхностей Ферми. Однако в этой работе сделано существенное модельное предположение о том, что время релаксации продольного квазиимпульса зависит только от этого квазиимпульса и не осциллирует при изменении магнитного поля. В то же время из результатов работ [7, 8] следует, что в случае, когда в узкой мини-зоне, описывающей движение электронов перпендикулярно слоям, укладывается достаточно много уровней Ландау, решающий вклад в осцилляции электропроводности вносит именно зависимость времени релаксации от магнитного поля. Это время зависит уже не от продольного квазиимпульса в отдельности, а от энергии электрона в целом. В силу вышесказанного целью настоящей статьи является построение последовательной теории осцилляций Шубникова-де-Гааза с учетом всех трех факторов, а именно: осцилляций времени релаксации, непараболичности зонного спектра в рамках модели Фиваза и конечной протяженности поверхности Ферми вдоль направления магнитного поля.

## Вывод и анализ формулы для продольной электропроводности

При выводе формулы для продольной электропроводности будем следовать методике, описанной в работе [8], однако модифицируем эту методику с учетом замкнутости поверхности Ферми и ее конечной протяженности вдоль направления магнитного поля. Энергетический спектр носителей заряда в термоэлектрическом материале, описываемом моделью Фиваза, в квантующем магнитном поле, перпендикулярном слоям, определяется так:

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

В этой формуле  $n, k_z$  – соответственно номер уровня Ландау и составляющая квазиимпульса в направлении, перпендикулярном слоям;  $\mu^* = \mu_B m_0 / m^*$ ;  $\mu_B, m_0, m^*$  – соответственно магнетон Бора, масса свободного электрона и эффективная масса электрона в плоскости слоя;  $\Delta, a$  – соответственно полуширина мини-зоны в направлении, перпендикулярном слоям и расстояние между трансляционно эквивалентными слоями;  $B$  – индукция магнитного поля.

Время релаксации продольного квазиимпульса будем считать, как при традиционном подходе, обратно пропорциональным плотности электронных состояний в магнитном поле. Пользуясь формулой Пуассона и учитывая уширение уровней Ландау вследствие столкновений, зависящее от магнитного поля  $B$  и энергии электрона  $\varepsilon$ , время релаксации в случае энергетического спектра (1) можно записать так:

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

В этой формуле  $\tau_0, T_{D0}$  – соответственно время релаксации и температура Дингла для открытой поверхности Ферми в отсутствие магнитного поля;  $\kappa_\varepsilon = \arccos(1 - \varepsilon/\Delta)$  для замкнутых изоэнергетических поверхностей и  $\kappa_\varepsilon = \pi$  для открытых изоэнергетических поверхностей;  $C_0 = \kappa_\varepsilon, C_m = \sin m \kappa_\varepsilon / m, J_n(x)$  – функции Бесселя первого рода действительного аргумента. Поэтому для открытых поверхностей (2) переходит в формулу работы [8]. Кроме того формула (2), в отличие от формулы работы [8], явно учитывает и то обстоятельство, что при отсутствии поверхности Ферми осцилляции Шубникова-де Гааза отсутствуют.

Для вычисления электропроводности термоэлектрического материала нам понадобится еще сумма модулей продольных скоростей электронов по занятым подзонам Ландау. Согласно [8] с учетом (1) она сводится к вычислению интеграла вида:

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

Однако верхний предел интегрирования в данном интеграле некорректен. По аналогии с формулой (2) верхний предел интегрирования должен быть равен  $\varepsilon/\mu^* B$ . Такое утверждение верно потому, что согласно формуле суммирования Пуассона, переменная интегрирования  $x$  происходит от существенно положительной величины  $2n + 1$  в формуле (1). Указанное ограничение также явным образом учитывает отсутствие осцилляций Шубникова-де Гааза при

отсутствии поверхности Ферми [6]. Поэтому, в соответствии с методикой [8] с учетом (2), а также корректного верхнего предела в (3), формула для полной электропроводности термоэлектрического материала при низких температурах, в пренебрежении полевой и температурной зависимостями химического потенциала, приобретает следующий вид:

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

При этом:

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

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

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

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

В формулах (5) – (8)  $\zeta$  – химический потенциал газа носителей заряда в материале;  $\bar{C}_0 = \kappa_\zeta = \arccos(1 - \zeta/\Delta)$  для замкнутых поверхностей Ферми и  $\bar{C}_0 = \kappa_\zeta = \pi$  для открытых поверхностей Ферми;  $\bar{C}_m = \sin m\bar{C}_0/m$ ,  $\tilde{C}_m = \bar{C}_m/\bar{C}_0$ . Понижающие множители  $R_T$  и  $R_D$  имеют следующий вид:

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

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

Первый из них известным образом учитывает температурное «размытие» осцилляций, а второй связан с уширением уровней Ландау вследствие рассеяния электронов на ионах

примеси. Именно это рассеяние является доминирующим в области существования осцилляций Шубникова-де Гааза. Непараболичность зоны проводимости термоэлектрического материала в формулах (6) – (8) учитывается функциями Бесселя, а влияние конечности протяженности поверхности Ферми вдоль направления поля на осцилляции Шубникова-де Гааза – через модулирующие коэффициенты  $\bar{C}_m$  и  $\tilde{C}_m$ , обращающиеся соответственно в нуль и единицу при  $\zeta = 0$ , т.е. при исчезновении поверхности Ферми. Таким образом, если поверхность Ферми исчезает, то осцилляции Шубникова-де Гааза исчезают «в принципе», а не «по вероятности» и не «в среднем». В этом заключается одно из основных отличий предлагаемого подхода от традиционного.

Составляющие продольной электропроводности, входящие в формулу (4), могут быть проинтерпретированы следующим образом. Составляющая  $\sigma_0$  – это электропроводность термоэлектрического материала при низких температурах в отсутствие магнитного поля. Составляющая  $\sigma_1$  определяет обусловленный осцилляциями времени релаксации основной вклад в осцилляции Шубникова-де Гааза в области применимости квазиклассического приближения. Составляющая  $\sigma_2$  проявляет себя даже в отсутствие осцилляций времени релаксации. Она обусловлена собственно квантованием фазового пространства в магнитном поле и может стать доминирующей при возрастании индукции магнитного поля. В области же применимости квазиклассического приближения составляющая  $\sigma_2$  приводит лишь к сдвигу фазы и некоторой перенормировке амплитуды основных осцилляций, определяемых составляющей  $\sigma_1$ . Составляющая  $\sigma_3$  описывает так называемые «медленные» осцилляции [8], частота которых не зависит от сечений поверхности Ферми плоскостями, перпендикулярными магнитному полю. Вследствие этого «медленные» осцилляции не подвержены температурному «размытию», а затухают только в силу процессов рассеяния. Но эти осцилляции исчезают наравне с обычными «быстрыми» осцилляциями при исчезновении поверхности Ферми.

Анализ показывает, что в приближении эффективной массы остаются только составляющие  $\sigma_0$ ,  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$  и они, соответственно, равны:

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

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

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

В формулах (12) и (13)  $C(x)$  и  $S(x)$  – косинус- и синус-интегралы Френеля соответственно. Поскольку  $C(0) = S(0) = 0$ , то в данном случае также учтен факт исчезновения осцилляций при исчезновении поверхности Ферми. Переходу к традиционному квазиклассическому приближению в этих формулах соответствует условие  $\zeta / \mu^* B \gg 1$ . Тогда  $C(x) = S(x) \approx 0.5$  и мы получаем:

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

Формула (14) соответствует традиционной теории Лифшица-Косевича для поверхности Ферми с единственным экстремальным, а именно, максимальным, сечением плоскостью  $k_z = 0$ , перпендикулярной магнитному полю. Именно эта формула или ее модификации для случаев более сложных поверхностей Ферми со многими экстремальными сечениями плоскостями, перпендикулярными магнитному полю, как правило, используется при обработке экспериментальных данных по эффекту Шубникова-де Гааза в функциональных, в том числе термоэлектрических, материалах, в случае, когда электрическое и магнитное поля параллельны друг другу. Полностью аналогично формула для составляющей  $\sigma_2$  приобретает вид:

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

Из формул (14) и (15) видно, что в случае кристаллов, описываемых моделью Фиваза, условие применимости традиционного подхода, при котором пренебрегается составляющими  $\sigma_2$ , и  $\sigma_3$ , имеет вид  $\mu^* B / \Delta \ll 1$ . В этом случае, например, составляющая  $\sigma_2$  приблизительно в  $\Delta / \mu^* B$  раз меньше  $\sigma_1$ . Но в сильно анизотропных кристаллах отношение  $\mu^* B / \Delta$  не слишком мало или даже велико в сравнении с единицей, в силу чего составляющая  $\sigma_2$  не только не является пренебрежимо малой, но может стать доминирующей. В этом случае верна теория, развитая в работе [6].

Используя стандартные тригонометрические формулы, суммарную осциллирующую часть электропроводности для замкнутой поверхности Ферми в условиях применимости квазиклассического приближения можно записать в виде:

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

Параметры  $a$  и  $\phi$  описывают, соответственно, перенормировку амплитуды осцилляций и их сдвиг по фазе. Эти параметры определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} a &= 3\mu^* B / 2\pi\zeta, \\ \phi &= \arctga. \end{aligned} \quad (17)$$

Следовательно, в условиях применимости квазиклассического приближения, когда  $\mu^* B / \Delta \ll 1$ , перенормировка амплитуды и фазовый сдвиг осцилляций Шубникова-де Гааза в сравнении с традиционной теорией Лифшица-Косевича малы при условии, что для конкретной замкнутой поверхности Ферми отношение  $\zeta / \Delta$  не слишком мало в сравнении с единицей.

Из формулы (16) формально следует, что непараболичность, описываемая моделью Фиваза, никак не проявляет себя в осцилляциях Шубникова-де Гааза, если поверхности Ферми замкнуты. Однако в действительности это неверно. Дело в том, что при одной и той же концентрации носителей заряда и замкнутой поверхности Ферми энергия Ферми носителей заряда в термоэлектрическом материале, описываемом моделью Фиваза, несколько меньше, чем в приближении эффективной массы. Такое различие обусловлено тем, что при одной и той же энергии  $\varepsilon < 2\Delta$ , т.е. при условии замкнутости изоэнергетических поверхностей, плотность состояний в модели Фиваза больше, чем в приближении эффективной массы. Поэтому даже в квазиклассическом приближении, как это следует из формул (16) и (17), упомянутая непараболичность должна проявлять себя в уменьшении частоты осцилляций, их запаздывании по фазе и некотором изменении их относительного вклада. Непараболичность проявляется еще

более рельефно, если вместо квазиклассической формулы (16) пользоваться точными формулами (5) – (8) в рамках модели Фиваза и (11) – (13) в приближении эффективной массы. Это видно из рис.1, который показывает, что непараболичность, описываемая моделью Фиваза, приводит к запаздыванию осцилляций по фазе и достаточно ощутимому уменьшению их амплитуды. Это уменьшение, равно как и запаздывание по фазе, объясняется тем, что плотность состояний в модели Фиваза больше, и, следовательно, частота осцилляций и время релаксации меньше, чем в приближении эффективной массы.

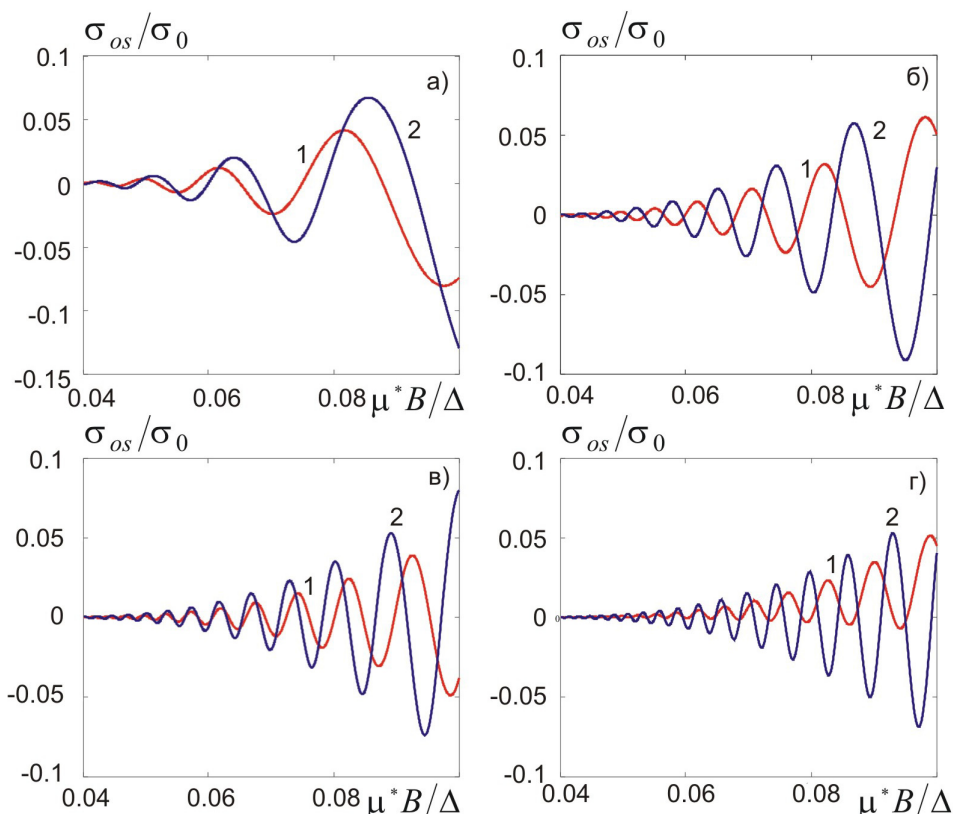


Рис. 1. Полевая зависимость осциллирующей части электропроводности термоэлектрического материала с замкнутой поверхностью Ферми в соответствии с точными формулами при значении  $\zeta/\Delta$  равном: а) – 0.5; б) – 1; в) – 1.5; г) – 2. На каждом рисунке кривые 1 (красные) построены в рамках модели Фиваза, кривые 2 (синие) – в приближении эффективной массы.

Для сравнения на рис. 2 приведена полевая зависимость осциллирующей части продольной электропроводности термоэлектрического материала в рамках теории Лифшица-Косевича.

Для построения графиков взяты такие зонные параметры кристалла:  $\Delta = 0.01$  эВ,  $m^* = 0.01 m_0$ . Эти параметры соответствуют весьма сильной анизотропии кристалла, поскольку, если принять  $a = 3$  нм, то получается, что соответствующее отношение эффективных масс в направлениях перпендикулярно и параллельно слоям составляет 85, хотя это далеко не предел для слоистых функциональных материалов, в том числе термоэлектрических. Модельные параметры не «привязывались» к какому-либо конкретному материалу, но они могут быть близки, например, к параметрам наногетероструктур, создаваемых на кремнии [9]. Кроме того принято, что  $T = 3$  К и  $T_D = 1.5$  К. При таких параметрах магнитные поля, указанные на графиках, соответствуют диапазону от 0.04 до 0.1 Тл. Также принималось во внимание, что при

условии постоянства концентрации носителей заряда и абсолютном нуле температуры химический потенциал  $\zeta$  электронного газа в модели Фиваза связан с химическим потенциалом  $\zeta_{em}$  в приближении эффективной массы следующим соотношением:

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

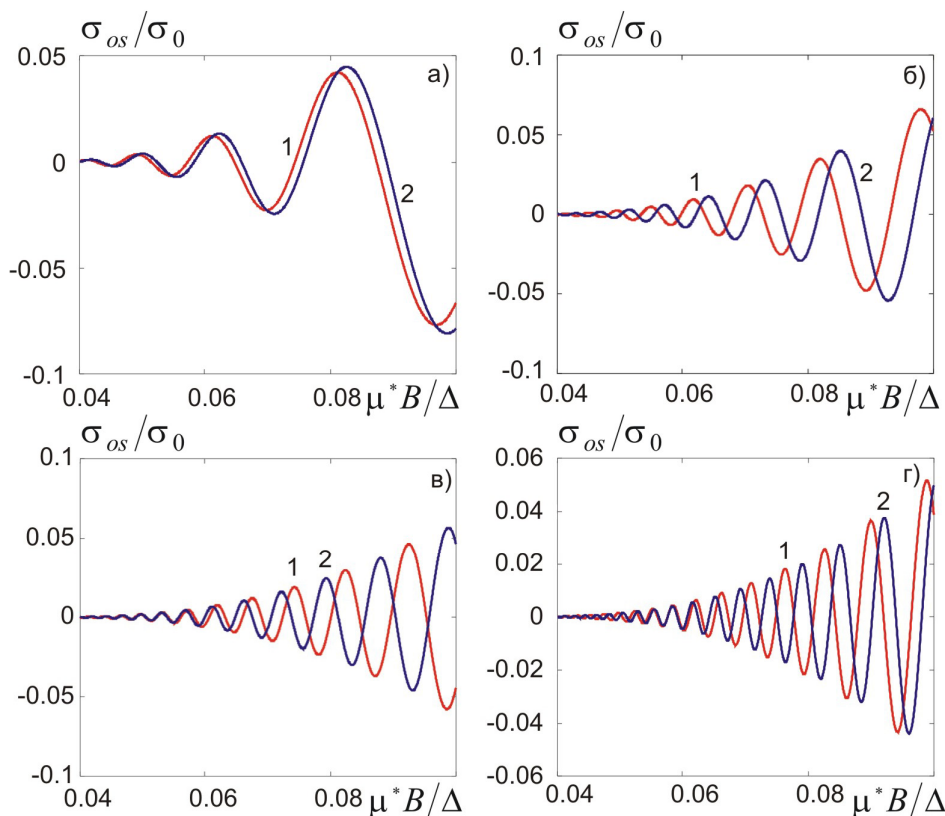


Рис. 2. Полевая зависимость осциллирующей части электропроводности термоэлектрического материала с замкнутой поверхностью Ферми в рамках теории Лифшица-Косевича при значениях  $\zeta/\Delta$  равном: а)  $0.5$ ; б)  $1$ ; в)  $1.5$ ; г)  $2$ . На каждом рисунке кривые 1 (красные) построены в рамках модели Фиваза, кривые 2 (синие) – в приближении эффективной массы.

Из сравнения рисунков 1 и 2 видно, что при каждом значении отношения  $\zeta/\Delta$  кривые 1 и 2, построенные по точным формулам, разнятся между собой значительно сильнее, чем те же кривые, построенные в рамках теории Лифшица-Косевича. Это объясняется тем, что в рамках теории Лифшица-Косевича учитывается только косвенное влияние непараболичности, описываемой моделью Фиваза, на продольную электропроводность термоэлектрического материала. Это влияние оказывается через величину энергии Ферми, т.е. через частоту осцилляций Шубникова-де Гааза и через фактор Дингла, поскольку он зависит от плотности состояний на уровне Ферми, и при прочих равных условиях он тем сильнее понижает амплитуду осцилляций, чем больше эта плотность. Точные же формулы учитывают не только косвенное, но и прямое влияние непараболичности на осцилляции проводимости через функции Бесселя. Кроме того, в точных формулах явно учтена конечная протяженность поверхности Ферми вдоль направления магнитного поля. При оговоренных параметрах задачи относительный вклад осциллирующей части электропроводности достигает  $5 - 7\%$ . Это



существенно больше, нежели в типичных металлах, где этот вклад редко превосходит 0.1 %. Последнее обстоятельство существенно упрощает процесс исследования зонной структуры таких функциональных, в том числе термоэлектрических материалов.

Кроме того, из рисунка 1 видно, что по мере роста отношения  $\zeta/\Delta$ , т.е. концентрации носителей заряда, различие между кривыми, построенными с учетом и без учета непараболичности, описываемой моделью Фиваза, возрастает. Наиболее сильное различие указанных кривых прослеживается при  $\zeta/\Delta = 2$ , т.е. для «переходной» поверхности Ферми. Это наблюдается потому, что указанная поверхность не имеет касательных плоскостей, перпендикулярных направлению магнитного поля, в то время как при любом положительном значении  $\zeta/\Delta < 2$  имеются две такие плоскости, параллельные плоскости  $k_z = 0$  и симметрично расположенные относительно нее.

В заключение необходимо отметить ряд дополнительных обстоятельств, определяющих справедливость и область применимости результатов, полученных в данной работе. Во-первых, они справедливы тогда, когда осциллирующая часть электропроводности является малой величиной по сравнению с постоянной частью. Во-вторых, в работе [8], где осциллирующая часть электропроводности рассматривалась для случая сильно открытых поверхностей Ферми, отмечено, что в этом случае помимо фазового сдвига, определяемого соотношениями (17), существует дополнительный сдвиг фаз осцилляций электропроводности порядка  $kT_D/\Delta$ . Из проведенного автором работы [8] сравнения его расчетов с экспериментом следует, что этот сдвиг достаточно велик. Но тогда получается, что проведенное автором [8] рассмотрение в области, где вклад осциллирующей части электропроводности мал, неверно, поскольку в случае  $kT_D/\Delta \geq 1$  длина свободного пробега электрона мала или, во всяком случае, недостаточно велика по сравнению с расстоянием между трансляционно эквивалентными слоями, и, следовательно, необходимо применять другие подходы, например, описанные в работах [7, 10]. Однако обсуждение данного вопроса выходит за рамки настоящей статьи.

## Выводы и рекомендации

1. В условиях осциллирующей зависимости времени релаксации от магнитного поля непараболичность зонного спектра функциональных, в том числе термоэлектрических, материалов, описываемая моделью Фиваза, проявляет себя в запаздывании осцилляций продольной электропроводности по фазе и уменьшении их амплитуды. Эти особенности проявляются при замкнутых поверхностях Ферми.
2. Непараболичность зонного спектра проявляется тем рельефнее, чем больше концентрация носителей заряда. Особенности проявления непараболичности главным образом обусловлены коренными отличиями между плотностями электронных состояний в модели Фиваза и в приближении эффективной массы.
3. Полученные в статье результаты можно использовать для диагностики зонной структуры материалов, описываемых моделью Фиваза, при замкнутых поверхностях Ферми.

Автор выражает благодарность акад. Анатычуку Л.И. за одобрение темы исследований, а также за полезное и конструктивное обсуждение полученных результатов, способствовавшее улучшению качества статьи.

## **Литература**

1. Николаева А.А. 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. – 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. 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.

Поступила в редакцию 10.06.2014.