

Влияние кулоновских корреляций в системе примесей с переменной валентностью и фононного увлечения на термоэлектрические коэффициенты в двумерных системах

© И.И. Ляпилин

Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук,
620219 Екатеринбург, Россия

(Поступила в Редакцию 14 июля 1997 г.
В окончательной редакции 30 сентября 1997 г.)

Теоретически изучено температурное поведение продольного коэффициента Нернста–Эттингаузена в двумерных системах при учете эффекта фононного увлечения и кулоновских корреляций в системе примесей со смешанной валентностью в области низких температур. Показано, что при переходе от эффектов увлечения к рассеянию на коррелированной системе примесных центров происходит смена знака эффекта. При рассеянии на хаотически расположенных примесных центрах смены знака не происходит. Такое температурное поведение коэффициента Нернста–Эттингаузена обусловлено радикальной перестройкой примесной системы вследствие сильных кулоновских корреляций, которые имеют место в системе примесей со смешанной валентностью. В результате характер рассеяния носителей заряда на коррелированной системе заряженных центров существенно меняется.

В работе [1] было показано, что как в пленках HgSe:Fe, так и в многослойных структурах HgSe–HgSe:Fe, выращенных с использованием молекулярно-лучевой эпитаксии, подвижность зонных носителей заряда возрастает при понижении температуры, увеличиваясь в несколько раз. Этот эффект, обнаруженный ранее при исследовании объемных кристаллов HgSe:Fe, обусловлен, как было показано в ряде работ [2–4], ослаблением рассеяния зонных носителей на совокупности заряженных центров при понижении температуры, если концентрация их такова, что имеет место стабилизация уровня Ферми на примесном уровне, расположенном в зоне проводимости. При этом примесные центры представляют собой систему, в которой кулоновское отталкивание между заряженными донорами приводит к сильным корреляциям в их пространственном расположении, в результате чего и происходит заметное ослабление рассеяния зонных носителей заряда на них.

Следует заметить, что "аномальные" зависимости (как температурные, так и концентрационные) были обнаружены и при исследовании кинетических коэффициентов, обусловленных наличием в исследуемых образцах температурных градиентов [4].

Представляет интерес изучить ТМК в двумерных системах, содержащих примеси со смешанной валентностью в области низких температур, где эффект, обусловленный пространственной корреляцией, в системе примесных центров будет наиболее заметен. При этом надо иметь в виду, что наряду с рассеянием $2d$ -электронов на примесных центрах поведение ТМК в области низких температур определяется и другими эффектами, например увлечением электронов фононами, вклад которого в проводимость пренебрежимо мал, но которое может оказаться доминирующим в поведении ТМК.

В настоящей работе мы рассмотрим продольный эффект Нернста–Эттингаузена (НЭ) в классически силь-

ном магнитном поле для двумерных носителей заряда в области низких температур. При этом наряду с рассеянием двумерных носителей заряда на коррелированной системе примесных центров учтем и эффект увлечения электронов фононами.

В качестве двумерной системы рассмотрим квантовую яму (КЯ) шириной W , которую для простоты будем считать бесконечно глубокой. В этом случае волновые функции двумерных электронов имеют обычный вид

$$\begin{aligned} \psi_\nu(R_j, z_j) &= \psi_{kL}(R_j, z_j) \\ &= \frac{1}{(L_x L_y)^{1/2}} \exp(ikR_j) \varphi_L(z_j). \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь $\varphi_L(z)$ — огибающая волновая функция,

$$\varphi_L(z_j) = \left(\frac{2}{W}\right)^{1/2} \sin\left(\frac{Lz}{W} + \frac{L\pi}{2}\right), \quad z \in \left[-\frac{W}{2}; \frac{W}{2}\right],$$

$$R = (x, y), \quad \nu = (k, L), \quad L = 1, 2, 3 \dots, \quad (2)$$

L характеризует номер размерно-квантованного уровня, который может быть реализован в КЯ.

Закон дисперсии $2d$ -электронов проводимости будем полагать квадратичным и изотропным

$$\varepsilon_\nu = \varepsilon_{kL} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E_L, \quad E_L = E_0 L^2, \quad E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m W^2}, \quad (3)$$

где E_L — энергия размерно-квантованного уровня, m — эффективная масса электрона. Заметим, что учет как конечной глубины КЯ, так и эффекта непараболичности зоны проводимости не приводит к качественным изменениям в расчете.

1. Расчет электронных составляющих термоэдс

Будем исходить из того, что продольный коэффициент НЭ $\Delta\alpha(H, T) = \alpha(H, T) - \alpha(0, T)$ при низких температурах определяется суммой электронной и фононной составляющих

$$\Delta\alpha(H, T) = \Delta\alpha_e(H, T) + \Delta\alpha_p(H, T), \quad (4)$$

где индексы e и p относятся к электронной и фононной составляющим кинетических коэффициентов.

В случае двумерного газа выражение для электронной составляющей можно легко получить, обобщая известные выражения для термогальваномагнитных коэффициентов в случае трехмерного электронного газа [5]

$$\begin{aligned} \alpha(0, T) &= C(1 + P), \\ \alpha(H, T) &= C \left(1 + \frac{P}{1 + \nu^2} \right), \quad \nu = \omega\tau, \\ P &= \varepsilon_F \left(\frac{dLn\tau}{d\varepsilon} \right)_{\varepsilon=\varepsilon_F}, \quad C = -\frac{\pi^2 k_0}{3|e|} \frac{k_0 T}{\varepsilon_F}. \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь k_0 — постоянная Больцмана, ω — циклотронная частота, e — заряд электрона, τ — полное время релаксации двумерных электронов, ε_F — энергия Ферми.

Примесную систему ионов железа $\text{Fe}(3+) - \text{Fe}(2+)$ в КЯ будем рассматривать как бинарный сплав, состоящий из заряженных $\text{Fe}(3+)$ и нейтральных $\text{Fe}(2+)$ центров. Далее мы ограничимся рассмотрением рассеяния электронов только на коррелированно расположенных парах ионов $\text{Fe}(3+) - \text{Fe}(3+)$, которое представляет наибольший интерес.

В борновском приближении по взаимодействию с рассеивателями время релаксации $2d$ -электронов представим в виде

$$\tau^{-1} = \frac{\hbar N_{\text{Fe}}}{mnkT} \sum_{q\nu\nu'} q_x^2 S(q) V_q^2 I_{\nu\nu'}^2 f(\varepsilon_\nu) [1 - f(\varepsilon_{\nu'})] \delta(\varepsilon_\nu - \varepsilon_{\nu'}),$$

$$I_{\nu\nu'} = \langle \nu' | e^{iqr} | \nu \rangle. \quad (6)$$

Здесь $V_q(z_i)$ — Фурье-образ потенциала ионизованной примеси, расположенной в точке z_i ,

$$V_q(z_i) = \frac{2\pi e^2}{\chi} \frac{F(q, z_i)}{q + q_s F(q)}, \quad (7)$$

χ — диэлектрическая постоянная среды (КЯ), $q_s^{-1} = r_s$ — радиус экранирования, n — концентрация $2d$ -электронов, $f(\varepsilon)$ — функция распределения Ферми. Далее, согласно [6], имеем

$$\begin{aligned} F(q, z_i) &= \int_0^w \varphi^*(z) e^{-q|z-z_i|} \varphi(z) dz, \\ F(q) &= \int_0^w \int_0^w |\varphi(z)|^2 e^{-q|z-z'|} |\varphi(z')|^2 dz dz'. \end{aligned} \quad (8)$$

В линейном приближении по x , рассмотрением которого мы ограничимся, для $F(q)$ имеем $F(q) \approx 1 + 5x/4\pi^2$, а $F(q, z_i) \approx 1$.

Степень пространственных корреляций в системе заряженных ионов железа определяется структурным фактором $S(q)$, который зависит от концентрации железа и температуры. Для хаотически распределенных примесных центров $S(q) = 1$.

Матричный элемент, входящий в выражение (7), можно переписать в виде [7]

$$\begin{aligned} \langle \nu' | e^{iqr} | \nu \rangle &= \langle k' | e^{iq_\perp r_\perp} | k \rangle \langle L' | e^{iq_z z} | L \rangle, \quad q_\perp = (q_x, q_y), \\ \sum_{q_z} |\langle L' | e^{iq_z z} | L \rangle|^2 &= \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi_L^4(z) dz = \frac{3}{2}. \end{aligned} \quad (9)$$

Проводя несложные вычисления для времени релаксации, получаем

$$\begin{aligned} \tau^{-1} &= \frac{16\pi N(\text{Fe}^{3+}) W \varepsilon_F}{\hbar k_F b^2} M_c, \\ M_c &= \int_0^1 dx \frac{x^2 S(2k_F x)}{\left(x^2 + \frac{Q_s}{2k_F}\right)^2 [1 - x^2]^{1/2}}, \\ Q_s &= \frac{q_s}{b}, \quad b = 1 + \frac{5q_s W}{4\pi^2}. \end{aligned} \quad (10)$$

Следует подчеркнуть, что специфика рассматриваемой нами КЯ такова, что рассеивающие центры находятся в КЯ; при этом среднее расстояние между ними много меньше ширины КЯ. Структурный фактор при этом выражается через парную корреляционную функцию $g(r)$ для ионов $\text{Fe}(3+)$ [3].

2. Вклад фононной компоненты

Обратимся теперь к вычислению компоненты, обусловленной эффектами увлечения, которую представим в виде [6]

$$\alpha_p = -\frac{k_0}{eU} \left(\langle \tau R \rangle \langle \tau A_p R \rangle + \langle \tau \nu R \rangle \langle \tau \nu A_p R \rangle \right),$$

$$U = \langle \tau R \rangle^2 + \langle \tau \nu R \rangle^2, \quad R = [m(1 + \nu^2)]^{-1}. \quad (11)$$

Здесь скобки $\langle A \rangle$ определены следующим образом:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{\pi n} \int_0^\infty k^2(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) A(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (12)$$

Для сильно вырожденного двумерного электронного газа выражение (12) можно представить в виде

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= A(\varepsilon_F) + \gamma \frac{\partial^2}{\partial \varepsilon^2} (k^2(\varepsilon) A(\varepsilon))_{\varepsilon=\varepsilon_F}, \\ \gamma &= \frac{\pi^2}{6} (k_0 T)^2 \frac{1}{\pi n}. \end{aligned} \quad (13)$$

Величина A_p определяет вклад фононного увлечения и будет определена далее.

Используя определение (12) и уравнение (13), выражение для фононной компоненты можно представить в виде

$$\alpha_p(H, T) = -\frac{k_0}{|e|} \left\{ A_p + \frac{\pi^2 (k_0 T)^2}{3 \varepsilon_F} \left(\frac{\partial A_p}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon=\varepsilon_F} \times \left[1 + \frac{P}{1+v^2} \right] \right\}. \quad (14)$$

Таким образом, окончательное выражение для продольного коэффициента НЭ, следующее из формул (5) и (14), можно представить в виде

$$\Delta\alpha(H, T) = -\frac{\pi^2 k_0^2 T}{3|e| \varepsilon_F} \frac{Pv^2}{1+v^2} \times \left[1 + \frac{k_0 T}{\varepsilon_F} \left(\frac{\partial A_p}{\partial \varepsilon} \right)_{\varepsilon=\varepsilon_F} \right]. \quad (15)$$

Обратимся теперь к нахождению фононного увлечения в случае двумерной системы. Будем считать, что частота фонон-фононных столкновений намного больше, чем частота столкновений фононов с носителями заряда. В этом случае релаксация фононов определяется в основном рассеянием фононов друг на друге, что позволяет ввести время релаксации длинноволновых акустических фононов $\tau_p(Q)$ (Q — волновой вектор фонона). В этом приближении неравновесная функция распределения фононов N_Q может быть найдена из самостоятельного уравнения для неравновесной фононной функции распределения. При этом статистическая сила увлечения, когда градиент температуры направлен вдоль оси x может быть представлена в стандартном виде

$$F_p = -A_p(\varepsilon) \nabla_x T, \quad (16)$$

где

$$A_p(\varepsilon) = \frac{2mv_p}{k_0} \sum_{k'Q} W(Q) \tau_p(Q) \frac{dN_Q^0}{dT} \times \left(1 - \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}'}{k^2} \right) \delta(\varepsilon_{k'} - \varepsilon_k) \delta_{k', k+Q_\perp}. \quad (17)$$

Здесь v_p — групповая скорость фононов, Q_\perp — волновой вектор фонона в плоскости xy , N_Q^0 — равновесная функция распределения фононов. Далее

$$W(Q) = \frac{\pi E_1^2 Q}{\rho v_p} J^2(q_z), \quad J^2(q_z) = \left| \int \varphi^2(z) \exp(iQ_z z) dz \right|^2. \quad (18)$$

Заметим, что квадрат матричного элемента, входящий в выражение (18), определяет фононный вклад в зависимости от параметров КЯ [8]. Для узких КЯ он равен единице для всех значений Q_z , а для широких КЯ —

$Z - \delta_{Q_z, 0}$. Для КЯ с бесконечно высокими стенками он равен

$$J^2(q_z) = \pi^2 \sin^2 u / [u^2(u^2 - \pi^2)^2], \quad u = q_z W / 2. \quad (19)$$

В качестве основного механизма релаксации длинноволновых фононов в области низких температур рассмотрим рассеяние фононов на границах образца

$$\tau_{pL}^{-1} = v_p / L, \quad (20)$$

где L — размер образца.

Переходя в (17) от суммирования к интегрированию, получаем

$$A_p = D \int dq_z Z \int (q^2 + q_z^2) q dq \int \frac{(-kq \cos \vartheta)}{\text{sh}^2(\gamma)} \times \delta\left(kq \cos \vartheta + \frac{q^2}{2}\right) d\vartheta, \quad \gamma = \hbar\omega_Q / 2k_0 T, \quad D = \frac{m^2 v_p^2 \pi E_1^2 \tau_p}{2\rho(k_0 T)^2 \hbar k^2 (2\pi)^3}. \quad (21)$$

После выполнения интегрирования по углу выражение (21) принимает следующий вид:

$$A_p = D \int dq_z Z \int_0^{2k} \frac{(q^2 + q_z^2) q^2}{\text{sh}^2(\gamma) [(2k)^2 - q^2]^{1/2}} dq. \quad (22)$$

Как видно из выражения (22), интеграл по q расходится на верхнем пределе при $q = 2k_F$. Эта расходимость может быть устранена, например, путем учета неупругих процессов рассеяния электронов.

Итак, для проведения численного расчета величины $\Delta\alpha(H, T)$ осталось найти производную по энергии от выражения, определяемого формулой (22). Выполняя несложные вычисления, получаем

$$A'_p(\varepsilon_F) = A_p(\varepsilon_F) \left[-\frac{1}{\varepsilon_F} + \frac{x_{2k_F}}{2\varepsilon_F} \frac{J_1 - J_2}{J} \right]. \quad (23)$$

Здесь

$$J = \int_0^{q_D^*} dy \int_0^{x_{2k_F}} \frac{F(x, y)}{(x_{2k_F}^2 - x^2)^{1/2}} dx, \quad J_1 = \int_0^{q_D^*} dy \frac{F(x_{2k_F}, y)}{\delta_{\min}},$$

$$J_2 = x_{2k_F} \int_0^{q_D^*} dy \int_0^{x_{2k_F}} \frac{F(x, y)}{(x_{2k_F}^2 - x^2)^{3/2}} dx,$$

$$x_{2k_F} = \frac{2\hbar v_p k_F}{k_0 T}, \quad q_D^* = \frac{\hbar v_p q_D}{k_0 T},$$

$$F(x, y) = \frac{x^2(x^2 + y^2) e^{(x^2 + y^2)^{1/2}}}{(e^{(x^2 + y^2)^{1/2}} - 1)^2},$$

q_D — волновой вектор Дебая, $\delta_{\min} \approx k_0 T$.

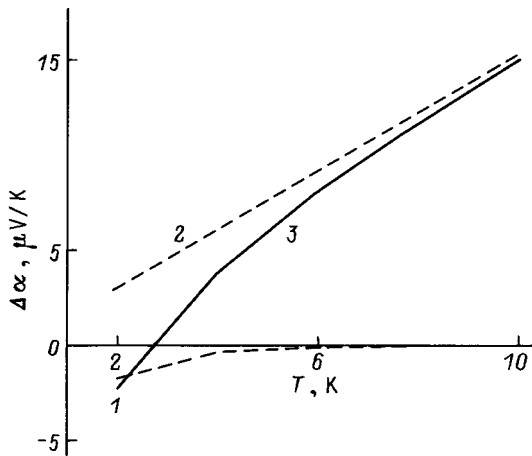


Рис. 1. Зависимость продольного коэффициента Нернста–Эттингаузена от температуры (приближение ”твердых сфер”). 1 — вклад от эффекта увлечения, 2 — вклад от рассеяния на примесной системе, 3 — результирующий вклад.

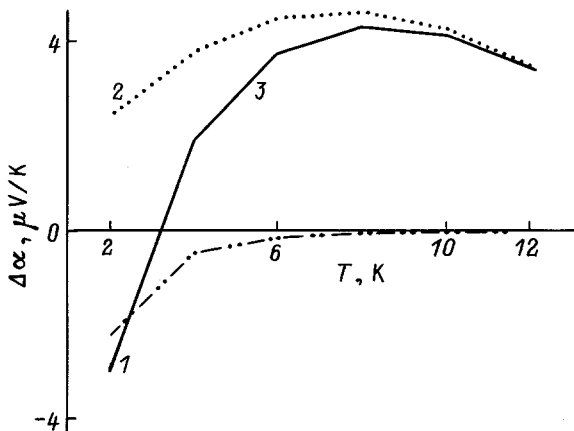


Рис. 2. Зависимость продольного коэффициента Нернста–Эттингаузена от температуры (приближение ”мягких сфер”). 1 — вклад от эффекта увлечения, 2 — вклад от рассеяния на примесной системе, 3 — результирующий вклад.

Выражения (15) и (23) позволяют численно рассчитать вклад фоновый увлечения в продольный эффект НЭ. Результаты расчета продольного коэффициента НЭ, выполненные при следующих параметрах: $W = 90 \text{ \AA}$ ($E_0 = 64 \text{ K}$), $H = 2 \text{ kOe}$, $v_p = 3 \cdot 10^5 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$, $m = 0.067m_0$ (m_0 — масса свободного электрона), $E_1 = 7 \text{ eV}$, представлены на рисунке. На рис. 1 представлена зависимость продольного коэффициента НЭ от температуры, рассчитанная в предположении, что кулоновские корреляции в системе со смешанной валентностью в области низких температур достигли своей предельной величины и степень упорядоченности в примесной системе, не изменяется с температурой (приближение ”жестких сфер”). Такая ситуация соответствует случаю, когда при понижении температуры подвижность электронов выходит на постоянное значение и не изменяется при

ее дальнейшем уменьшении. Как следует из численного расчета, в области низких температур ($T < 5 \text{ K}$) доминирует эффект увлечения, при этом знак коэффициента НЭ отрицателен. При температурах $T \sim 5\text{--}8 \text{ K}$ наблюдается смена знака эффекта. Рассеяние $2d$ -электронов при этом определяется в основном сильно коррелированной системой заряженных примесных центров. Рис. 2 представляет результаты расчета для случая, когда корреляции в примесной системе в рассматриваемом интервале температур изменяются с температурой. При рассмотрении этого случая необходимо принять во внимание изменение корреляций в системе заряженных центров с температурой (приближение ”мягких сфер” [3]). Как видно, и в этом случае имеет место смена знака эффекта. Однако при дальнейшем увеличении температуры имеет место убывание величины эффекта, что обусловлено ослаблением степени коррелированности в примесной системе — возрастанием хаоса в примесной системе.

Заметим, что при рассеянии на полностью хаотически распределенных примесных центрах знак эффекта остается отрицательным вплоть до температур $T \sim 30 \text{ K}$. Смена знака эффекта при этом происходит, когда доминирующим механизмом рассеяния носителей заряда станут акустические фононы.

Работа выполнена при финансовой поддержке ИНТАС (грант 93-3657).

Список литературы

- [1] T. Widmer, V. Shikora, G. Hendorfer, S. Luther, W. Jantsch, K. Lischka, M. von Ortenberg. *Mater. Sci. Forum* **182**, 395 (1995).
- [2] И.И. Кулеев, И.И. Ляпилин, И.М. Цидильковский. *ЖЭТФ* **102**, 5(11), 1652 (1992); *ЖЭТФ* **106**, 4(10), 1205 (1994).
- [3] I.G. Kuleev, I.I. Lyapilin, A.T. Lonchakov, I.M. Tsidilkovski. *Semicond. Sci. Technol.* **10**, 314 (1995); *ЖЭТФ* **103**, 4, 1447 (1993).
- [4] И.И. Кулеев, И.И. Ляпилин, И.М. Цидильковский. *ФТП* **28**, 6, 937 (1994).
- [5] Б.М. Аскеров. *Электронные явления в полупроводниках*. Наука, М. (1985). 317 с.
- [6] T. Ando, A.B. Fowler, F. Stern. *Rev. Mod. Phys.* **54**, 437 (1982).
- [7] A.K. Vijay, A.G. Fawry. *Phys. Rev.* **B23**, 5570 (1981).
- [8] D.G. Cantrell, P.N. Butcher. *J. Phys. C: Sol. Stat. Phys.* **20**, 1993 (1987).