

## Вклад неравновесных оптических фононов в эффекты Пельтье и Зеебека в полярных полупроводниках

© Ю.В. Иванов, В.К. Зайцев, М.И. Федоров

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук, 194021 Санкт-Петербург, Россия

(Поступила в Редакцию 19 сентября 1997 г.  
В окончательной редакции 6 января 1998 г.)

Рассчитаны аддитивные вклады в коэффициенты термоэдс и Пельтье, обусловленные неравновесностью продольных оптических фононов. Полученные результаты корректны для любых температур и применимы к полярным невырожденным полупроводникам с низкой концентрацией носителей заряда. Вычисленные составляющие термоэлектрических коэффициентов экспоненциально малы в области низких температур и достигают максимума при  $k_B T \sim \hbar \omega_0$ . В материалах с большой массой носителей заряда и сильным электрон-фононным взаимодействием вклад оптических фононов в коэффициент термоэдс может превышать 1 мВ/К.

В настоящее время достаточно хорошо исследованы как увлечение носителей заряда акустическими фононами, так и обратный процесс. При низких температурах именно эти явления часто определяют соответственно эффекты Зеебека и Пельтье. В полярных полупроводниках взаимодействие носителей заряда с упругими оптическими колебаниями значительно сильнее, чем с акустическими. Поэтому, несмотря на меньшую групповую скорость оптических фононов, учет их неравновесности необходим при рассмотрении явлений переноса в этих материалах.

Различные варианты увлечения квазичастиц с участием неравновесных оптических фононов исследовались в работах [1–5] (см. также ссылки в [2,3]). Из-за неупругости рассеяния электронов расчеты выполнялись в пределах низких и высоких температур, допускающих использование приближения времени релаксации. Однако вклад увлечения в явления переноса максимален при  $k_B T \sim \hbar \omega_0$  ( $\omega_0$  — предельная частота продольных оптических фононов). Только в этом случае число квазичастиц в фононной подсистеме достаточно велико, и отклонение от равновесности не слишком мало.

В данной работе в рамках простой модели, но для произвольной температуры рассчитаны добавки к коэффициентам Пельтье и Зеебека полярного полупроводника, обусловленные неравновесностью продольных оптических фононов. Для упрощения вычислений мы предположили, что из всех взаимодействий, в которых принимают участие оптические фононы, наиболее сильным является взаимодействие с акустическими колебаниями. Это приближение справедливо при малой концентрации носителей заряда.

### 1. Основные уравнения

Хорошо известно, что коэффициенты Зеебека  $S$  и Пельтье  $\Pi$  связаны соотношением Томпсона:  $\Pi = TS$ . Поэтому достаточно рассчитать один из них. Мы рассмотрим вклад неравновесных оптических фононов в эффект

Пельтье, так как ответственные за него изотермические процессы проще и нагляднее.

В расчете будем использовать изотропные параболические спектры носителей заряда и продольных оптических колебаний

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad \omega_{\mathbf{q}} = \omega_0 + aq^2. \quad (1)$$

Здесь  $m$  — эффективная масса носителей. Параметр  $a$  определяет дисперсию фононов.

Законы сохранения разрешают электрону с волновым вектором  $\mathbf{k}$  взаимодействовать с квазичастицей, у которой  $q \sim \max\{k, \kappa\}$ , где  $\kappa$  — абсцисса точки пересечения спектров (1). Поэтому в полупроводниках не слишком тяжелые носители увлекают лишь длинноволновые фононы. Для них слагаемое  $aq^2$  мало по сравнению с предельной частотой  $\omega_0$ . Однако пренебречь дисперсией нельзя<sup>1</sup>. В противном случае обратится в нуль групповая скорость оптических фононов, а вместе с ней и переносимый ими тепловой поток.

В линейном по параметру  $a$  приближении фононная добавка к коэффициенту Пельтье имеет вид

$$\Pi_p = \frac{w_p}{j} = \frac{\hbar \Delta \omega P_p}{e P_e}, \quad (2)$$

где  $w_p$  и  $j$  — плотности соответственно теплового потока, переносимого продольными оптическими фононами, и электрического тока,  $e$  — заряд носителей (для электронов  $e < 0$ ),  $P_p$  и  $P_e$  — полные квазиимпульсы фононной и электронной подсистем,

$$\Delta \omega = a\kappa^2, \quad \kappa^2 = \frac{2m\omega_0}{\hbar}. \quad (3)$$

Все перечисленные векторы параллельны электрическому полю, и лишь их модули использованы в скалярном коэффициенте (2).

<sup>1</sup> Мы не будем рассматривать акустооптическое увлечение [3], при котором оптические фононы лишь передают полученный от электронов квазиимпульс акустическим колебаниям и могут быть бездисперсионными.

В рассматриваемой задаче функция распределения продольных оптических фононов определяется неравновесными процессами в электронной подсистеме. Удобно исключить ее из рассмотрения. Для этого воспользуемся фононным уравнением Больцмана

$$0 = S_{pe} + S_{pa}, \quad (4)$$

где  $S_{pe}$  и  $S_{pa}$  — интегралы столкновений продольных оптических фононов соответственно с носителями заряда и акустическими колебаниями. Левая часть уравнения обращается в нуль из-за изотермичности эффекта Пельтье. Интеграл  $S_{pe}$  представим в виде суммы

$$S_{pe} = S_{pe}^p + S_{pe}^e, \quad (5)$$

где

$$S_{pe}^p = -\nu_{pe}(q)N_1(\mathbf{q}), \quad (6)$$

$$S_{pe}^e = w(q) \int n_1(\mathbf{k}) \left\{ [1 + N_0(\omega_0) - n_0(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})] \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \hbar\omega_0) - [N_0(\omega_0) + n_0(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \hbar\omega_0) \right\} \frac{2d^3k}{(2\pi)^3}, \quad (7)$$

$n_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})$  и  $N_0(\omega_0)$  — соответственно функции Ферми и Планка,  $n_1(\mathbf{k})$  и  $N_1(\mathbf{q})$  — линейные по электрическому полю анизотропные части функций распределения. Частота столкновений фононов с равновесными носителями заряда

$$\nu_{pe}(q) = w(q) \int [n_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}) - n_0(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})] \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \hbar\omega_0) \frac{2d^3k}{(2\pi)^3} \quad (8)$$

и функция

$$w(q) = 8\pi^2 \hbar \alpha \omega_0^2 \kappa^{-1} q^{-2}, \quad (9)$$

определяющая вероятность трехчастичных столкновений в полярных полупроводниках [6], зависят от безразмерной константы электрон-фононного взаимодействия  $\alpha$ . Каждое из слагаемых в линеаризованном интеграле столкновений (5) описывает процессы, в которых лишь одна из взаимодействующих подсистем является неравновесной. Верхний индекс указывает на эту подсистему.

Основным неэлектронным каналом релаксации неравновесных оптических колебаний, по-видимому, является распад на два акустических фонона [7–10]. При температурах  $k_B T \sim \hbar\omega_0$  акустическая подсистема близка к равновесной. Поэтому интеграл столкновений  $S_{pa}$  в (4) можно записать в приближении времени релаксации

$$S_{pa} = -\nu_{pa} N_1(\mathbf{q}). \quad (10)$$

Частота процессов распада длинноволновых квазичастиц  $\nu_{pa}$  имеет вид [7,9]

$$\nu_{pa} = \nu_{pa}^0 \left[ 1 + 2N_0 \left( \frac{\omega_0}{2} \right) \right]. \quad (11)$$

Ее температурная зависимость определяется в основном множителем в квадратных скобках. Кроме того, эта частота практически не зависит от волновых векторов квазичастиц [10]. Поэтому параметр  $\nu_{pa}^0$  можно считать константой.

Теперь легко выразить  $N_1(\mathbf{q})$  через  $n_1(\mathbf{k})$ . Подставляя (5), (6), (10) в (4), находим

$$N_1(\mathbf{q}) = \tau_p(q) S_{pe}^e, \quad (12)$$

где  $\tau_p(q) = (\nu_{pa} + \nu_{pe})^{-1}$ . Используя это равенство, преобразуем квазиимпульс  $P_p$  в исходной формуле (2) к виду

$$P_p = \hbar \int k_E f(k) n_1(\mathbf{k}) \frac{2d^3k}{(2\pi)^3}, \quad (13)$$

где

$$f(k) = 2^{-1} k^{-2} \int \tau_p(q) w(q) \left\{ (q^2 - \kappa^2) [N_0(\omega_0) + n_0(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \hbar\omega_0) + (q^2 + \kappa^2) \times [1 + N_0(\omega_0) - n_0(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})] \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \hbar\omega_0) \right\} \frac{d^3q}{(2\pi)^3}, \quad (14)$$

а  $k_E$  — проекция волнового вектора на направление электрического поля  $\mathbf{E}$ . Произведение  $\hbar \mathbf{k} f(k)$  можно рассматривать как средний вклад электрона с волновым вектором  $\mathbf{k}$  в полный квазиимпульс увлекаемых фононов. При малой концентрации носителей заряда

$$\nu_{pa} \gg \max(\nu_{pe}(q)), \quad (15)$$

и интеграл (14) берется в элементарных функциях (см. Приложение).

Трехкратные интегралы, определяющие квазиимпульсы  $P_p$  и  $P_e$ , легко свести к однократным, если разложить  $n_1(\mathbf{k})$  по сферическим гармоникам

$$n_1(\mathbf{k}) = \sum_{lm} n_{lm}(k) Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (16)$$

Полярный угол  $\vartheta$  отсчитывается от направления электрического поля. Учитывая, что  $f$  зависит только от модуля  $\mathbf{k}$ , а  $k_E \propto Y_{10}$ , вместо (13) получаем

$$P = \frac{\hbar}{\sqrt{12\pi^5}} \int_0^\infty k^3 F(k) n_{10}(k) dk, \quad (17)$$

где  $F(k) = f(k)$  для квазиимпульса  $P_p$  и  $F(k) = 1$  для  $P_e$ .

Чтобы вычислить коэффициент  $n_{10}(k)$  в разложении (16), воспользуемся электронным уравнением Больцмана, записанным в виде

$$n_1(\mathbf{k}) = n_1^0(\mathbf{k}) + \tau_{ed}(k) S_{ep}, \quad (18)$$

где

$$n_1^0(\mathbf{k}) = -\hbar \frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \mathbf{u} \mathbf{k}, \quad \mathbf{u} = \frac{e\tau_{ed}(k)}{m} \mathbf{E}. \quad (19)$$

Предполагается, что кроме взаимодействия носителей с оптическими фононами, описываемого интегралом столкновений  $S_{ep}$ , имеется дополнительный механизм рассеяния, для которого справедливо приближение времени релаксации. Условно назовем его взаимодействием электронов с "дефектами". Предположим также, что зависимость соответствующего этому процессу времени релаксации от  $k$  является степенной

$$\tau_{ed}(k) = \tau_{ed}^0 x^{2r}, \quad (20)$$

где  $x = k/\kappa$ . Например, при рассеянии на акустических фононах  $r = -1/2$ , при рассеянии на ионизированных примесях  $r = 3/2$ .

Интеграл столкновений  $S_{ep}$  опять удобно разбить на две части

$$S_{ep} = S_{ep}^e + S_{ep}^p. \quad (21)$$

Слагаемое  $S_{pe}^e$  зависит только от электронной функции распределения  $n_1(\mathbf{k})$  и описывает столкновения с равновесными фононами. Слагаемое  $S_{ep}^p$  учитывает неравновесность последних и ответственно за обратное увлечение носителей фононами. Очень трудно рассчитать вклад взаимного увлечения квазичастиц [3] в термоэлектрические эффекты. Мы рассмотрим полупроводник с малой концентрацией носителей заряда, удовлетворяющей неравенству (15). В этом предельном случае добавкой  $S_{ep}^p$  по сравнению с  $S_{ep}^e$  можно пренебречь.

Понять взаимосвязь неравенства (15) с малостью обратного увлечения несложно. В нормальных процессах рассеяния квазиимпульс сохраняется. Поэтому при любых функциях распределения скорость передачи квазиимпульса одной подсистемой с точностью до знака равна скорости приема его другой подсистемой. В рассматриваемом случае это утверждение сводится к равенствам

$$\left| \int \hbar \mathbf{k} S_{ep}^e \frac{2d^3k}{(2\pi)^3} \right| = \left| \int \hbar \mathbf{q} S_{pe}^e \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \right|, \quad (22)$$

$$\left| \int \hbar \mathbf{k} S_{ep}^p \frac{2d^3k}{(2\pi)^3} \right| = \left| \int \hbar \mathbf{q} S_{pe}^p \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \right|. \quad (23)$$

Если выполнено соотношение (15), а также уравнения (4), (6), (10), то правая часть (22) много больше правой части (23). Следовательно, также соотносятся и левые части равенств (22) и (23). Другими словами, в электронную подсистему возвращается лишь незначительная часть передаваемого фононом квазиимпульса. Остается заметить, что нигде ранее мы не фиксировали явный вид функций распределения. Используемые соотношения определяют только их связь. Поэтому интеграл в левой части (23) должен быть малым при любой определяющей его функции  $N_1(\mathbf{q})$ . Это возможно, если мало само подинтегральное выражение. Таким образом, почти во всех точках фазового пространства выполняется неравенство  $|S_{ep}^p| \ll |S_{ep}^e|$ .

Оставшееся в (21) слагаемое в принятом приближении имеет вид

$$S_{ep}^e = -\nu_{ep}(k)n_1(\mathbf{k}) + \int w(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \times \left\{ N_0 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} - \hbar\omega_0) + (N_0 + 1) \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'} + \hbar\omega_0) \right\} n_1(\mathbf{k}') \frac{d^3k'}{(2\pi)^3}, \quad (24)$$

где

$$\nu_{ep}(k) = 2\alpha\omega_0 x^{-1} \left\{ N_0 \ln(x + \sqrt{x^2 + 1}) + \Theta(x - 1) \times (N_0 + 1) \ln(x + \sqrt{x^2 - 1}) \right\}, \quad (25)$$

$N_0 \equiv N_0(\omega_0)$ , а функция  $\Theta(t)$  равна нулю при  $t < 0$  и единице при  $t \geq 0$ .

Чтобы вывести уравнение для коэффициента  $n_{10}(x)^2$ , умножим (18) на  $Y_{10}(\vartheta, \varphi)$  и проинтегрируем по углам, учитывая ортогональность сферических гармоник. В результате получим

$$b_1(x)n_{10}(\sqrt{x^2 - 1}) + b_2(x)n_{10}(x) + b_3(x)n_{10}(\sqrt{x^2 + 1}) = n_{10}^0(x), \quad (26)$$

где

$$b_1(x) = -\alpha\omega_0\tau_{ed}^0 N_0 \Theta(x - 1) x^{2r-1} \times \left\{ \frac{2x^2 - 1}{x\sqrt{x^2 - 1}} \ln(x + \sqrt{x^2 - 1}) - 1 \right\}, \quad (27)$$

$$b_2(x) = 1 + \tau_{ed}(x)\nu_{ep}(x), \quad (28)$$

$$b_3(x) = -\alpha\omega_0\tau_{ed}^0 (N_0 + 1) x^{2r-1} \times \left\{ \frac{2x^2 + 1}{x\sqrt{x^2 + 1}} \ln(x + \sqrt{x^2 + 1}) - 1 \right\}, \quad (29)$$

$$n_{10}^0(x) = C\tau_{ed}^0 x^{2r+1} \exp(-\eta x^2), \quad (30)$$

$\eta = \hbar\omega_0/k_B T$ , а  $C$  — некоторый независимый от  $x$  множитель, который сокращается при вычислении отношения  $P_p/P_e$ .

Будем рассматривать переменную  $x$  как фиксированный параметр. Тогда коэффициенту  $n_{10}(x)$  соответствует носитель с энергией  $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \hbar\omega_0 x^2$ , а линейное уравнение (26) связывает искомый коэффициент с двумя другими, соответствующими энергиям  $\hbar\omega_0(x^2 \pm 1)$ . Именно на эти уровни происходит переход носителя при взаимодействии с оптическим фононом. Уравнение (26) справедливо для произвольного  $x$ . Поэтому можно рассмотреть совокупность эквидистантных энергетических уровней  $\hbar\omega_0(x^2 + i)$  и для каждого из них записать соотношение

<sup>2</sup> Вместо  $n_{10}(x)$  следовало написать  $n'_{10}(x) \equiv n_{10}(\kappa x)$ . Мы опустили штрих в надежде, что это не вызовет путаницы в дальнейшем.

типа (26). В результате получается бесконечная система линейных уравнений

$$\sum_{j=0}^{\infty} c_{ij} n_{10}(\sqrt{x^2 + j}) = n_{10}^0(\sqrt{x^2 + i}),$$

$$i = 0, 1, 2, \dots, \quad (31)$$

у которой отличны от нуля только следующие коэффициенты:

$$c_{i,i-1} = b_1(\sqrt{x^2 + i}), \quad c_{i,i} = b_2(\sqrt{x^2 + i}),$$

$$c_{i,i+1} = b_3(\sqrt{x^2 + i}). \quad (32)$$

В приведенном виде система справедлива для  $x < 1$ . Это не уменьшает общности подхода, так как ее решением является набор зависимостей  $n_{10}(\sqrt{x^2 + i})$ , области определения которых перекрывают весь диапазон изменения энергии носителя.

Функция распределения экспоненциально убывает с ростом энергии, поэтому практически всегда можно оборвать систему (31) на  $l$ -м уравнении, заменив в нем  $n_{10}(\sqrt{x^2 + l + 1})$  на  $n_{10}^0(\sqrt{x^2 + l + 1})$  или вообще отбросив содержащее эту функцию слагаемое. Число оставляемых уравнений зависит от температуры. Например, при  $\eta \gg 1$  вполне можно ограничиться двумя или тремя уравнениями. В этом случае легко может быть найдено аналитическое решение системы.

## 2. Термоэдс увлечения

До сих пор речь шла о вычислении коэффициента Пельтье (2). На практике чаще используют коэффициент термоэдс. Чтобы определить вклад неравновесных оптических фононов в эффект Зеебека, достаточно разделить (2) на температуру. Учитывая при этом явный вид функции  $f(k)$  в приближении малой концентрации носителей заряда (П1), получаем

$$S_p = \frac{k_B \alpha \Delta \omega}{e \nu_{pa}^0} D(\eta; r, s), \quad (33)$$

где

$$D(\eta; r, s) = \eta \frac{P'_p}{P_e}, \quad (34)$$

$s = \alpha \omega_0 \tau_{ed}^0$ , а  $P'_p$  отличается от  $P_p$  отсутствием множителя  $\alpha \omega_0 / \nu_{pa}^0$  в  $f(k)$ . Функция (34) всегда положительна. Поэтому знак термоэдс зависит от знака параметра  $a$  в спектре фононов и типа носителей. Если  $a > 0$ , то знак  $S_p$  совпадает со знаком диффузионной термоэдс.

Безразмерный параметр  $s$  определяет относительную роль взаимодействий носителя с оптическими фононами и "дефектами". Представляют интерес два предельных случая: 1)  $s \rightarrow 0$ , 2)  $s \rightarrow \infty$ .

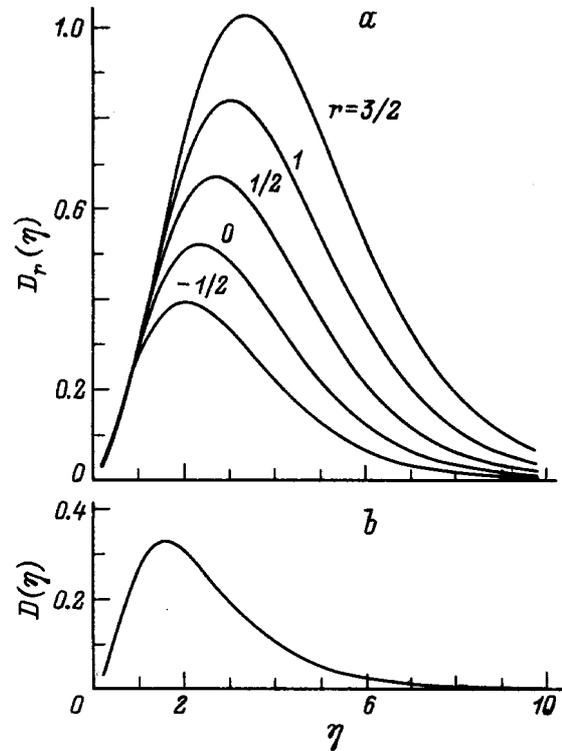


Рис. 1. Зависимости  $D_r(\eta)$  при различных значениях  $r$  (а) и  $D(\eta)$  (б).

В первом случае  $\tau_{ed}^0 \ll (\alpha \omega_0)^{-1}$ ; следовательно, при вычислении функции  $D$  электрон-фононным взаимодействием можно пренебречь. При этом матрица  $c_{ij}$  в (31) оказывается единичной

$$n_{10}(x) = n_{10}^0(x), \quad (35)$$

и расчет зависимости  $D(\eta; r, 0) \equiv D_r(\eta)$  сильно упрощается. В ряде случаев удается выразить  $D_r(\eta)$  через модифицированные функции Бесселя (см. Приложение). Семейство кривых  $D_r(\eta)$  представлено на рис. 1, а.

Во втором случае  $\tau_{ed}^0 \gg (\alpha \omega_0)^{-1}$ , поэтому только электрон-фононное взаимодействие обеспечивает релаксацию квазиимпульса носителей. В диагональных элементах матрицы  $c_{ij}$  можно опустить аддитивные единицы, а затем разделить все уравнения системы (31) на  $\alpha \omega_0 \tau_{ed}(\sqrt{x^2 + i})$ . В результате этой процедуры из уравнений исключаются множители, содержащие  $\tau_{ed}$ , а решение оказывается пропорциональным  $(\alpha \omega_0)^{-1}$ . Последняя комбинация параметров не влияет на отношение  $P'_p / P_e$ . Из аргументов зависимости  $D(\eta; r, \infty) \equiv D(\eta)$  сохраняется только обратная приведенная температура  $\eta$ . Функция  $D(\eta)$  представлена на рис. 1, б.

Температурная зависимость коэффициента термоэдс (33) определяется в основном функцией  $D$ . Та или иная кривая представленного на рис. 1 семейства выбирается в соответствии с механизмом релаксации электронной подсистемы. Величина  $S_p$  определяется множителем  $k_B \alpha \Delta \omega / e \nu_{pa}^0$ . Максимумы приведенных на рис. 1 кривых

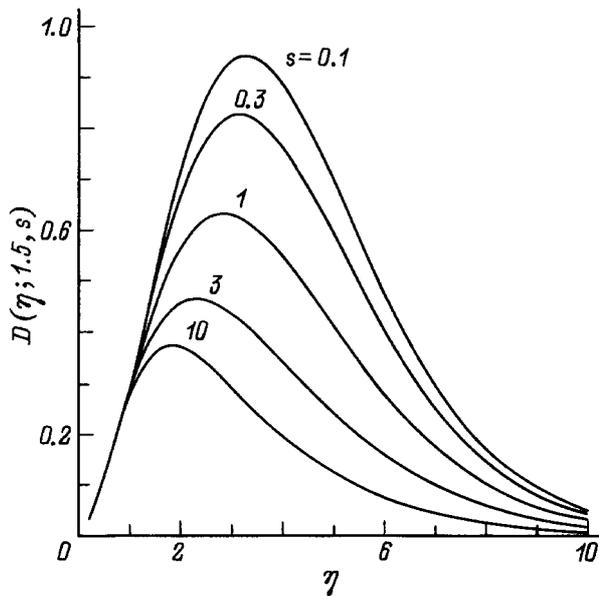


Рис. 2. Функция  $D(\eta; r, s)$  для различных значений  $s$  при фиксированном  $r = 3/2$ .

принимают значения порядка единицы. Поэтому указанный множитель позволяет быстро оценить величину фононного вклада в коэффициент термоэдс.

В общем случае по мере увеличения  $s$  происходит постепенная трансформация кривых  $D_r(\eta)$  в  $D(\eta)$ . Семейство таких промежуточных зависимостей для  $r = 3/2$  представлено в качестве примера на рис. 2. Каждой из них соответствует фиксированное значение  $s$ . Для некоторых релаксационных процессов этот параметр сам может быть функцией  $\eta$ .

Из приведенных рисунков видно, что температурная зависимость  $S_p$ , как и в случае увлечения носителей акустическими фононами, имеет ярко выраженный максимум. Для высокотемпературной области характерно степенное убывание  $S_p$  и  $\Pi_p$  с ростом температуры (см. (П5)). Особенно медленно изменяется коэффициент Пельтье. Уменьшение времени релаксации фононов частично компенсируется увеличением их количества.

В области низких температур в отличие от случая увлечения акустическими фононами наблюдается экспоненциальное изменение зависимостей  $S_p(\eta)$  и  $\Pi_p(\eta)$  (см. (П4)). Причина проста: носители пассивной области ( $\epsilon_k < \hbar\omega_0$ ) могут передавать свой импульс (имеется в виду эффект Пельтье), лишь рассеиваясь на уже существующих оптических фононах, число которых при  $\eta \gg 1$  экспоненциально мало. Вероятность процессов испускания фононов электронами активной области ( $\epsilon_k \geq \hbar\omega_0$ ) при  $\eta \gg 1$  практически не зависит от наличия упругих возбуждений. Однако число носителей с такой энергией также экспоненциально мало.

Несколько неожиданным выглядит уменьшение функции  $D$  при увеличении роли электрон-фононного взаимодействия (рис. 2). Аналогичное смещение кривых

$D_r(\eta)$  вниз наблюдается при уменьшении параметра  $r$  (рис. 1, а). У этих двух особенностей общая причина. В Приложении показано, что при доминирующей роли нефононного рассеяния носителей даже при низких температурах основной вклад в эффект Пельтье вносят электроны активной области. Уменьшение  $r$  приводит к уменьшению времени релаксации этих носителей, функции  $n_1(\mathbf{k})$  в указанной области энергий, а следовательно, и суммарного квазиимпульса фононов, определяющего зависимость (34). Точно так же включение электрон-фононного взаимодействия проявляется в резком уменьшении неравновесности носителей с  $\epsilon_k \geq \hbar\omega_0$  за счет процессов рождения оптических фононов.

### 3. Границы применимости расчета

Наиболее существенным ограничением общности приведенных вычислений является предположение о малой концентрации носителей заряда. Более конкретно: мы использовали в расчете соотношение (15), предположили невырожденность носителей, не учитывали в (9) экранировку электронами поляризационных полей.

Рассмотрим ограничение (15). При отсутствии вырождения интеграл в (8) легко берется. При этом получаем

$$\nu_{pe}(q) = 2\alpha\omega_0 e^\mu \eta^{-1} \text{sh}\left(\frac{\eta}{2}\right) y^{-3} \times \exp\left\{-\frac{\eta}{4}(y^2 + y^{-2})\right\}, \quad (36)$$

где  $\mu$  — химический потенциал в единицах  $k_B T$ ,  $y = q/\kappa$ . После подстановки этой зависимости неравенство (15) принимает вид

$$\nu_{pa}^0 \gg \alpha\omega_0 e^\mu \eta^{-1} g(\eta), \quad (37)$$

где  $g(\eta)$  — некоторая функция, близкая к единице в интересующем нас интервале температур. Для типичных значений  $\nu_{pa}^0 \sim 10^{-3}\omega_0$  [7–10],  $\alpha \sim 0.1$  и  $\eta < 10$  необходимым условием выполнения соотношения (37) является невырожденность носителей ( $e^\mu \ll 1$ ).

Обычно удобнее пользоваться не химпотенциалом, а концентрацией носителей  $n$ . Выражая  $e^\mu$  через эту концентрацию [6] и опуская  $g(\eta)$ , получим вместо (37)

$$n \ll \nu_{pa}^0 \kappa^3 / 4\pi^{3/2} \alpha\omega_0 \eta^{1/2}. \quad (38)$$

Если использовать приведенные выше значения параметров, то неравенство (38) примет совсем простой вид  $n \ll 10^{-3}\kappa^3$ . Величина  $\kappa^3$  может изменяться в широких пределах, и ее вычисление требует ”привязки” к конкретному материалу.

Исследовать условия применимости формулы (9) к процессам, в которых участвуют длинноволновые квазичастицы с  $q \sim k \sim \kappa$ , очень трудно. Грубые оценки можно выполнить с помощью теории [11], разработанной для коротковолновых фононов. При этом оказывается, что для концентраций, удовлетворяющих соотношению (38), экранировкой поляризационных полей можно

пренебречь. Таким образом, именно неравенство (38) определяет интервал концентраций носителей, в котором полученные нами результаты корректны.

В расчете использованы еще два связанных друг с другом упрощающих предположения

$$\kappa \ll \frac{b}{2}, \quad \frac{\Delta\omega}{\omega_0} \ll 1. \quad (39)$$

Здесь  $b$  — длина наименьшего вектора обратной решетки. Произведение  $\hbar\kappa$  определяет характерный квазиимпульс взаимодействующих с носителями фононов. Поэтому первое неравенство позволило ограничиться параболическим спектром упругих возбуждений (1). Благодаря второму соотношению мы оставили в (2) лишь линейное по  $\Delta\omega$  слагаемое. Однако, как уже отмечалось, вычисленные коэффициенты  $P_p$  и  $S_p$  экспоненциально малы в области низких температур. Поэтому при  $\eta \gg 1$  могут оказаться существенными и даже определяющими неучтенные слагаемые более высокого порядка.

Неравенства (39) нарушаются в материалах с очень большими эффективными массами носителей заряда. Это непосредственно следует из определений (3). Кроме того, использованный формализм уравнений Больцмана неприменим к полупроводникам с сильным электрон-фононным взаимодействием. При  $\alpha \sim 1$  квантовая неопределенность энергии электрона сравнима с характерным для рассматриваемой задачи масштабом  $\hbar\omega_0$ .

Вместе с тем именно в материалах с достаточно большими  $a$ ,  $m$  и  $\alpha$  фононные вклады в термоэлектрические коэффициенты могут стать определяющими. При  $\Delta\omega \approx 0.1\omega_0$  и  $\alpha \approx 0.5$  формулу (33), по-видимому, допустимо использовать для грубых оценок. В этом случае максимальное значение  $S_p$  оказывается  $\sim 3$  мВ/К. Для сравнения электронный вклад [6] в коэффициент термоэдс при  $\mu \approx -8$  (выбранное значение химпотенциала удовлетворяет условию (37)) не превышает 1 мВ/К.

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 95-02-04103-а).

### Приложение. Функции $f(k)$ и $D_r(\eta)$

Если выполнено неравенство (15), то  $\tau_p$  в (14) определяется только частотой  $\nu_{pa}$  и не зависит от  $q$ . Кроме того, в этом случае отсутствует вырождение носителей, поэтому в (14) можно опустить  $n_0(\epsilon_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q}})$ . В этих приближениях интегрирование легко выполняется, и функция  $f(k)$  принимает вид

$$f(k) = \alpha\omega_0\nu_{pa}^{-1}x^{-3} \left\{ N_0 \left[ x\sqrt{x^2+1} - \ln(x + \sqrt{x^2+1}) \right] + \Theta(x-1)(N_0+1) \left[ x\sqrt{x^2-1} + \ln(x + \sqrt{x^2-1}) \right] \right\} \quad (П1)$$

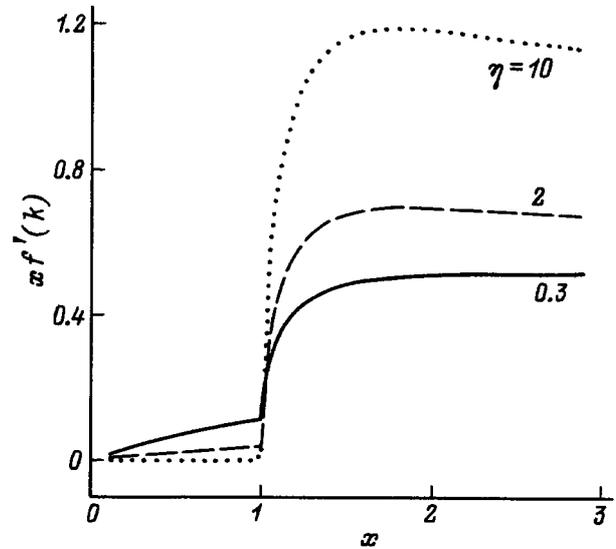


Рис. 3. Приведенный вклад электрона в квазиимпульс фононов как функция приведенного волнового числа этого носителя для различных значений  $\eta$ .

Первое слагаемое в фигурных скобках обусловлено процессами рассеяния носителей на продольных оптических фононах, второе — рождением последних электронами активной области.

Выше отмечалось, что  $\hbar\mathbf{k}f(k)$  есть средний вклад электрона с волновым вектором  $\mathbf{k}$  в квазиимпульс увлекаемых фононов. На рис. 3 представлено семейство зависимостей  $x f'(k)$ . Функция  $f'(k)$  отличается от  $f(k)$  отсутствием множителя  $\alpha\omega_0/\nu_{pa}^0$ . Видно, что каждый носитель активной области увлекает фононы гораздо эффективнее, чем носитель пассивной области.

Если в электронной подсистеме доминирует нефононное рассеяние ( $s \rightarrow 0$ ), отношение  $P'_p/P_e$  легко вычисляется. Используя (17), (30), (35) и (П1), запишем функцию (34) в виде

$$D_r(\eta) = \frac{\eta^{r+7/2} I_r(\eta)}{16\Gamma(r+5/2)\text{ch}^2(\eta/4)}, \quad (П2)$$

где

$$I_r(\eta) = \int_0^\infty dz \text{sh } z \exp\left(-\frac{\eta}{2} \text{ch } z\right) \left\{ \text{sh}^{2r}\left(\frac{z}{2}\right) \times (\text{sh } z - z) + \text{ch}^{2r}\left(\frac{z}{2}\right) (\text{sh } z + z) \right\}, \quad (П3)$$

а  $\Gamma(t)$  — гамма-функция. Два слагаемых в фигурных скобках в (П3) обязаны своим появлением соответствующим слагаемым в (П1). При низкой температуре ( $\eta > 2$ ) подынтегральное выражение в (П3) заметно отлично от нуля в области  $z < 1$ . Разлагая гиперболические функции в ряды, легко убедиться, что при  $r > -1$  второе слагаемое больше первого. Поэтому процессы рождения фононов вносят основной вклад в эффект

Пельтье, несмотря на экспоненциально малое количество электронов или дырок в активной области. При высокой температуре вклады обоих слагаемых имеют одинаковый порядок величины, однако в активной области оказывается подавляющая часть носителей заряда. Следовательно, при любых температурах именно эти носители определяют по крайней мере эффект Пельтье (процессы, ответственные за эффект Зеебека, в данной работе не рассматривались).

Полезно выяснить асимптотическое поведение функции  $D_r(\eta)$ . При  $\eta \gg 2$

$$D_r(\eta) \rightarrow \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma(r+5/2)} \eta^{r+2} e^{-\eta}, \quad (\text{П4})$$

при  $\eta \ll 2$

$$D_r(\eta) \rightarrow \frac{\Gamma(r+2)}{2\Gamma(r+5/2)} \eta^{3/2}. \quad (\text{П5})$$

Из последней формулы, в частности, следует очень медленное убывание коэффициента Пельтье с ростом температуры ( $\Pi_p \propto \eta^{1/2}$ ).

Если параметр рассеяния  $r$  — положительное целое число, то интеграл (П3) выражается через модифицированные функции Бесселя. Например,

$$I_0(\eta) = \frac{4}{\eta} K_1\left(\frac{\eta}{2}\right), \quad (\text{П6})$$

$$I_1(\eta) = \frac{4}{\eta} \left[ K_0\left(\frac{\eta}{2}\right) + \frac{2}{\eta} K_1\left(\frac{\eta}{2}\right) \right]. \quad (\text{П7})$$

В общем случае расчет зависимости  $D_r(\eta)$  может быть выполнен численными методами.

## Список литературы

- [1] C.N. Plavitu. Phys. Stat. Sol. **12**, 1, 256 (1965).
- [2] S. Kubalkova, A. Sakalas. Phys. Stat. Sol. (b) **50**, 1, 119 (1972).
- [3] Yu.G. Gurevich, O.L. Mashkevich. Phys. Rep. **181**, 6, 327 (1989).
- [4] V.K. Zaitsev, S.A. Ktitorov, A.E. Kaliazin, M.I. Fedorov. Proc. 14th Int. Conf. on Thermoelectrics. St. Petersburg, Russia (1995). P. 210.
- [5] V.K. Zaitsev, S.A. Ktitorov, M.I. Fedorov. In: CRC Handbook of Thermoelectrics / Ed. D.M. Rowe. CRC Press, N.Y. (1995). P. 311.
- [6] Б.М. Аскеров. Электронные явления переноса в полупроводниках. Наука, М. (1985).
- [7] P.G. Klemens. Phys. Rev. **148**, 2, 845 (1966).
- [8] M.J. Colles, J.A. Giordmaine. Phys. Rev. Lett. **27**, 10, 670 (1971).
- [9] D.K. Ferry. Phys. Rev. **B9**, 10, 4277 (1974).
- [10] A.R. Bhatt, K.W. Kim, M.A. Stroscio. J. Appl. Phys. **76**, 6, 3905 (1994).
- [11] Yu.I. Ravich, B.A. Efimova, V.I. Tamarchenko. Phys. Stat. Sol. (b) **43**, 1, 11 (1971).