

Взаимное увлечение электронов и фононов в сильно легированных полупроводниках HgFeSe

© И.И. Ляпилин, Х.М. Биккин

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

(Получена 27 октября 1998 г. Принята к печати 3 ноября 1998 г.)

Теоретически рассмотрены обнаруженные ранее необычные зависимости термоэлектрических и термомагнитных коэффициентов сильно легированных кристаллов HgFeSe от температуры и напряженности магнитного поля. Показано, что наблюдаемые зависимости обусловлены комбинацией рассеяния электронов на коррелированно расположенных заряженных донорах Fe(3+) при низких температурах и эффектом взаимного увлечения электронов и фононов, роль которого существенна в полупроводниках с высокой концентрацией зонных носителей заряда.

Введение

Бесщелевые полупроводники HgSe, легированные железом, обладают рядом уникальных электронных свойств, которые приводят к "аномальному" поведению кинетических коэффициентов в этих материалах [1]. Некоторые из обнаруженных особенностей удалось объяснить рассеянием электронов на пространственно коррелированной системе примесей железа [2]. Однако необычное поведение полевой зависимости термомагнитных коэффициентов в этих материалах, обнаруженное в работе [3], до сих пор в литературе не обсуждалось.

Известно, что коэффициент термоэдс $\alpha(H)$ вырожденного электронного газа в классически сильном магнитном поле H насыщается и не зависит от механизма рассеяния зонных носителей заряда. Однако, как следует из экспериментальных данных работы [3], приведенных на рис. 1, о насыщении величины $|\alpha(H)|$ в кристаллах HgFeSe можно говорить только для наиболее легированного железом образца HgSeFe $N_{\text{Fe}} \simeq 4 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$. Для образцов с меньшей концентрацией железа при некотором значении магнитного поля $H = H_m$ наблюдается максимум безразмерного продольного эффекта Нернста–Эттингаузена (НЭ) $\varepsilon_x = e\Delta\alpha/k_0$, k_0 — константа Больцмана, e — абсолютное значение заряда электрона, $\Delta\alpha = |\alpha(H)| - |\alpha(0)|$. Такая немонотонная зависимость является весьма неожиданной и требует дополнительного объяснения. Кроме того, на кривой зависимости $\alpha(T)$, где T — температура, наблюдается минимум, величина и положение которого существенно зависят от содержания железа в образце.

Совершенно непонятно также обнаруженное в эксперименте [4] немонотонное поведение термоэдс от содержания железа в образце при фиксированной температуре в области низких температур ($T = 10\text{--}20 \text{ К}$). С ростом содержания примесей железа величина $\alpha(N_{\text{Fe}})$ сначала убывает, начиная со значений $N_{\text{Fe}} = 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, затем возрастает, достигая максимума при $N_{\text{Fe}} = 2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, и снова убывает при более высоком содержании примесей железа.

Поскольку в рамках стандартной теории термомагнитных явлений [5] эти результаты не находят своего объяснения, авторами работы [4] была предложена модель,

в которой аномалия величины термоэдс, отмеченная выше, связывалась с ослаблением рассеяния фононов, если система заряженных доноров в кристаллах HgFeSe становится пространственно коррелированной. К сожалению, эта модель не в состоянии объяснить другие аномалии термомагнитных коэффициентов в HgFeSe.

На наш взгляд, существует достаточно простое объяснение аномального поведения термоэлектрических и термомагнитных коэффициентов в этих соединениях. Действительно, в области температур 10–30 К построение корректной теории термомагнитных и термоэлектрических явлений в бесщелевых кристаллах невозможно без учета эффектов фононного увлечения, связанного с появлением анизотропии фононной функции распределения при наличии градиента температуры. Учет эффектов фононного увлечения приводит к значительному увеличению термоэдс и достаточно подробно изучен в случае, когда релаксация фононов определяется в основном неэлектронными механизмами рассеяния ($\tau_{pp} \ll \tau_{pe}$), где τ_{pp} — время релаксации фононов за счет неэлектронных механизмов рассеяния, τ_{pe} — время релаксации фононов за счет взаимодействия с электронами [5].

В более сложном случае сравнимых времен релаксации $\tau_{pp} \approx \tau_{pe}$, $\tau_{ep} \approx \tau_{ei}$, где τ_{ep} — время релаксации электронов на фононах, τ_{ei} — на примесях, кинетические уравнения для фононной и электронной функций распределения необходимо решать совместно (ситуация взаимного увлечения электронов и фононов). Численные оценки показывают, что для образцов HgFeSe, HgSe при низких температурах реализуется как раз этот случай взаимного увлечения.

Решению системы кинетических уравнений для фононной и электронной функций распределения с учетом эффекта взаимного увлечения ранее было посвящено несколько статей. В работах Аппеля [6] и Паррота [7] вычислялись термоэлектрические и термомагнитные коэффициенты для невырожденных полупроводников, Гуревич и Коренблит [8] нашли выражение для электронной и фононной функций распределения в условиях сильного вырождения электронного газа. Авторы работы [8], однако, ограничились лишь рассмотрением термоэлектрических

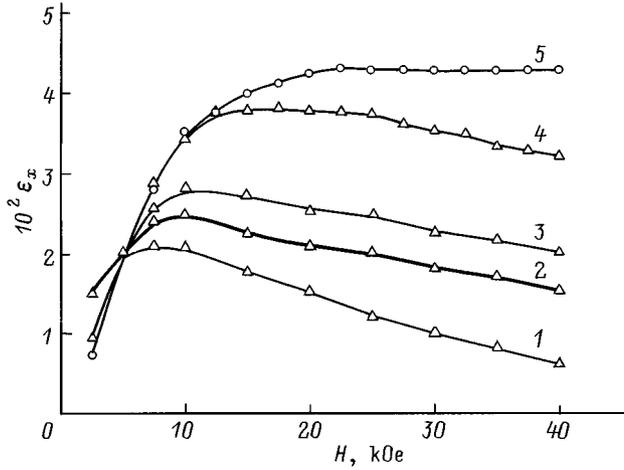


Рис. 1. Зависимости безразмерного поля продольного эффекта Нернста–Эттингаузена от магнитного поля (по данным из работы [3]) для двух образцов HgFeSe при концентрации N_{Fe} , 10^{20} см^{-3} : 1–4 — 0,1, 5 — 4. Температура T , К: 1 — 18, 2 — 25, 3 — 42, 4 — 64, 5 — 58.

коэффициентов, оставив без внимания термомагнитные эффекты.

Таким образом, до настоящего времени полевая зависимость термомагнитных эффектов в вырожденных полупроводниках в условиях взаимного увлечения электронов и фононов совершенно не изучена.

В этой работе мы покажем, что практически вся совокупность экспериментальных результатов работ [3,4], не укладывающихся в рамки традиционной теории термомагнитных явлений, находит свое объяснение, если учесть эффект взаимного увлечения электронов и фононов.

1. Система кинетических уравнений

При рассмотрении кинетического уравнения для электронов проводимости будем учитывать взаимодействие электронов с акустическими фононами и примесями, рассеяние на которых является доминирующим при низких температурах. Интеграл столкновений в этом случае можно записать в следующем виде:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_s = -\frac{f'}{\tau(k)} - \frac{1}{4\tau_A(k)\hbar k^4} \times \int_0^{2k} q^3 (\hbar \mathbf{k} \cdot \mathbf{b}(q)) \left(\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) dq, \quad (1)$$

где

$$\frac{1}{\tau_A(k)} = \frac{E_0^2 k_0 T m k}{\pi \rho s^2 \hbar^3}, \quad f = f^0 + f', \quad (2)$$

$$f' = \left(-\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) \left(\frac{\hbar \mathbf{k}}{m} \cdot \boldsymbol{\chi} \right),$$

E_0 — константа деформационного потенциала, s — скорость звука, m — эффективная масса электрона,

ρ — плотность кристалла, $\tau(k)$ — эффективное время релаксации импульса электронов за счет столкновения электронов с равновесными фононами и другими рассеивателями, $f'(k)$ — неравновесная добавка к равновесной функции распределения $f^0(k)$, \mathbf{k} — волновой вектор электронов.

Интеграл столкновений, входящий в кинетическое уравнение для фононной функции распределения, запишем, принимая во внимание рассеяние акустических фононов на электронах, а также на других (неэлектронных) механизмах релаксации, в виде

$$\left. \frac{\partial N_q}{\partial t} \right|_s = -\frac{k_0 T \mathbf{b}(q)}{(\hbar \omega_q)^2 \tau_{pp}(q)} + \frac{1}{2\tau_A(k)kq} \int_{q/2}^{2k} k \left(\mathbf{b}(q) - \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{\chi} \right) \left(\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) dk, \quad (3)$$

$$N_q = N_q^0 + N'_q, \quad N'_q = \left(-\frac{\partial N_q^0}{\partial \hbar \omega_q} \right) (\mathbf{q} \cdot \mathbf{b}), \quad \omega_q = \hbar s q.$$

Здесь τ_{pp} — время релаксации на неэлектронных механизмах (фононов на фононах, дефектах и т.д.). Неизвестные функции $\boldsymbol{\chi}(\varepsilon)$, $\mathbf{b}(q)$, характеризующие отклонения рассматриваемых систем от равновесия, зависят только от модуля соответствующих волновых векторов и должны быть определены из решения системы кинетических уравнений.

Принимая во внимание интегралы столкновений (1), (3), запишем кинетические уравнения для рассматриваемых нами подсистем. Кинетическое уравнение для электронов проводимости, находящихся в однородных электрическом \mathbf{E} и магнитном \mathbf{H} полях, при наличии градиента температуры ∇T можно записать в виде

$$\mathbf{B}(k) = \boldsymbol{\chi}(\varepsilon_k) - [\mathbf{a} \times \boldsymbol{\chi}(\varepsilon_k)] - \frac{\tau(k)m}{4\hbar\tau_A(k)k^4} \int_0^{2k} q^3 \mathbf{b}(q) dq,$$

$$\mathbf{B}(k) = -\tau(k) \left[e\boldsymbol{\varepsilon} + \frac{\varepsilon_k - \varepsilon_F}{T} \nabla T \right],$$

$$\mathbf{a} = \omega_0 \tau_A(k) \mathbf{h}, \quad \omega_0 = \frac{eH}{mc}, \quad (4)$$

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{E} - \nabla \varepsilon_F / e,$$

где ω_q — частота фонона, $\boldsymbol{\varepsilon}$ — градиент электрохимического потенциала, ε_F — химический потенциал электронов, \mathbf{h} — единичный вектор, ориентированный вдоль направления магнитного поля. Кинетическое уравнение для фононной функции распределения запишем аналогично:

$$\frac{sk_0}{q\hbar\omega_q} \nabla T = -\frac{k_0 T \mathbf{b}(q)}{(\hbar \omega_q)^2 \tau_{pp}(q)} + \frac{1}{2\tau_A(k)kq} \times \int_{q/2}^{\infty} k \left(\mathbf{b}(q) - \frac{\hbar}{m} \boldsymbol{\chi} \right) \left(\frac{\partial f^0}{\partial \varepsilon} \right) dk. \quad (5)$$

Уравнения (4) и (5) являются исходными для определения кинетических коэффициентов при взаимном увлечении электронов и фононов.

Как следует из результатов работы [8], система уравнений (4), (5) легко решается, если в интеграле столкновений (3) кинетического уравнения для фононной функции распределения, учитывая сильное вырождение электронного газа, воспользоваться ступенчатым характером функции распределения $f^0[(\varepsilon - \varepsilon_F)/k_0T]$. Полученная таким образом упрощенная система уравнений может быть решена точно.

Методика решения системы уравнений (4), (5) подробно обсуждалась в работе Гуревича и Коренблита [8] и здесь нет необходимости возвращаться в этому вопросу. Можно лишь предположить несколько иной метод решения, приводящий к тем же результатам, но более наглядно демонстрирующим сущность сделанных приближений.

Очевидно, что система уравнений (4), (5) может быть записана для электронов, имеющих энергию $\varepsilon_k = \varepsilon_F$. Эта система просто решается, если в выражении (5) воспользоваться аппроксимацией $\partial f^0 / \partial \varepsilon_k = \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_F)$, что позволяет найти поправку к электронной функции распределения на поверхности Ферми $\chi(\varepsilon_F)$. После этого можно вернуться к решению системы уравнений (4), (5) для произвольных значений ε_k . Оставляя в правой части уравнения (5) вклад в интеграл лишь на поверхности Ферми, снова имеем систему уравнений, которая является алгебраической относительно $\chi(\varepsilon_k)$.

При проведении конкретных вычислений необходимо задать явный вид неэлектронного механизма релаксации фононов. В качестве последнего рассмотрим механизм Саймонса [5]:

$$\tau_{pp}^{-1} = \lambda_s q, \quad \lambda_s = \frac{\hbar}{\rho} \left(\frac{k_0 T}{\hbar s} \right)^4. \quad (6)$$

Используя описанный выше алгоритм, нетрудно найти уравнение для поправки к электронной функции распределения $\chi(\varepsilon_k)$:

$$\mathbf{B} = \chi - [\mathbf{a} \times \chi] - G \{ \mathbf{B}(\varepsilon_F) - \nu^2(k_F) \mathbf{h} (\mathbf{h} \cdot \mathbf{B}(\varepsilon_F)) - \nu(k_F) [\mathbf{h} \times \mathbf{B}(\varepsilon_F)] \} + \frac{4}{3} \Pi k_0 T \tau(k) \frac{\nabla T}{T},$$

$$\mathbf{B}(\varepsilon_F) = -\tau(k) \left(e\boldsymbol{\varepsilon} + \frac{4}{3} \Pi k_0 T \frac{\nabla T}{T} \right), \quad (7)$$

$$G = \frac{\Pi}{(1 - \Pi^*)} \frac{\tau(k)}{\tau_A(k) R(k_F)}, \quad R(k_F) = 1 + \nu^3(k_F),$$

$$\Pi = \frac{1}{1 + \Pi_1}, \quad \Pi_1 = \frac{2k_0 T \hbar^2 k q}{m(\hbar \omega_q)^2} \frac{\tau_A(k)}{\tau_{pp}(q)} = \frac{2\pi(k_0 T)^4}{E_0^2 (ms)^2}, \quad (8)$$

$$\Pi^* = \frac{\tau(k_F)}{\tau_A(k_F)} \Pi, \quad \nu(\varepsilon_F) = \tau(k_F) \omega_0 (1 - \Pi^*)^{-1}. \quad (9)$$

Можно заметить, что структура уравнения (7) осталась такой же как и в классической теории термомагнитных явлений, а все изменения связаны с перенормировкой

термодинамических сил и длины свободного пробега электронов. Поэтому его можно переписать в виде

$$-\tau(k) \left(e\boldsymbol{\varepsilon}_i^* + \frac{(\varepsilon_k - \varepsilon_F) \delta_{ij} + A_{p ij}}{T} \nabla_j T \right) = \chi_i - [\mathbf{a} \times \chi]_i,$$

$$\mathbf{a} = \mathbf{h} \tau(k) \omega_0,$$

$$\varepsilon_i^* = \varepsilon_j (S_p \delta_{ij} + S_{p ij}); \quad A_{p ij} = A_p^* \delta_{ij} + A_{p ij}^*. \quad (10)$$

Вводя наряду с вектором $\boldsymbol{\varepsilon}$ эффективную термодинамическую силу ∇T^* , запишем решение уравнения (10) в виде

$$\chi(\varepsilon_k) = -e\tau(k) \times \left\{ (\mathbf{h} \cdot \boldsymbol{\varepsilon}^*) \mathbf{h} + \frac{\omega_0 \tau(k) [\mathbf{h} \times \boldsymbol{\varepsilon}^*] - [\mathbf{h} \times [\mathbf{h} \times \boldsymbol{\varepsilon}^*]]}{R} \right\} - \tau(k) \frac{\varepsilon_k - \varepsilon_F}{T} \times \left\{ (\mathbf{h} \cdot \nabla T) \mathbf{h} + \frac{\omega_0 \tau(k) [\mathbf{h} \times \nabla T] - [\mathbf{h} \times [\mathbf{h} \times \nabla T]]}{R} \right\} - \tau(k) \frac{k_0 T}{T} \times \left\{ (\mathbf{h} \cdot \nabla T^*) \mathbf{h} + \frac{\omega_0 \tau(k) [\mathbf{h} \times \nabla T^*] - [\mathbf{h} \times [\mathbf{h} \times \nabla T^*]]}{R} \right\}, \quad (11)$$

$$R = 1 + [\omega_0 \tau(k)]^2.$$

Здесь

$$\nabla T_i^* = \nabla T_j (A_p^* \delta_{ij} + A_{p ij}^*), \quad A_p^* = \frac{4}{3} \Pi (1 + S_p),$$

$$S_p = \frac{\Pi^*}{(1 - \Pi^*)} \frac{\tau_A(k_F)}{\tau_A(k)} \frac{1}{1 + \nu^2(k_F)}. \quad (12)$$

Компоненты введенных нами тензоров имеют следующий вид:

$$S_{p ij}^* = S_p \nu(k_F) \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \nu(k_F) \end{pmatrix}, \quad (13)$$

$$A_{p ij}^* = \frac{4}{3} \Pi S_{ij}^*.$$

Используя выражение (11) для поправки к электронной функции распределения $\chi(\varepsilon_k)$, можно записать выражение для компонент плотности потока заряда в образце $J_i = \sigma_{ij} \varepsilon_j - \beta_{ij} \nabla_j T$ и найти компоненты тензора электропроводности

$$\sigma_{xx} = e^2 \left[K_0^\perp (1 + S_p) - K_0^H \frac{\Pi^*}{1 - \Pi^*} \frac{\nu(\varepsilon_F)}{1 + \nu^2(\varepsilon_F)} \right],$$

$$\sigma_{xy} = e^2 \left[-K_0^H (1 + S_p) - K_0^\perp \frac{\Pi^*}{1 - \Pi^*} \frac{\nu(\varepsilon_F)}{1 + \nu^2(\varepsilon_F)} \right] \quad (14)$$

и компоненты тензора β_{ij} , через которые можно выразить интересные нас кинетические коэффициенты:

$$\beta_{xx} = \frac{e}{T} \left\{ K_1^\perp + \frac{4}{3} k_0 T \Pi \left[K_0^\perp (1 + S_p) - K_0^H \frac{\Pi^*}{1 - \Pi^*} \frac{\nu(\varepsilon_F)}{1 + \nu^2(\varepsilon_F)} \right] \right\},$$

$$\beta_{xy} = \frac{e}{T} \left\{ -K_1^H (1 + S_p) - \frac{4}{3} k_0 T \Pi \left[K_0^H (1 + S_p) + K_0^\perp \frac{\Pi^*}{1 - \Pi^*} \frac{\nu(\varepsilon_F)}{1 + \nu^2(\varepsilon_F)} \right] \right\}. \quad (15)$$

Входящая в формулы (14), (15) величина S_p вычисляется на поверхности Ферми для $k = k_F$.

$$\left| \frac{K_r^\perp}{K_r^H} \right| = \frac{(2m)^{3/2}}{3\pi^2 \hbar^3 m_0} \int_0^\infty d\varepsilon \left(\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \varepsilon^{3/2} \tau(\varepsilon) \times (\varepsilon - \varepsilon_F)^r \left| \frac{1}{1 + [\omega_0 \tau(\varepsilon)]^2} \right|, \quad r = 0, 1. \quad (16)$$

2. Вычисление коэффициента термоэдс

Применим полученные выше выражения для анализа температурной и магнитополевой зависимостей коэффициента термоэдс в соединениях HgSe и HgFeSe. Полагая, что поток тепла направлен вдоль оси x , запишем выражение для коэффициента дифференциальной термоэдс в магнитном поле

$$\alpha_{xx} = \frac{\sigma_{xx} \beta_{xx} + \sigma_{xy} \beta_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{yy}^2}. \quad (17)$$

Учитывая, что в условиях эксперимента [3,4] электронный газ является сильно вырожденным ($\varepsilon_F \gg k_0 T$), представим коэффициент термоэдс после вычисления интегралов $K_0^{H,\perp}$, $K_1^{H,\perp}$ в виде $\alpha_{xx} = \alpha_{xx}^d + \alpha_{xx}^u$, где α_{xx}^d — диффузная часть коэффициента термоэдс

$$\alpha_{xx}^d = -\frac{k_0 \pi^2 k_0 T}{e \cdot 3 \varepsilon_F} \times \frac{[\frac{3}{2}(1 + \nu_0^2) + D] (1 + S_p) + D S_p \nu_0^2 (1 - \Pi^*)^{-1}}{(1 + \nu_0^2) [(1 + S_p)^2 + \nu^2 S_p^2]}, \quad (18)$$

$$\nu_0 = \omega_0 \tau(\varepsilon_F), \quad D = \varepsilon_F \frac{\tau'(\varepsilon_F)}{\tau(\varepsilon_F)}. \quad (19)$$

Слагаемое α_{xx}^u определяет термоэдс увлечения и отлично от нуля в нулевом порядке по параметру $k_0 T / \varepsilon_F$:

$$\alpha_{xx}^u = -\frac{k_0}{e} \frac{4}{3} \Pi, \quad \Pi = \frac{1}{1 + \Pi_1}, \quad \Pi_1 = \frac{2\pi(k_0 T)^4}{E_0^2 (m s^2)^2}. \quad (20)$$

Его величина зависит от магнитного поля и нефоновых механизмов релаксации электронного импульса. При

$T \rightarrow 0$ термоэдс увлечения становится "аномально" большой

$$\alpha_{xx}^u = \frac{k_0}{e} \frac{4}{3}, \quad T \rightarrow 0. \quad (21)$$

Этот результат не является неожиданным и связан с тем, что при сверхнизких температурах необходимо учитывать релаксацию фононов на границах образца.

Выражения (18), (20) полностью определяют как температурную, так и полевую зависимости коэффициента термоэдс в классически сильном магнитном поле. Как следует из результатов (18)–(20), величина, описывающая продольный эффект Нернста–Эттинсгаузена, в отличие от случая, когда взаимное увлечение фононов и электронов не учитывается, содержит лишь один дополнительный параметр Π^* , определенный уравнениями (8), (9). При $S_p = 0$ формула (18) согласуется с известным результатом, полученным в отсутствие увлечения [5]. Исползованная в работе [3] дифференциальная методика измерений приводит к исключению величины α_{xx}^u из конечного результата, поэтому в дальнейшем при анализе полевой зависимости мы будем анализировать только вклад диффузионной термоэдс α_{xx}^d (18).

3. Результаты численного расчета

Выражения (18), (20) позволяют проанализировать изменение коэффициента термоэдс в зависимости от различных параметров для кристаллов HgSe и HgFeSe. Начнем с температурной зависимости коэффициента термоэдс в нулевом магнитном поле. При численном анализе мы использовали следующие значения параметров: эффективная масса $m = 0.065 m_0$, плотность кристалла $\rho = 8 \text{ г/см}^3$. Константу деформационного потенциала мы полагали равной $E_0 = 10 \text{ эВ}$. Такое значение следует из анализа зависимости подвижности электронов проводимости от температуры. Согласно [2], подвижность зонных носителей в соединениях HgSe и HgFeSe постоянна до температуры $T \simeq 30\text{--}40 \text{ К}$, что говорит о преобладании рассеяния электронов на системе заряженных центров. Уменьшение подвижности, которое наблюдается при более высоких температурах, связано с рассеянием электронов на акустических фононах. Поэтому для оценки E_0 мы полагали, что $\tau_A = \tau_{ep}$ при $T = 40 \text{ К}$.

На рис. 2 представлен результат расчета коэффициента термоэдс кристалла HgSe от температуры. Кривая 1 соответствует концентрации электронов $2 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, а кривая 2 рассчитана для $n = 4 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. Из расчетов следует, что увеличение содержания заряженных центров в кристаллах HgFeSe приводит к смещению минимума термоэдс в область более низких температур, как это имеет место в эксперименте [9]. Для сравнения на вставке к рис. 2 представлена зависимость $\alpha(T)$ из работы [10]. Заметим, что смещение минимума термоэдс будет более сильным, если принять во внимание также и рассеяние фононов на дефектах [9].

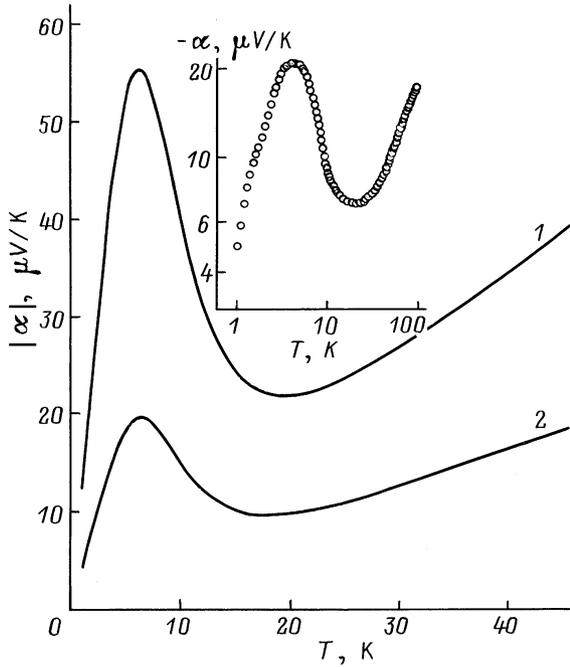


Рис. 2. Зависимости абсолютной величины термоэдс от температуры при содержании железа в HgFeSe $N_{Fe}, 10^{18} \text{ см}^{-3}$: 1 — 2, 2 — 4. На вставке — данные из работы [10].

Теперь о зависимости безразмерного коэффициента Нернста ϵ_x от магнитного поля. На рис. 3, *a* представлен результат численного расчета безразмерного коэффициента Нернста от магнитного поля при низких температурах для кристалла HgSe. При этом считалось, что основным механизмом рассеяния зонных носителей заряда является система хаотически расположенных примесных центров ($D = 3/2$) [5] (кривые 1–3). Зависимости 4, 5 соответствуют случаю более высоких температур, когда основной вклад в релаксацию электронов связан с рассеянием электронов на акустических фононах (при $T > 40 \text{ К}$, $D = -1/2$) и вклад от увлечения заметно ослаблен. Как видно из приведенных результатов расчетов, зависимость $\epsilon_x(H, T)$ от магнитного поля является более сложной при низких температурах, когда доминирует рассеяние электронов на примесях, а также существует вклад и от эффектов увлечения. При промежуточных значениях магнитного поля величина ϵ_x обнаруживает смену знака эффекта и является немонотонной функцией магнитного поля. Очевидно, что столь необычная зависимость $\epsilon_x(H, T)$ является следствием взаимного увлечения электронов и фононов. В области высоких температур $T > 40 \text{ К}$ доминирует рассеяние на акустических фононах, $\epsilon_x(H) > 0$ и стремится к насыщению с возрастанием магнитного поля.

Обратимся теперь к анализу зависимости $\epsilon_x(H, T)$ в кристаллах HgFeSe (рис. 1) для образца с содержанием железа $N_{Fe} = 1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ [3]. Во-первых, во всем интервале исследованных магнитных полей $H = 0 \div 40 \text{ кЭ}$ и в диапазоне температур $T = 18 \div 60 \text{ К}$ знак эффекта

положителен. Очевидно, что такое поведение коэффициента $\epsilon_x(H, T)$ связано с наличием сильных кулоновских корреляций в системе доноров Fe(2+) [2,9]. Сравнение температурной зависимости подвижности в соединениях HgFeSe с различным содержанием атомов железа показывает [2], что при высоком содержании железа зависимость времени релаксации от энергии в области низких температур становится ближе к той, которая имеет место при рассеянии электронов на акустических фононах. Именно поэтому и знак продольного эффекта

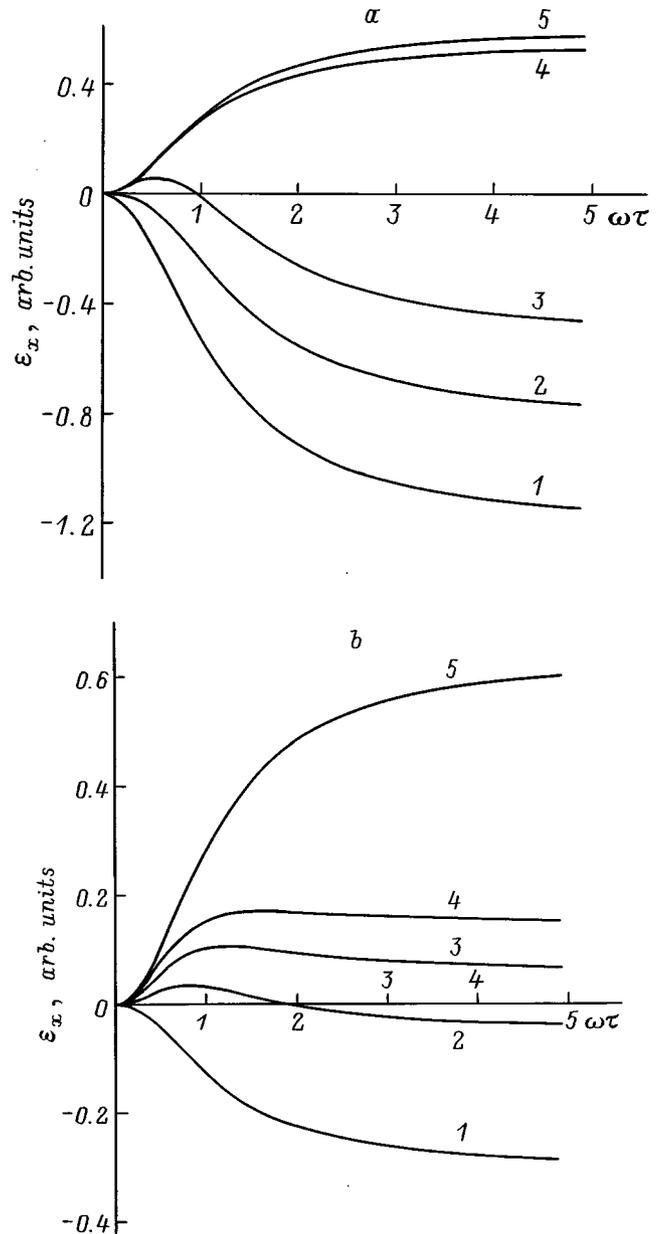


Рис. 3. Расчетные зависимости безразмерного поля продольного эффекта Нернста–Эттингсауэна от магнитного поля для образцов: *a* — HgSe (зависимости 1–3 рассчитаны для $D = 3/2$, зависимости 4, 5 для $D = -1/2$), температура $T, \text{ К}$: 1 — 5, 2 — 35, 3 — 20, 4 — 65, 5 — 50; *b* — HgFeSe ($D = 1/2$), температура $T, \text{ К}$: 1 — 5, 2 — 35, 3 — 15, 4 — 25, 5 — 45.

Нернста–Эттинггаузена становится положительным уже при $T > 15$ К, в то время как в кристаллах HgSe смена знака (с отрицательного на положительный) происходит при $T \simeq 30$ К [9]. В силу этих обстоятельств знак эффекта $\varepsilon_x(H, T)$ оказывается в эксперименте положительным, а его поведение с изменением температуры поля отражает характер эволюции примесной системы, связанный как с уменьшением степени коррелированности в примесной системе, так и с уменьшением роли эффекта увлечения при возрастании температуры. Используя результаты расчета времени релаксации для случая сильно коррелированной примесной системы [2], можно найти зависимость коэффициента $\varepsilon_x(H, T)$ в явном виде. Однако необычное поведение коэффициента $\varepsilon_x(H, T)$ можно проиллюстрировать и более простым путем. На рис. 3, *b* представлены результаты расчета безразмерного коэффициента Нернста для $D = 1/2$. Такое значение величины D отражает некую усредненную зависимость времени релаксации от энергии между примесной зависимостью и фононной. Как видно из приведенных кривых, определенная таким способом зависимость коэффициента $\varepsilon_x(H, T)$ весьма близка к той, что имеет место в эксперименте, что является несомненным подтверждением того, что именно эффекты взаимного увлечения электронов и фононов, совместно с рассеянием электронов на системе заряженных доноров, ответственны за "аномальное" поведение термоэлектрических коэффициентов в исследованных соединениях.

Обратимся теперь к рассмотрению аномальной зависимости $\alpha(N_{\text{Fe}})$ при низких температурах ($T \simeq 10 \div 20$ К) в нулевом магнитном поле [4]. Вклад в величину коэффициента $\alpha(T)$ от эффекта увлечения в этом интервале температур является доминирующим.

Предварим расчет двумя замечаниями. Во-первых, концентрация зонных носителей в кристаллах HgSeFe определяется содержанием атомов железа в образце. Она линейно возрастает с увеличением содержания атомов железа в HgFeSe, вплоть до концентрации $N_{\text{Fe}} \simeq 4.5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$. При дальнейшем увеличении содержания железа в образце концентрация зонных носителей заряда, а следовательно, и концентрация заряженных центров Fe(3+) остается постоянной в довольно широком интервале [1], что обусловлено стабилизацией уровня Ферми на донорном уровне железа, расположенном в зоне проводимости при энергии $E_d = 210$ мэВ. При этом возрастает только концентрация нейтральных атомов железа Fe(2+). Во-вторых, при $N_{\text{Fe}(3+)} \gg N_{\text{Fe}(2+)}$, согласно корреляционной модели [2], имеет место ослабление рассеяния электронов на заряженных ионах Fe(3+). Возрастание подвижности на опыте наблюдается при увеличении содержания железа в области концентраций $N_{\text{Fe}} \ll 2 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, которое сменяется убыванием ее при дальнейшем росте концентрации железа.

С учетом сказанного обратимся к рассмотрению зависимости $\alpha(N_{\text{Fe}})$ [4]. Убывание коэффициента термоэдс ($\alpha_{xx} \sim 1/\varepsilon_F$) с увеличением содержания примесей замещения железа просто отражает тот факт, что энергия

Ферми $\varepsilon_F \sim (n = N_{\text{Fe}(3+)})^{2/3}$. Очевидно, что такая зависимость термоэдс будет иметь место до тех пор, пока не наступит пининг уровня Ферми на донорном уровне железа. При дальнейшем увеличении содержания железа в кристаллах HgFeSe на кривой зависимости термоэдс от содержания примесей должно было бы наблюдаться плато, если оставаться в рамках стандартной теории и не принимать во внимание другие механизмы рассеяния фононов (например, рассеяние их на дефектах). Однако взаимное увлечение электронов и фононов приводит к перенормировке диффузионного вклада в термоэдс (возникает дополнительная зависимость от механизма рассеяния электронов $S_F(0)$). Поскольку основным источником рассеяния электронов при низких температурах является рассеяние на примесных центрах, а оно из-за кулоновских корреляций, имеющих место в примесной системе при высоком содержании атомов железа [2] заметно ослабляется, то именно это обстоятельство и приводит к возникновению немонотонной зависимости в изменении коэффициента термоэдс в данном интервале концентраций. Очевидно, что природа возникающей немонотонности на зависимости $\alpha(N_{\text{Fe}})$ аналогична той, которая имеет место при исследовании подвижности в кристаллах HgFeSe. При дальнейшем возрастании концентрации атомов железа убывание коэффициента термоэдс, как и подвижности, обусловлено преобладающим вкладом в рассеяние как электронов на сплавном потенциале [2], так и фононов на дефектах [9].

Таким образом, аномалия в концентрационной зависимости коэффициента термоэдс $\alpha_{xx}(N_{\text{Fe}})$, как и немонотонная зависимость подвижности от содержания примесей замещения в кристаллах HgFeSe, просто отражает характер рассеяния электронов в этих соединениях, связанный с возникновением в примесной системе сильных кулоновских корреляций. Необходимость во введении дополнительного ослабления рассеяния на фононах, которое рассматривалось в работе [4], для описания данного эффекта оказывается излишним.

Заключение

Удалось объяснить качественно и количественно обнаруженные во время опыта необычные зависимости термоэлектрических и термомагнитных коэффициентов для кристаллов HgSe и HgFeSe при различном содержании железа в них в классической области изменения напряженности магнитного поля при низких температурах. Показано, что эти зависимости обусловлены как рассеянием электронов на коррелированно расположенных заряженных донорах Fe(3+) при низких температурах, так и эффектом взаимного увлечения электронов и фононов, роль которого существенна в полупроводниках с высокой концентрацией зонных носителей заряда. В рамках рассмотренной выше модели представляется интересным исследовать влияние эффекта взаимного увлечения в данных соединениях на другие кинетические коэффициенты.

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

Список литературы

- [1] И.Г. Кулсеев, И.И. Ляпилин, А.Т. Лончаков, И.М. Цидильковский. ЖЭТФ, **103**, 1447 (1994).
- [2] И.Г. Кулсеев, И.И. Ляпилин, И.М. Цидильковский. ЖЭТФ, **102**, 1652 (1992).
- [3] И.Г. Кулсеев, И.И. Ляпилин, А.Т. Лончаков, И.М. Цидильковский. ЖЭТФ, **106**, 1205 (1994).
- [4] И.Г. Кулсеев, А.Т. Лончаков, И.Ю. Арапова, Г.И. Кулсеев. ЖЭТФ, **113**, 1200 (1998).
- [5] Б.М. Аскеров. *Электронные явления в полупроводниках* (М., Наука, 1985).
- [6] J. Appel. Zs. Naturforsch., **13a**, 386 (1957).
- [7] J.E. Parrot. Proc. Phys. Soc. B, **70**, 590 (1957).
- [8] Л.Э. Гуревич, И.Я. Коренблиг. ФТТ, **6**, 856 (1964).
- [9] И.Г. Кулсеев, И.И. Ляпилин, А.Т. Лончаков, И.М. Цидильковский. ФТП, **28**, 937 (1994).
- [10] V. Tieke, R. Fletcher, J.C. Maan, W. Dobrowolski, A. Mycielski, A. Wittlin. Phys. Rev. B, **54**, 10 565 (1996).

Редактор Т.А. Полянская

Reciprocal drag of electrons and phonons in highly-doped HgFeSe semiconductors

I.I. Lyapilin, Kh.M. Bikkin

Institute for Physics of Metals,
Ural Branch of Russian Academy of Sciences,
620219 Yekaterinburg, Russia