

Влияние фононного увлечения на термоэдс в параболической квантовой яме

© Х.А. Гасанов*, Дж.И. Гусейнов*, В.В. Дадашова⁺, Ф.Ф. Алиев*

* Азербайджанский государственный педагогический университет,
Az-1000 Баку, Азербайджан

⁺ Бакинский государственный университет,
Az-1148 Баку, Азербайджан

• Институт физики им. Г.М. Абдуллаева Национальной академии наук Азербайджана,
Az-1143 Баку, Азербайджан

E-mail: xanlarhasanli@rambler.ru

(Получена 9 июля 2015 г. Принята к печати 23 июля 2015 г.)

Развита теория термоэдс увлечения, возникающая при наличии градиента температуры в плоскости слоя двумерного электронного газа в параболической квантовой яме. Рассматриваются механизмы взаимодействия электронов с акустическими фононами, с учетом экранирования потенциала взаимодействия. Установлено, что существенный вклад в термоэдс двумерного электронного газа дает эффект увлечения электронов фононами. Показано, что учет экранирования значительно влияет на величину термоэдс увлечения. Для температурной зависимости термоэдс в параболической квантовой яме GaAs/AlGaAs в интервале температур 1–10 К установлено хорошее согласие полученных теоретических результатов с экспериментом.

1. Введение

В настоящее время большое внимание уделяется изучению кинетических явлений в системах, размеры которых сравнимы с длиной волны де Бройля электрона. Ограниченность движения электронов в таких системах приводит к тому, что кинетические явления в них резко отличаются от электронных явлений переноса в массивных образцах. Особое внимание как экспериментально, так и теоретически привлекают термоэлектрические и термомагнитные эффекты в системах с двумерным электронным газом [1–8].

В работах [1–3] экспериментально изучены термоэдс и коэффициент Нернста–Эттингсаузен в гетеропереходах GaAs/AlGaAs, в магнитных полях до 20 Тл. Термоэдс оказался по величине слишком большим, в частности, в квантовом пределе при коэффициенте заполнения, равном 1/2, имеет величину $-120 \text{ мкВ} \cdot \text{К}^{-1}$. В отсутствие магнитного поля термоэдс также имеет слишком большие значения и температурную зависимость, не соответствующую предсказанной теорией диффузионной части термоэдс. Учет эффекта фононного увлечения позволяет объяснить эти аномалии.

В настоящей работе исследована температурная зависимость термоэдс вырожденного электронного газа в полупроводниковой квантовой яме с параболическим потенциалом в области низких температур порядка 1–10 К, где эффект фононного увлечения играет существенную роль. Применен метод кинетического уравнения Больцмана, при этом температурный градиент направлен вдоль плоскости свободного движения электронов. Численный расчет термоэдс проведен для параболической квантовой ямы GaAs/AlGaAs и приведено

сравнение с имеющимися в литературе экспериментальными фактами.

2. Теория

Для получения аналитического выражения различных физических величин является целесообразным использовать конкретную модель потенциальной квантовой ямы. С этой целью часто применяется параболический потенциал вида $U(x) = m\omega_0^2 x^2/2$, ограничивающий движение электронов в направлении оси x , где m — эффективная масса электронов проводимости, ω_0 — параметр параболического потенциала. Для данной модели в работе [9] найдены одноэлектронные волновые функции и энергетический спектр носителей тока.

Температурный градиент $\nabla_y T$ находится в плоскости слоя двумерного электронного газа и термоэдс вычисляется по формуле: $\alpha = \beta/\sigma$. Здесь $\beta = \beta_e + \beta_{ph}$ (и, следовательно, α) состоит из двух частей — электронной β_e и фононной β_{ph} . Вследствие отсутствия квантования вдоль направления температурного градиента, при вычислении коэффициентов σ и β можно использовать кинетическое уравнение Больцмана. Неравновесная функция распределения выражается через обобщенную силу [10]

$$\Phi_y = -eE_y - \frac{\varepsilon - \xi}{T} \nabla_y Y - A_{ph} k_0 \nabla_y T, \quad (1)$$

где e — элементарный заряд, E_y — термоэлектрическое поле, образованное температурным градиентом, k_0 — постоянная Больцмана, ε и ξ — энергия электронов и химический потенциал соответственно. Последний

член это статистическая сила увлечения, а безразмерная величина дается выражением

$$A_{ph} = -\frac{ms^2}{k_0} \sum_q 2(w_{pa}(q) + w_{da}(q)) \exp\left(-\frac{R^2 q_x^2}{2}\right) \times \tau_{ph}(q) \frac{q_y}{k_y} \frac{dN_q^0}{dT} \delta(\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k). \quad (2)$$

Здесь $\tau_{ph}(q)$ — время релаксации фононов, N_q^0 — равновесная функция распределения фононов, s — скорость звука в кристалле, $\mathbf{k}(k_y, k_z)$ — волновой вектор электрона, $\mathbf{q}(q_x, q_y, q_z)$ — волновой вектор фонона, $\gamma = (N, k_y, k_z)$ — набор квантовых чисел, характеризующий состояние электрона, N — осцилляторное квантовое число и $R = (\hbar/m\omega_0)^{1/2}$ — „длина осциллятора“. Необходимо отметить, что в определенной степени увлечение электронов фононами связано с неупругостью рассеяния и это принято во внимание при вычислении A_{ph} . В процессе увлечения электронов акустическими фононами большую роль играют как деформационное (DA), так и пьезоэлектрическое (PA) взаимодействие, и входящие в формулу (2) w_{da} и w_{pa} имеют вид:

$$w_{da}(q) = \frac{\pi E_1^2 q^2}{\varepsilon(q)^2 \rho \omega_q}, \quad w_{pa}(q) = \frac{\pi e^2 \beta^2}{\varepsilon(q)^2 \rho \omega_q}. \quad (3)$$

В этих выражениях $\omega_q = sq$ — частота акустического фонона, ρ — плотность кристалла, E_1 — деформационный потенциал, $\beta = \sqrt{0.8e_{14}/\chi}$, e_{14} — пьезоэлектрическая постоянная, χ — статическая диэлектрическая постоянная. В этих формулах учитывается экранирование потенциалов взаимодействия электронов с фононами. Выражение для диэлектрической функции $\varepsilon(q)$ приведено далее (9). Используя выражения для обобщенной силы в выражении для неравновесной функции распределения, а затем в плотности тока, для компонент электропроводности σ и термоэлектрического тензора β получим:

$$\begin{aligned} \sigma &= e^2 \sum_{\gamma} \tau_e(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_0}\right) v_y^2, \quad (4) \\ \beta_e &= -e \sum_{\gamma} \tau_e(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_0}\right) v_y^2 \frac{\varepsilon - \xi}{T}, \\ \beta_{ph} &= -ek_0 \sum_{\gamma} \tau_e(\varepsilon) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_0}\right) v_y^2 A_{ph}. \quad (5) \end{aligned}$$

Здесь $\tau_e(\varepsilon)$ — время релаксации электронов, f_0 — равновесная функция распределения электронов, \mathbf{v} — скорость электронов.

Подставляя полученные выражения в формулу для термоэдс, имеем

$$\alpha = \alpha_d + \alpha_{ph} = -\frac{k_0}{e} \left[\frac{\partial \ln \sigma}{\partial \eta} + A_{ph} \right], \quad (6)$$

где $\eta = \xi/k_0 T$, а термоэдс увлечения дается формулой

$$\alpha_{ph} = -\frac{k_0}{e} A_{ph}(T, \eta, R). \quad (7)$$

Из анализа большинства экспериментальных работ, посвященных исследованию термоэдс в квантовых ямах, следует, что средняя энергия электронов удовлетворяет условию $\bar{\varepsilon} < \hbar\omega_0$ [1–3], т. е. электроны находятся только на первом квантовом уровне ($N = 0$). В этом случае плотность электронных состояний постоянна и равна

$$g(\varepsilon) = \frac{m}{\pi \hbar^2}.$$

Учитывая вышесказанное, мы рассмотрим случай с $N = 0$ (квантовый предел). В этом случае для химического потенциала электронов имеем

$$\xi = \frac{\hbar\omega_0}{2} + \frac{\pi \hbar^2 n}{m}. \quad (8)$$

Здесь n — поверхностная плотность электронов. В результате ограничения движения электронов в направлении x диэлектрическая функция электронов зависит только от двумерного волнового вектора $q_{\perp}(q_y, q_z)$, направленного исключительно вдоль слоя, и имеет вид

$$\varepsilon(q_{\perp}) = 1 + \frac{2me^2 e^{\frac{1}{2}R^2 q_{\perp}^2} \operatorname{erf}\left(\frac{Rq_{\perp}}{\sqrt{2}}\right)}{\sqrt{\pi} \hbar^2 \chi q_{\perp}}. \quad (9)$$

Используя формулу (9), были вычислены времена релаксации при рассеянии носителей тока на акустических фононах и ионах примеси. Если рассеяние электронов на акустических фононах удовлетворяет условию квазиупругости $\bar{\varepsilon} \gg \hbar\omega_q$, то при вычислении времени релаксации электронов функцию распределения фононов можно считать равновесной (функция Планка). В этом случае электроны взаимодействуют только с теми фононами, волновые числа которых удовлетворяют условию: $q < 2\bar{k}$ (где \bar{k} — среднее значение модуля вектора $\mathbf{k}(k_y, k_z)$). Кроме того, если дополнительно удовлетворяется условие $k_0 T \gg \hbar\omega_q$, то равновесную функцию распределения Планка можно разложить в ряд. Необходимо отметить, что при низких температурах для всех случаев, реализуемых на опыте, рассеяние на ионах примеси в несколько раз сильнее, чем рассеяние на фононах. В пределах вышеуказанных условий мы получаем нижеследующие выражения для частоты рассеяния электронов на акустических фононах (обратное время релаксации).

При температурах выше одного градуса Кельвина время релаксации при рассеянии на деформационном потенциале имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_{da}} &= \frac{2\sqrt{2}mk_0 T E_1^2}{\pi \sqrt{\pi} \hbar^3 \rho s^2 R} \\ &\times \int_0^1 \left[1 + \frac{me^2 R e^{2y^2 x^2} \operatorname{erf}(\sqrt{2}yx)}{\sqrt{\pi} \hbar^2 \chi_0 y x} \right]^{-2} \frac{x^2}{\sqrt{1-x^2}} dx, \quad (10) \end{aligned}$$

а при рассеянии на пьезопотенциале

$$\frac{1}{\tau_{pa}} = \frac{mk_0Te^2\beta^2R}{\pi\hbar^3\chi_0^2\rho s^2y} \int_0^1 \left[1 + \frac{me^2Re^{2y^2x^2}\text{erf}(\sqrt{2}yx)}{\sqrt{\pi}\hbar^2\chi_0yx} \right]^{-2} \times e^{2y^2x^2}\text{erf}(\sqrt{2}yx) \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} dx. \quad (11)$$

В этих выражениях приняты обозначения: $x = \frac{q}{2k}$, $y = Rk$.

При температурах ниже одного градуса Кельвина имеет место рассеяние на ионах примеси, и время релаксации с учетом экранирования имеет вид

$$\frac{1}{\tau_i} = \frac{4\pi mn_i Z^2 e^4 R^2}{\hbar^3 \chi_0^2 y^2} \int_0^1 e^{2y^2x^2} \text{erf}(yx)^2 \times \left[1 + \frac{me^2Re^{2y^2x^2}\text{erf}(\sqrt{2}yx)}{\sqrt{\pi}\hbar^2\chi_0yx} \right]^{-2} \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx. \quad (12)$$

Используя полученные выше времена релаксации, в выражении (2) для различных механизмов рассеяния фононов были получены коэффициенты, определяющие фононную часть термоэдс A_{ph} :

$$A_{ph}(y) = \frac{(e\beta)^2 s^2 m^2}{\pi^2 \rho \hbar (k_0 T)^2 R} \tau_{ph,l} \times \int_0^1 F_l(yx) \left(1 + \frac{me^2Re^{2y^2x^2}\text{erf}(\sqrt{2}yx)}{\sqrt{\pi}\hbar^2\chi_0yx} \right)^{-2} \frac{x^2}{\sqrt{1-x^2}} dx. \quad (13)$$

Здесь

$$F_l(yx) = \int_{-\infty}^{\infty} q^l \left(Sh \frac{\hbar s q}{2k_0 T} \right)^{-2} \left(1 + \left(\frac{E_1 q}{e\beta R} \right)^2 \right) e^{-\frac{l}{2} t} dt, \quad q = (4R^2 k^2 x^2 + t^2)^{\frac{1}{2}}. \quad (14)$$

Для релаксации длинноволновых фононов известны три механизма релаксации Херринга ($l = 2$), Симонса ($l = 1$) и рассеяния на границах, времена релаксации которых имеют вид:

$$\tau_{ph,2} = \frac{\rho \hbar^2 s^3 R^2}{(k_0 T)^3}, \quad \tau_{ph,1} = \frac{\rho \hbar^3 s^4 R}{(k_0 T)^4}, \quad \tau_{ph,0} = \frac{L}{s}. \quad (15)$$

Здесь L — средняя длина свободного пробега фонона при рассеянии на границах. Для сильно вырожденного электронного газа ($\eta = \xi/k_0 T \gg 1$) выражения для кинетических коэффициентов упрощаются и имеют вид:

$$n = \frac{k_F^2}{2\pi}, \quad \sigma = \frac{e^2 k_F^2 \tau_F}{2\pi m}, \quad \beta_e = -\frac{k_0}{e} \frac{\partial \sigma}{\partial \eta}, \quad \beta_{ph} = -\frac{k_0}{e} \sigma A_{ph}(y_F). \quad (16)$$

Здесь $y_F = Rk_F$, k_F — волновое число, соответствующее уровню Ферми. Основываясь на приведенных

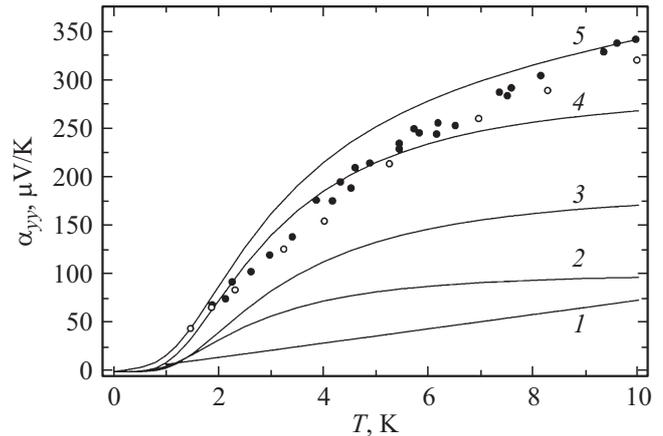


Рис. 1. Температурная зависимость термоэдс: 1 — диффузионная термоэдс; 2–4 — термоэдс, связанная с увлечением фононов (2 — только РА, 3 — только DA); 4 — фононная термоэдс, образованная при взаимодействии РА + DA; 5 — общая термоэдс. Светлые и черные точки — результаты эксперимента [1].

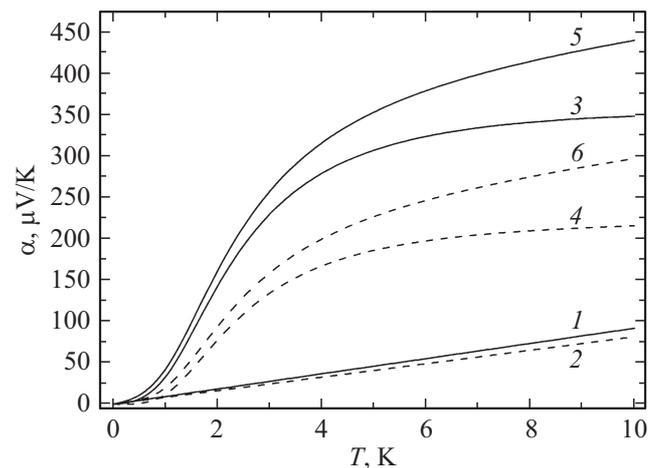


Рис. 2. Температурные зависимости термоэдс с учетом (пунктирные линии) и без учета экранирования (сплошные линии): 1, 2 — диффузионная термоэдс; 3, 4 — термоэдс, связанная с увлечением фононами; 5, 6 — общая термоэдс.

выше формулах, изучена температурная зависимость термоэдс увлечения при рассеянии электронов проводимости на деформационном и пьезоэлектрическом потенциале (рис. 1, 2). Из анализа формулы (13) следует, что при низких температурах, удовлетворяющих условию $\hbar s q / 2k_0 T > 1$, $A_{ph} \sim \frac{1}{T^2} e^{\frac{\hbar s q}{k_0 T}} \rightarrow 0$, в то время как при высоких температурах, удовлетворяющих условию $\hbar s q / 2k_0 T < 1$, $A_{ph} \sim \text{const}$, что находится в хорошем соответствии с результатами, приведенными на рис. 1 и 2.

3. Обсуждение результатов

Применим полученные теоретические результаты к термоэдс электронного газа в параболической квантовой

яме GaAs/AlGaAs. При численных расчетах использованы известные в научной литературе следующие физические параметры: $m = 0.067m_0$ (m_0 — масса свободного электрона), $\rho = 5.3 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$, $s = 5 \cdot 10^5 \text{ м/с}$, $E_1 = 7.4 \text{ эВ}$, $e_{14} = 0.16 \text{ Дж/м}^2$ [11]. В соответствии с экспериментом [1] мы принимаем ширину квантовой ямы равной $L_x = 10^{-6} \text{ см}$, поверхностную плотность электронов — $n = 1.78 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, подвижность — $2.27 \cdot 10^5 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$, среднюю длину пробега фононов — $L = 3 \cdot 10^{-2} \text{ см}$.

Необходимо отметить, что в квантовом пределе ($N = 0$) уровень Ферми расположен между первым и вторым уровнями Ландау ($\frac{\hbar\omega_0}{2} \leq \xi < \frac{3\hbar\omega_0}{2}$). Эти условия, а также условие сильного вырождения электронного газа ($\eta \gg 1$) реализуются в работах [1–3]. В рассматриваемом случае основным механизмом рассеяния электронов является рассеяние на ионах примеси, а для рассеяния фононов — рассеяние на границах образца. В области температур от 1 до 10 К при рассеянии на пьезоэлектрическом (РА) и деформационном потенциале (ДА) механизмы взаимодействия электронов с фононами являются одного порядка. Поэтому здесь принимаются во внимание оба механизма. Параметр параболического потенциала ω_0 находим из условия $R \approx L_x/2$:

$$\omega_0 = 7 \times 10^{13} \text{ с}^{-1}.$$

Теоретические расчеты температурных зависимостей термоэдс представлены на рис. 1. В области температур, где выполняются условия сильного вырождения, диффузионная термоэдс линейно растет с температурой (рис. 1, кривая 1). В термоэдс, связанную с увлечением фононов (рис. 1, кривая 4) при $T < 1.5 \text{ К}$ основной вклад дает электрон-фононное взаимодействие через пьезоэлектрический (РА) потенциал (кривая 2), а при $T > 1.5 \text{ К}$ — деформационный потенциал (ДА) взаимодействия (рис. 1, кривая 3). Полученные теоретические результаты достаточно хорошо согласуются с экспериментальными результатами в температурном интервале 1–10 К [1]. В этом температурном интервале диффузионная термоэдс в 3–8 раз меньше, чем фононная. Например, при температуре $T = 5 \text{ К}$ фононная термоэдс равна $\alpha_{\text{ph}} = 215 \text{ мкВ/К}$, а диффузионная термоэдс равна $\alpha_e = 36 \text{ мкВ/К}$.

Были проведены вычисления для определения влияния экранирования потенциала на термоэдс. На рис. 2 представлены сравнительные результаты расчетов, произведенных с учетом и без учета экранирования. Расчеты показывают, что хотя учет экранирования мало влияет на диффузионную термоэдс ($\sim 12\%$), учет экранирования в фононной части термоэдс оказывается более существенным. Учет экранирования в температурном интервале 1–10 К приводит к уменьшению значения термоэдс в 1.5–2 раза.

Список литературы

- [1] R. Fletcher, J.C. Maan, G. Weimann G. Phys. Rev. B, **32**, 8477 (1985).
- [2] R. Fletcher, J.C. Maan, R. Ploog, G. Weimann. Phys. Rev. B, **33**, 122 (1986).
- [3] R. Fletcher, J.J. Harris, C.T. Foxon, M. Tsaousidou, P.N. Butcher. Phys. Rev. B, **50**, 14991 (1994).
- [4] S.K. Lyo. Phys. Rev. B, **38**, 6345 (1988).
- [5] R.J.J. Nicholas. Phys. C : Sol. St. Phys., **18**, L695 (1985).
- [6] S.S. Kubakaddi, B.G. Mulimani, V.M. Jali. Phys. Status Solidi B, **139**, 267 (1987).
- [7] S.S. Kubakaddi, P.N. Butcher. J. Phys.: Condens. Matter, **1**, 3939 (1989).
- [8] M.W. Wu, N.J.M. Horing, H.L. Cui. Phys. Rev. B, **54** (8), 5438 (1996).
- [9] F.M. Hashimzade, Kh.A. Hasanov, B.H. Mehdiyev, S. Cakmak S. Phys. Scripta, **81**, 015701 (2010).
- [10] Б.М. Аскеров. *Электронные явления переноса в полупроводниках* (М., Наука, 1985).
- [11] В.Ф. Гантмахер, И.Б. Левинсон. *Рассеяние носителей тока в металлах и полупроводниках* (М., Наука, 1984).

Редактор А.Н. Смирнов

Influence of phonon drag on the thermopower in parabolic quantum well

Kh.A. Hasanov*, J.I. Huseynov*, V.V. Dadashova⁺, F.F. Aliyev[•]

* Azerbaijan State Pedagogical University,

Az-1000 Baku, Azerbaijan

+ Baku State University,

Az-1148 Baku, Azerbaijan

• Abdullayev Institute of Physics,

National Academy of Science of Azerbaijan,

Az-1143 Baku, Azerbaijan

Abstract There has been developed the theory of the phonon-drag thermopower arising by the presence of temperature gradient in the plane of two-dimensional electron gas layer in parabolic quantum well. Mechanisms of electron interaction with acoustic photons with the taken into account screening of potential of electron-phonon interaction have been considered. It is established that substantial contribution into thermopower of two-dimensional electron gas gives the phonon-rag thermopower. It is shown that account of screening influences substantially on the magnitude of thermopower of grad. For temperature dependence of thermopower in GaAs/AlGaAs parabolic quantumwell with in 1–10 К a good agreement of obtained theoretical results with the experiment has been established.