

©1994 г.

ВЛИЯНИЕ УВЛЕЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ ФОНОНАМИ НА ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ И ТЕРМОМАГНИТНЫЕ ЭФФЕКТЫ В СЕЛЕНИДЕ РТУТИ, ЛЕГИРОВАННОМ ЖЕЛЕЗОМ

И.Г.Кулеев, И.И.Ляпинин, А.Т.Лончаков, И.М.Цидильковский

Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук, 620219, Екатеринбург, Россия
(Получена 19 июля 1993 г. Принята к печати 1 ноября 1993 г.)

Приводятся результаты измерений термоэдс и эффекта Нернста-Эттинсгаузена (НЭ) на образцах $Hg_{1-x}Fe_xSe$ с различным содержанием железа ($0 < x < 0.02$) при температурах (10÷45) К. Экспериментальные данные свидетельствуют о значительном вкладе в термоэдс и коэффициенты НЭ при низких температурах эффектов увлечения электронов фононами. Представлен теоретический анализ кинетических коэффициентов для различных механизмов релаксации фононов. Результаты расчета сопоставлены с экспериментальными данными.

1. Введение

В работах [1,2] подробно проанализированы зависимости подвижности электронов μ и термомагнитных коэффициентов кристаллов $HgSe:Fe$ от концентрации примесей замещения железа N_{Fe} . Было показано, что аномальный ход зависимости $\mu(N_{Fe})$ обусловлен комбинацией рассеяния электронов на коррелированно расположенных донорах Fe^{3+} и сплавном потенциале. Анализ термомагнитных явлений, выполненный в [2], подтвердил вывод работы [1] о существенном влиянии кулоновских корреляций в системе заряженных ионов железа на рассеяние носителей заряда. Одним из основных результатов работы [2] является вывод о том, что при переходе от области слабых к области сильных корреляций в системе ионов Fe^{3+} (т.е. от малых к большим концентрациям железа N_{Fe}) меняется знак эффектов Нернста-Эттинсгаузена (НЭ). Смена знака связана с различной зависимостью времени релаксации электронов τ от энергии ϵ для областей слабых и сильных корреляций. Этот важный теоретический результат находится в хорошем согласии с экспериментальными данными.

Представляло интерес исследовать температурную зависимость термомагнитных эффектов для твердых растворов HgSe:Fe в области низких температур. Изучение температурной зависимости этих эффектов позволяет, как мы увидим, получить полезную информацию о механизмах рассеяния электронов и фононов.

Далее приводятся результаты измерений и количественного анализа термоэлектродвижущей силы и коэффициентов НЭ для кристаллов HgSe:Fe в зависимости от температуры для образцов с различным содержанием железа.

2. Результаты измерений

Основные характеристики исследованных образцов — концентрации N_{Fe} , электронов проводимости n и подвижности последних μ — приведены в таблице. Температурный интервал измерений (10÷45) К. Концентрации железа N_{Fe} варьировались в пределах от $1 \cdot 10^{18}$ до $4 \cdot 10^{20}$ см $^{-3}$.

№ образца	$N_{\text{Fe}} \cdot 10^{-19}$, см $^{-3}$	$n \cdot 10^{-18}$, см $^{-3}$	$\mu \cdot 10^{-4}$ (4.2 К), см 2 /В · с
1	0.0	2.4	2.25
2	0.1	3.0	2.80
3	0.5	4.8	5.10
4	1.0	4.64	9.90
5	5.0	4.81	5.95
6	40.0	6.20	2.50

Зависимости абсолютной величины термоэдс $|\alpha_0|$ от температуры для образцов 1, 2, 4, 6 представлены на рис 1. Как видно из рис. 1, кривые $|\alpha_0(T)|$ имеют минимумы. С ростом концентрации железа величина $|\alpha_0|$ уменьшается во всем температурном интервале, а минимум $|\alpha_0(T)|$

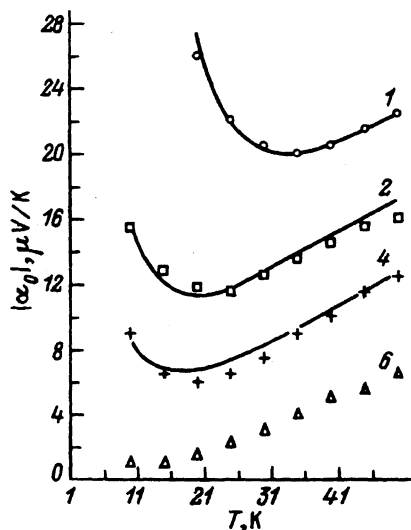


Рис. 1. Зависимость абсолютной величины термоэдс от температуры при различном содержании железа в образцах HgFeSe. 1, 2, 4, 6 — номера образцов.

Сплошные линии — результаты численного расчета: 1 — $c_{\text{H}} = 1.2$, $c_{\text{S}} = 0$, $c_{\text{R}} = 0$; 2 — $c_{\text{H}} = 5$, $c_{\text{S}} = 0$, $c_{\text{R}} = 0.1$; 4 — $c_{\text{H}} = 4$, $c_{\text{S}} = 0$, $c_{\text{R}} = 0.02$.

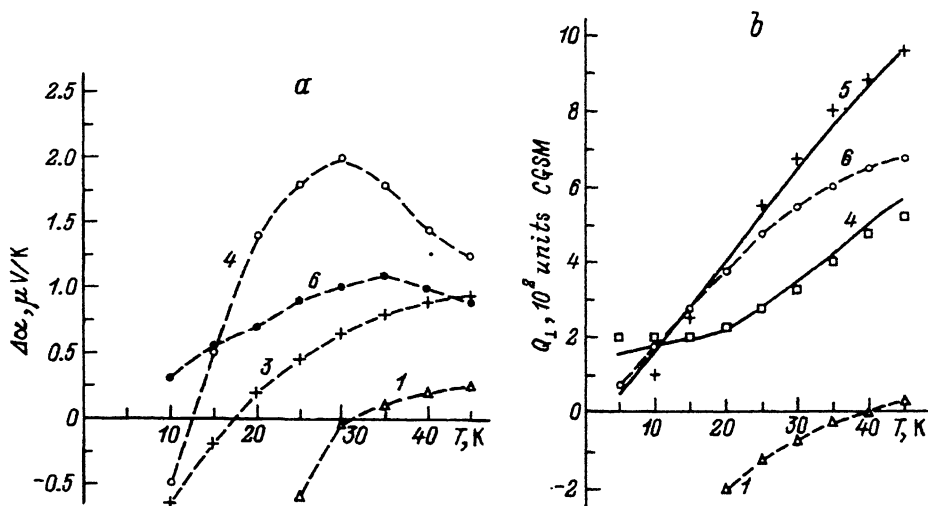


Рис. 2. Температурные зависимости коэффициентов НЭ: *a* — продольного $\Delta\alpha$, *b* — поперечного Q_{\perp} . Номера у кривых соответствуют номерам образцов. Штриховые линии проведены на глаз через экспериментальные точки.

Сплошные линии — результаты численного расчета: 4 — $c_H = 4$, $c_S = 0$, $c_R = 0.02$, 5 — $c_H = 4$, $c_S = 0$, $c_R = 0.01$.

значительно смещается в область более низких температур. Так, например, при $T = 20$ К термоэдс при переходе от образца 1 к образцу 6 уменьшается примерно в 25 раз.

Температурные зависимости продольного и поперечного коэффициентов НЭ для образцов 1, 3, 4, 6 представлены на рис. 2. Видно, что с ростом концентрации железа температура, при которой происходит смена знака коэффициентов НЭ, уменьшается. Изменение знака коэффициентов НЭ можно было бы попытаться интерпретировать как результат смены механизма рассеяния электронов: при понижении температуры фоновый механизм рассеяния уступает место рассеянию на неупорядоченно расположенных ионах примеси. Однако, как мы показали в работе [2], при концентрациях железа $N_{\text{Fe}} > 5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ определяющий вклад в релаксацию электронов проводимости вносит рассеяние на коррелированной системе заряженных ионов Fe^{3+} , которое в отличие от рассеяния на хаотически расположенных заряженных центрах приводит к положительному знаку коэффициентов НЭ. При понижении температуры степень коррелированности в расположении заряженных ионов Fe^{3+} возрастает и знак коэффициентов НЭ должен был бы оставаться положительным. На опыте же (рис. 2) наблюдается тенденция к смене знака эффекта НЭ при понижении температуры. Для объяснения неожиданного изменения коэффициентов НЭ с температурой мы предположили, что при уменьшении T начинают сказываться эффекты увлечения.

Обращает на себя внимание необычное поведение продольного коэффициента НЭ $\Delta\alpha(T)$ в области температур $T \sim 30$ К. Как видно из рис. 2, *a*, зависимость $\Delta\alpha(T)$ для кристаллов HgSe:Fe в отличие от $\Delta\alpha(T)$ для HgSe оказывается немонотонной и меняется с концентрацией атомов железа: величина максимума существенно зависит от концен-

традии железа. Наибольшая немонотонность наблюдается у образца 4, в котором, согласно [1], система ионов Fe^{3+} наиболее упорядочена. На температурной зависимости поперечного коэффициента НЭ подобных «аномалий» нет.

Хорошо известно [3], что в области низких температур существенную роль в поведении термоэлектрических и термомагнитных явлений может играть эффект увлечения электронов фононами. В определенных условиях увлечение может преобладать над электрон-примесным рассеянием и определять температурное изменение термоэффектов.

Далее приводится количественный анализ температурной зависимости термоэлектрических и термомагнитных коэффициентов НЭ для кристаллов HgSe:Fe с различным содержанием железа. Учитываются рассеяние электронов на коррелированной системе ионов Fe^{3+} и сплавном потенциале, а также различные механизмы релаксации фононов.

3. Расчет электронных составляющих термоэдс и эффектов НЭ

Будем исходить из того, что наблюдаемые на опыте зависимости термоэдс $|\alpha_0(T)|$, продольного и поперечного коэффициентов НЭ $\Delta\alpha(H, T) = \alpha(H, T) - \alpha(0, T)$ и $Q_{\perp}(H, T)$ при низких температурах определяются суммой электронной и фононной составляющих

$$\alpha_0(T) = \alpha_e(T) + \alpha_{ph}(T), \quad (1)$$

$$\Delta\alpha(H, T) = \Delta\alpha_e(H, T) + \Delta\alpha_{ph}(H, T), \quad (2)$$

$$Q_{\perp}(H, T) = Q_{\perp}^e(H, T) + Q_{\perp}^{ph}(H), \quad (3)$$

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

Согласно модели, предложенной нами в работе [1], систему ионов $\text{Fe}^{3+}-\text{Fe}^{2+}$ в HgSe:Fe можно рассматривать как бинарный сплав, состоящий из заряженных Fe^{3+} и нейтральных в решетке Fe^{2+} центров. Релаксация продольного импульса электронов осуществляется за счет взаимодействия электронов с этими центрами. В борновском приближении по рассеянию вклад в обратное время релаксации τ^{-1} вносят рассеяние на коррелированно расположенных парах ионов $\text{Fe}^{3+}-\text{Fe}^{3+}$ и на неупорядоченно распределенных парах $\text{Fe}^{2+}-\text{Fe}^{3+}$ и $\text{Fe}^{2+}-\text{Fe}^{2+}$. Для вырожденного электронного газа, который нас здесь интересует (в условиях эксперимента энергия Ферми $\varepsilon_F \gg k_B T$), кинетические коэффициенты могут быть представлены в виде [1]

$$\alpha_e(T) = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e \varepsilon_F} \left(\frac{3}{2} + D \right), \quad (4)$$

$$\Delta\alpha_e(H, T) = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e \varepsilon_F} \frac{(\omega\tau)^2 D}{[1 + (\omega\tau)^2]}, \quad (5)$$

$$Q_{\perp}^e(H, T) = -\frac{\pi^2 k_B^2 T}{3e H \varepsilon_F} \frac{\omega\tau D}{[1 + (\omega\tau)^2]}, \quad (6)$$

где $D = \varepsilon_F \left\{ \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \ln \tau(\varepsilon) - \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \ln m(\varepsilon) \right\} \Big|_{\varepsilon=\varepsilon_F}$; ω — циклотронная частота, $m(\varepsilon)$ — эффективная масса для неквадратичного закона дисперсии электронов в HgSe.

Полное время релаксации τ для комбинированного рассеяния на коррелированно распределенных ионах Fe^{3+} (τ_c) и на сплавном потенциале (τ_a) можно представить в виде

$$\tau^{-1} = \tau_c^{-1} + \tau_a^{-1}. \quad (7)$$

При вычислении времени релаксации электронов необходимо принять во внимание непараболичность зоны проводимости HgSe. Согласно [2],

$$\tau^{-1} = \frac{4\varepsilon_{Bn}(\varepsilon_g + 2\varepsilon_F)}{3\pi\hbar\varepsilon_g} \left\{ \frac{\Phi_c(y)}{y^3} + \Lambda \left[2 \left(\frac{N_0}{N_+} \right) \frac{\Phi_{+0}}{y} + \Lambda y \frac{N_0}{2N_+} \right] \right\}.$$

Здесь $y = k_F/k$, ε_{Bn} — боровская энергия, N_+ , N_0 — концентрации заряженных (Fe^{3+}) и нейтральных (Fe^{2+}) центров,

$$\Phi_c(k_F) = 2 \int_0^1 \frac{x^3 S(2k_F x)}{[x^2 + b_s^{-2}]^2} dx, \quad (8)$$

$$\Phi_{+0}(k_F) = 1 - b_s^{-2} \ln(1 + b_s^2), \quad b_s = 2k_F r_s,$$

r_s — радиус экранирования. Безразмерный параметр Λ есть отношение констант взаимодействия электронов с нейтральными (Fe^{2+}) и заряженными (Fe^{3+}) центрами. Согласно оценке [1], параметр $\Lambda \cong 0.1 \div 0.2$, что соответствует величине потенциала $\Delta U = (0.32 \div 0.35)$ эВ, на котором реализуется сплавное рассеяние.

Структурный фактор $S(q)$, входящий в выражение (8), описывает кулоновские корреляции в системе заряженных примесей. Поскольку структура и свойства рассматриваемой системы определяются в основном резко изменяющейся отталкивающей частью потенциала ион-ионного взаимодействия [1], при интерпретации данных эксперимента этот потенциал можно с достаточной точностью аппроксимировать потенциалом твердых сфер. Параметр упаковки η , определяющий степень корреляции в расположении твердых сфер, выражается через диаметр твердой сферы d следующим образом: $\eta = d^3 \pi N_+ / 6$. Для сильно коррелированной системы (кулоновской жидкости) $\eta = 0.45$. Неравенство $\eta \ll 1$ соответствует слабо коррелированному газу.

Следует подчеркнуть, что функция распределения, описывающая пространственное расположение частиц с потенциалом $U(\mathbf{r})$, в приближении твердых сфер не содержит явно температуру. Эта функция зависит только от плотности системы частиц. Поэтому возникает вопрос: каким образом в расчете температурной зависимости кинетических коэффициентов учесть изменение корреляций в системе заряженных центров Fe^{3+} с температурой? Возможны два пути. Первый

справедлив для систем не очень высокой плотности и позволяет представить решение для полной функции распределения, характеризующей корреляцию между атомами 1 и 2, в виде функции Майера, которая явно содержит температуру [1]. Однако на этом пути мы сталкиваемся с большими вычислительными трудностями при расчете термомангнитных коэффициентов. Альтернативный путь состоит в использовании приближения «мягких сфер», т.е. некоторой аппроксимации, позволяющей в рамках разумных приближений учесть изменение диаметра корреляционной сферы с температурой [4]. Температурное изменение диаметра сферы $d(T)$ может быть получено в результате разложения самосогласованного потенциала $U(\mathbf{r})$, ответственного за корреляционные свойства системы ионов Fe^{3+} , вблизи точки r_{cr} , где он обращается в нуль [1]. Ограничиваясь квадратичными членами по смещению Δr и используя условие $\Delta U(\mathbf{r}) < (3/2)k_B T$ [4], можно величину $d(T)$ представить в виде

$$d(T) = d_0 \left(1 - \frac{\Delta r(T)}{d_0} \right), \quad (9)$$

где

$$\frac{\Delta r(T)}{d_0} = \beta_1 \left[(1 + \beta_2 T)^{1/2} - 1 \right].$$

Здесь d_0 — диаметр твердой сферы при $T = 0$, β_1, β_2 — параметры, зависящие в общем случае от концентрации ионов Fe^{3+} и радиуса экранирования. Явное выражение для параметров β_1 и β_2 может быть найдено в простейшем приближении линейной цепочки, состоящей из ионов Fe^{2+} и Fe^{3+} с ближним порядком.

Мы будем рассматривать β_1 и β_2 как параметры теории и значения их найдем из сопоставления теоретически рассчитанных и экспериментально определенных зависимостей подвижности электронов $\mu(T)$ для образцов с различным содержанием железа. Результаты такой процедуры представлены на рис. 3. Видно, что используя всего два

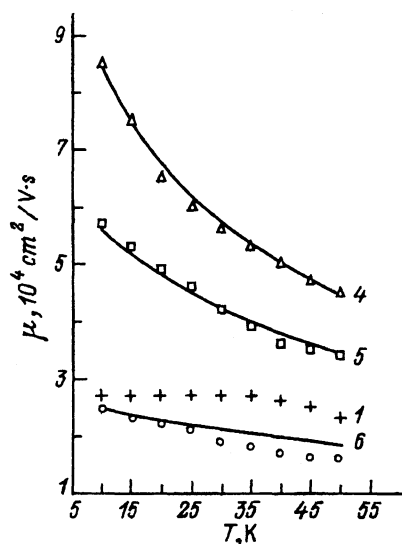


Рис. 3. Зависимости подвижности электронов от температуры в образцах HgSe , $n = 2.4 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ (1) и HgSeFe (4-6). N_{Fe} , 10^{19} см^{-3} : 4 — 1, 5 — 5, 6 — 40.

Сплошные линии — результат расчета подвижности в модели «мягких» сфер ($\beta_1 = 0.02, \beta_2 = 3$).

параметра $\beta_1 = 0.02$ и $\beta_2 = 3$, удается в рамках описанного приближения получить хорошее согласие рассчитанных и экспериментальных значений подвижности для образцов с различным содержанием железа. Отклонения экспериментальных точек от рассчитанной кривой для концентрации $N_{Fe} = 4 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$ (см. рис. 3) обусловлены, по-видимому, дополнительным рассеянием электронов на межузельных атомах железа, которые обычно имеются при столь высоком содержании железа в образце. Использование рассмотренного выше приближения для описания $\mu(T)$ существенно упрощает анализ экспериментальных данных по температурной зависимости термоэффектов в HgSe:Fe .

Если в выражении для времени релаксации $\tau(\varepsilon)$ учесть и рассеяние на акустических фононах, то для $D(\varepsilon_F)$ имеем [2]

$$D = \frac{(\varepsilon_g + 2\varepsilon_F)}{2(\varepsilon_g + \varepsilon_F)} \left(\frac{K_c + K_a - K_{ph}}{K_b + K_{ph}} \right) - \frac{4\varepsilon_F}{(\varepsilon_g + \varepsilon_F)}, \quad (10)$$

где

$$K_a = \Lambda \left[2 \left(\frac{N_0}{N_+} \right)^{1/2} \left(\Phi_{+0}(y) - \frac{\partial \Phi_{+0}}{\partial y} \Big|_{y=1} \right) - \frac{N_0}{2N_+} \Lambda \right],$$

$$K_b = \Phi_c + \Lambda \left[2 \left(\frac{N_0}{N_+} \right)^{1/2} \Phi_{+0} + \frac{\Lambda N_0}{2N_+} \right], \quad K_c = 3\Phi_c - \frac{\partial \Phi_c}{\partial y} \Big|_{y=1},$$

$$K_{ph} = \frac{3\varepsilon_1^2 m_n k_B T_F}{4\hbar^2 \varepsilon_{Bn} \rho s^2}; \quad \varepsilon_{Bn} = \frac{m_n e^4}{2\hbar^2 \kappa^2}.$$

Здесь ε_1 — константа деформационного потенциала, ρ — плотность кристалла, m_n — эффективная масса у дна зоны, s — скорость звука в HgSe .

При $N_{Fe} < 4.5 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ вклад сплавного рассеяния пренебрежимо мал, а система ионов Fe^{3+} является полностью разупорядоченной [$S(q) = 1$]. В этом случае в формуле (10) можно опустить слагаемое, описывающее сплавное рассеяние, и произвести следующую замену:

$$\Phi_c(k_F) \rightarrow \Phi_{BH} = \ln(1 + b_s^2) - \frac{b_s^2}{1 + b_s^2},$$

$$\tau_c \rightarrow \tau_{BH} = \frac{3\pi\hbar}{4\varepsilon_{Bn} \Phi_{BH}(k_F)},$$

где Φ_{BH} и τ_{BH} — величины, соответствующие рассеянию на хаотической системе заряженных примесей согласно теории Брукса-Херринга.

Анализ, выполненный нами в работе [2], показал, что при увеличении степени корреляции в системе ионов Fe^{3+} зависимость времени релаксации от энергии $\tau(\varepsilon)$ в окрестности уровня Ферми претерпевает качественное изменение, которое должно сказаться как на концентрационной, так и на температурной зависимости кинетических коэффициентов.

Выражения (4)–(6) и (10) позволяют проанализировать зависимости α_e , $\Delta\alpha(H)$ и $Q_{\perp}(H)$ от температуры и концентрации железа в образце.

4. Фононные компоненты термоэдс и эффектов НЭ

Обратимся теперь к фононным составляющим кинетических коэффициентов,¹ которые можно записать в виде [3]

$$\alpha_{ph}(T) = - \left(\frac{k_B}{e} \right) A_{ph}(T), \quad (11)$$

$$Q_1^{ph}(H, T) = \frac{\pi^2 k_B^2 T \omega \tau}{3eH \varepsilon_F^2 [1 + (\omega\tau)^2]} A_{ph}(\varepsilon_F) G, \quad (12)$$

где

$$G = \varepsilon_F^2 \left[\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \ln \tau(\varepsilon) \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \ln A_{ph}(\varepsilon) \right] \Big|_{\varepsilon = \varepsilon_F},$$

$$A_{ph} = \frac{2m(\varepsilon)s^2}{k_B} \sum_{\mathbf{k}'\mathbf{q}} W(\mathbf{q}) \tau_{ph}(\mathbf{q}) \frac{dN_{\mathbf{q}}^0}{dT} \left[1 - \frac{\mathbf{k}\mathbf{k}'}{k^2} \right] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{k}' - \mathbf{k}}.$$

Для вычисления вклада от эффектов увлечения необходимо знать явный вид функции $A_{ph}(T)$, который определяется механизмом взаимодействия электронов с фононами $W(\mathbf{q})$ и временем релаксации фононов τ_{ph} . При интерпретации экспериментальных данных мы рассмотрим следующие механизмы релаксации длинноволновых фононов [3]: механизм релаксации Херринга

$$\tau_{pH}^{-1}(\mathbf{q}) = q^2 (k_B T)^3 / \rho \hbar^2 s^3 = c_H \Lambda_H q^2, \quad (13)$$

механизм релаксации Саймонса

$$\tau_{pS}^{-1}(\mathbf{q}) = q(\hbar/\rho)(k_B T/\hbar s)^4 = c_S \Lambda_S q, \quad (14)$$

рассеяние фононов на границах образца

$$\tau_{phb}^{-1}(\mathbf{q}) = s/L \quad (15)$$

и, наконец, рассеяние фононов на точечных дефектах (механизм Рэлея), которое, как показывает анализ экспериментальных данных (рис. 1), играет, по-видимому, существенную роль при увеличении содержания атомов железа в образце

$$\tau_{phR}^{-1} = \frac{N_i a^3 q^4}{4\pi N s \hbar^4} \left[\frac{\Delta M}{M} \right]^2 = c_R \Lambda_R q^4. \quad (16)$$

Здесь L — размер образца, N_i и N — концентрации примесных атомов и полного числа узлов в решетке, a — расстояние между ближайшими атомами примеси, ΔM различие масс примесного атома и атома решетки, c_H , c_S , c_R — свободные параметры теории.

¹ Формулу для продольного эффекта НЭ мы не выписываем, ибо она получается простым обобщением формулы (11) для $\alpha_{ph}(T)$.

Взаимодействие электронов с акустическими фононами рассмотрим через деформационный потенциал. Для $W(q)$ имеем

$$W(q) = \frac{\pi \varepsilon_1^2 q}{\rho s} = W_0 q. \quad (17)$$

Выполнив несложные вычисления величины A_{ph} , находим

$$A_{ph} = \frac{(m s \varepsilon_1)^2}{4\pi T k_B^2 \hbar \rho k_F^3} \int_0^{2k_F} \frac{q^5 \left(-\frac{\partial N_q}{\partial \omega}\right)}{\nu_{phe} + \nu_{phph}} dq. \quad (18)$$

Здесь N_q — функция распределения фононов, а ν_{phe} и ν_{phph} — частота фонон-электронной и полная частота релаксации длинноволновых фононов.

5. Результаты численного расчета

Формулы (4)–(6), (10), (11) с учетом (13)–(18) позволяют количественно проанализировать температурные зависимости термоэлектрических и термомагнитных эффектов для области температур, где не только диффузионные составляющие существенны, но и электрон-фононное увлечение играет важную роль. В расчете были использованы следующие значения параметров: $m = 0.067m_0$ (m_0 — масса свободного электрона), $\varepsilon_1 = 0.67$ эВ [5], $s = 3.5 \cdot 10^5$ см/с, $a = 6.087 \cdot 10^{-8}$ см, $\kappa = 25$.

Результаты численного расчета термоэдс для образцов 1,2,4,6 изображены на рис. 1 сплошными линиями. Как показал анализ, вполне удовлетворительное описание зависимости термоэдс $|\alpha_0(T)|$ для кристалла HgSe удастся достичь, если учесть лишь механизм релаксации длинноволновых фононов Херринга или Саймонса. Однако это приближение оказывается совершенно недостаточным для описания температурной зависимости $|\alpha_0(T)|$ в случае кристаллов HgSe, легированных железом. Наблюдаемое на опыте значительное смещение минимума $|\alpha_0(T)|$ в области низких температур при увеличении содержания железа в HgSe:Fe удается объяснить, только если ввести в рассмотрение рассеяние фононов на точечных дефектах (механизм Рэлея). Точечными дефектами в HgSe:Fe служат двухвалентные ионы железа. В области еще более низких температур становится существенным рассеяние фононов на границах образца. На кривых $|\alpha_0(T)|$ должны вследствие этого наблюдаться максимумы. Такие максимумы наблюдали авторы [6], измерявшие термоэдс кристаллов HgSe с концентрацией электронов $n \sim 10^{18}$ см⁻³.

Мы не будем здесь подробно останавливаться на анализе роли эффектов увлечения в формировании температурной зависимости продольного эффекта НЭ, ибо такой расчет аналогичен и не намного сложнее соответствующего расчета термоэлектродвижущей силы $|\alpha_0(T)|$. Для этого эффекта также получено вполне удовлетворительное согласие с экспериментом. Как показал анализ, наблюдаемое на опыте немонотонное изменение продольного коэффициента НЭ с температурой не

может быть объяснено, если оставаться в рамках теории увлечения и рассмотренных выше механизмов рассеяния электронов проводимости. Однако проблема физической природы этой аномалии выходит за рамки настоящей работы. Более подробно этот вопрос мы рассмотрим в одной из следующих работ.

Обратимся теперь к анализу температурной зависимости поперечного коэффициента НЭ $Q_{\perp}(T)$. Предварим расчет двумя замечаниями. Во-первых, из температурной зависимости подвижности $\mu(T)$ (рис. 3) следует, что в интервале температур $10 < T < 40$ К подвижность электронов HgSe не зависит от температуры. Это свидетельствует о доминирующей роли рассеяния электронов на хаотически распределенных заряженных центрах. Сильная температурная зависимость $\mu(T)$, которая имеет место в кристаллах HgSe, легированных железом, в указанном интервале температур, обусловлена, как показано в [1], рассеянием на коррелированной системе заряженных примесей. Во-вторых, как показал приведенный выше анализ коэффициента термоэдс $\alpha_0(T)$, основной вклад в эффекты увлечения в актуальном интервале температур вносят фонон-фононное рассеяние по Херрингу и рассеяние фононов на точечных дефектах. Этими двумя механизмами мы и ограничим наше рассмотрение. С учетом сказанного представим коэффициент A_{ph} в следующем виде:

$$A_{ph}(\varepsilon) = \frac{2m^2(\varepsilon)s^2W_0}{k_B\hbar^2} \sum_q \frac{dN_q}{dT} \left[-\frac{kq \cos \vartheta}{k^2} \right] \frac{\delta \left(kq \cos \vartheta + \frac{q^2}{2} \right)}{q(\Lambda_H + \Lambda_{Rq^2})}. \quad (19)$$

Переходя в формуле (19) от суммирования к интегрированию, имеем

$$A_{ph}(\varepsilon) = \frac{2\pi m^2(\varepsilon)W_0 k_B^2 T^2}{\hbar^5 k^3(\varepsilon)s\Lambda_H} \int_0^{x_{2k}} \frac{e^x x^3 dx}{(e^x - 1)^2 (1 + \xi_{RH} x^2)}. \quad (20)$$

Здесь $x = \hbar sq/k_B T$, $x_{2k} = 2\hbar sk/k_B T$, $\xi_{RH} = \frac{(k_B T)^2}{(\hbar s)^2} \frac{\Lambda_R}{\Lambda_H}$. Таким образом, численный расчет величины $Q_{\perp}^{ph}(T)$ становится возможным, если будет найдена производная по энергии от выражения (20) для A_{ph} . Выполнив несложные вычисления, получаем

$$\varepsilon_F \frac{A'_{ph}(\varepsilon_F)}{A_{ph}(\varepsilon_F)} = -\frac{3\varepsilon_g^2 + 4\varepsilon_F \varepsilon_g + 4\varepsilon_F^2}{2(\varepsilon_g + 2\varepsilon_F)(\varepsilon_g + \varepsilon_F)} + \frac{(\varepsilon_g + 2\varepsilon_F) \tilde{J}'}{2(\varepsilon_g + \varepsilon_F) J}, \quad (21)$$

где

$$\tilde{J}' = \frac{x_{2k_F}^4 \exp x_{2k_F}}{(\exp x_{2k_F} - 1)^2 (1 + \xi_{RH} x^2)},$$

$$J = \int_0^{x_{2k_F}} \frac{e^x x^3 dx}{(e^x - 1)^2 (1 + \xi_{RH} x^2)}.$$

Выражения (6), (12), (20), (21) позволяют численно рассчитать поперечный эффект НЭ для указанных выше механизмов рассеяния электронов при учете эффектов увлечения. Результаты такого расчета

представлены на рис. 2, *b* сплошными линиями. Качественно поведение поперечного эффекта НЭ при изменении температуры может быть объяснено следующим образом. Знак эффектов НЭ определяется зависимостью времени релаксации электронов от энергии. Эффекты НЭ имеют положительный знак при рассеянии электронов на акустических фононах [3] и, как было показано в [2], при рассеянии на коррелированной системе заряженных доноров Fe^{3+} . Для рассеяния электронов на неупорядоченной системе ионов примеси знак термомагнитных эффектов отрицателен.

Посмотрим теперь, как влияет возрастание температуры на эффект НЭ. Поскольку степень хаотизации в системе коррелированных ионов возрастает с увеличением температуры, очевидно, что абсолютная величина эффекта НЭ должна уменьшаться. Рассеяние на акустических фононах при понижении температуры ниже $T < 30$ К, где существенны эффекты увлечения, несколько ослабевает [3,6]. Оно начинает возрастать при достаточном увеличении температуры, когда вклад эффектов увлечения в термоэффекты становится пренебрежимо малым. Поэтому результирующий знак эффекта НЭ и его величина определяются конкуренцией перечисленных механизмов рассеяния электронов. Так, для образца HgSe с содержанием железа $N_{Fe} = 10^{19} \text{ см}^{-3}$ степень корреляции в системе ионов Fe^{3+} значительно возрастает при понижении температуры, что должно приводить к росту поперечного эффекта НЭ. Вместе с тем при $T < 20$ К становятся существенными и эффекты увлечения (рис. 1), которые, как следует из формулы (12), приводят к уменьшению величины Q_{\perp} . В результате коэффициент поперечного эффекта НЭ в интервале температур (10÷25) К оказывается не зависящим от температуры. При $T > 30$ К взаимодействие электронов с акустическими фононами приводит к росту коэффициента НЭ Q_{\perp} с температурой.

Иная ситуация реализуется в образце со значительно бóльшим содержанием железа $N_{Fe} = 4 \cdot 10^{20} \text{ см}^{-3}$, у которого эффекты увлечения начинают сказываться при более низких температурах ($T < 10$ К), чем у образца с $N_{Fe} = 10^{19} \text{ см}^{-3}$. Кроме того, при столь высоком содержании железа становится существенным сплавное рассеяние. Поэтому на опыте наблюдается увеличение коэффициента НЭ при возрастании температуры, а при низких температурах эффект не насыщается, как у образца с $N_{Fe} = 10^{19} \text{ см}^{-3}$.

Таким образом, проведенный анализ температурной зависимости термоэффектов для кристаллов HgSe, легированных атомами железа, позволил оценить роль эффектов увлечения электронов, а также их вклад в термоэлектрические и термомагнитные коэффициенты при низких температурах, где они являются доминирующими и в значительной мере определяют температурное поведение эффектов. Хорошее согласие теоретически рассчитанных значений термокоэффициентов с данными опыта для кристаллов HgSe:Fe позволяет думать, что развитая теория правильно учитывает как особенности рассеяния электронов на системе коррелированных ионов Fe^{3+} , так и основные механизмы увлечения электронов фононами в кристаллах HgSe:Fe.

6. Заключение

Удалось объяснить качественно и количественно обнаруженные на опыте необычные низкотемпературные зависимости термоэлектрических и термомагнитных коэффициентов для кристаллов HgSe:Fe при различном содержании железа в них. Показано, что немонотонные температурные зависимости термоэдс в нулевом магнитном поле $\alpha_0(T)$ и коэффициентов НЭ $\Delta\alpha(T, H)$, $Q_{\perp}(T, H)$ для HgSe:Fe в области низких температур обусловлены эффектами увлечения, которые становятся преобладающими при этих температурах. Несколько неожиданным здесь является то, что эффекты увлечения проявляются при столь высоких концентрациях примесей и электронов. При увеличении содержания железа в кристаллах HgSe важную роль в эффектах увлечения начинает играть рассеяние на точечных дефектах (механизм рассеяния Рэлея).

Работа выполнена при поддержке Российского фонда Фундаментальных исследований (грант № 2456).

Список литературы

- [1] И.Г. Кулеев, И.И. Ляпилин, И.М. Пидильковский. ЖЭТФ, **105**, 1662 (1992).
- [2] И.Г. Кулеев, И.И. Ляпилин, И.М. Пидильковский. ЖЭТФ, **103**, 1447 (1993).
- [3] И.М. Пидильковский. Термомагнитные явления в полупроводниках. М.: Наука (1960).
- [4] P. Protopapas, N.A.D. Parlee. High Temp. Sci., **6**, 1 (1974).
- [5] S.L. Lechoczky, J.G. Broerman, D.A. Nelson, C.R. Whitsett. Phys. Rev. B, **9**, 1598 (1974).
- [6] С.А. Алиев, Л.Л. Коренблит, С.С. Шалыт. ФТТ, **8**, 705 (1966).

Редактор Т.А. Полянская
