

АНОМАЛИИ В КИНЕТИЧЕСКИХ КОЭФФИЦИЕНТАХ
ПРИ ТОПОЛОГИЧЕСКОМ ПЕРЕХОДЕ ЛИФШИЦА
ТИПА «ОБРАЗОВАНИЕ НОВОЙ ПОЛОСТИ»

В. И. Белицкий

В модели двух простых зон исследованы особенности в термоэдс α и проводимости σ в окрестности электронного топологического перехода Лифшица [1] типа «образование новой полости поверхности Ферми». Получены выражения для α и σ в окрестности перехода при рассеянии на примесях как в «чистом» ($\tau^{-1} \ll T$), так и в «грязном» ($\tau^{-1} \gg T$) случаях, где τ — характерное время релаксации носителей, T — температура. Показано, что характер аномалий качественно различен в случаях сильного и слабого междозонного рассеяния носителей. Полученные выражения при учете междозонного рассеяния качественно хорошо описывают имеющиеся экспериментальные данные.

1. В последние годы уделяется большое внимание как теоретическому [2-7], так и экспериментальному [8-15] изучению особенностей в поведении кинетических коэффициентов металлов и сплавов в окрестности электронного топологического перехода (ЭТП). Согласно известной работе И. М. Лифшица [1], кинетические коэффициенты в окрестности ЭТП должны иметь особенность вида $|z|^{±1/2}$, где z — непрерывно изменяющийся параметр, характеризующий близость системы к ЭТП и обращающийся в нуль в точке перехода. Изменение параметра перехода z может быть достигнуто за счет легирования или деформации образца. По характеру зависимостей кинетических коэффициентов от параметра z в случае рассматриваемого в настоящей работе ЭТП типа «образование новой полости» можно судить о типе носителей в возникающей полости [8], а также непосредственно определять ее энергетическое положение [9].

В [2] методом теории псевдопотенциала исследован ЭТП в сплавах $\text{Li}_{1-x}\text{Mg}_x$. При этом было обращено внимание на то, что особенности в кинетических коэффициентах связаны с особенностью во времени релаксации τ . Показано, что в зависимости от величины параметра z наиболее сильная особенность имеется в термоэдс $\alpha \sim |z|^{-1/2}$. Особенность в проводимости $\sigma \sim |z|^{1/2}$.

В [8] рассмотрен топологический переход типа «разрыв перемычки» и получены выражения для термоэдс и электропроводности в окрестности ЭТП при рассеянии носителей на точечных примесях в «чистом» ($\tau^{-1} \ll T$) и «грязном» ($\tau^{-1} \gg T$) случаях. Показано, что особенности в кинетических коэффициентах сглаживаются благодаря температурному размытию и за счет рассеяния.

В предлагаемой работе рассматривается поведение электропроводности и термоэдс в окрестности ЭТП типа «образование новой полости». На рис. 1 показаны различные возможные варианты такого типа ЭТП, реализующиеся, например, в висмуте и его сплавах. В модели двух простых зон с эффективными массами $m_1 \sim m_2$ получены выражения для σ и α в чистом и грязном случаях для ЭТП типа I, изображенного на рис. 1, а. Полученные выражения обобщаются на переходы типа II—IV. Показано, что определяющую роль в зависимости σ и α от параметра перехода z

играет междузонное рассеяние носителей, с учетом которого результаты качественно хорошо описывают экспериментальные данные. В заключение коротко рассмотрен случай, когда междузонное рассеяние носителей пренебрежимо мало. Полученные при этом выражения для σ и α качественно отличаются от соответствующих выражений в случае сильного междузонного рассеяния и не объясняют имеющихся экспериментальных зависимостей.

2. Для вычисления кинетических коэффициентов воспользуемся температурной техникой. Нас интересует поведение проводимости и термоэдс в окрестности ЭТП, поэтому будем считать, что в рассматриваемом интервале значений химического потенциала μ_1 выполняется соотношение $|\mu_1 - \varepsilon_0| = |\mu_2| \ll \varepsilon_0$. Смысл используемых обозначений ясен из рис. 1, а. Величина μ_2 является в данном случае параметром топологического перехода. При этом $\mu_2 > 0$ в области большей связности поверхности Ферми (ПФ) и $\mu_2 < 0$ в области меньшей связности ПФ. Полагаем, что химпотенциал находится далеко от области предполагаемого пересечения зоны 1 и зоны 2. Электронная функция Грина в двухзонной модели

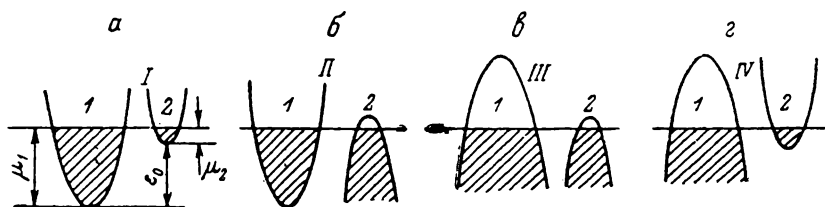


Рис. 1. Рассматриваемые варианты электронного топологического перехода типа «образование новой полости поверхности Ферми».

является, вообще говоря, матрицей 2×2 . Однако можно показать, что недиагональные элементы этой матрицы существенны только вблизи области пересечения зон и при наложенных выше ограничениях на область значений μ_1 диагонализация приводит к малым поправкам $\sim \tau^{-1}/(\tau \varepsilon(\mathbf{p}))$ (где $\varepsilon(\mathbf{p}) = \varepsilon_2(\mathbf{p}) - \varepsilon_1(\mathbf{p}) + \varepsilon_0$, $\varepsilon_i(\mathbf{p})$ — энергия в i -й зоне, отсчитываемая от ее дна).

Согласно [3, 17], для кинетических коэффициентов σ и $\beta = \alpha \sigma$ имеем

$$\begin{pmatrix} \sigma_i \\ \beta_i \end{pmatrix} = \frac{e}{4\pi T^2} \int v_i^2 \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{2eT}{\omega} \right) \frac{d\omega}{\text{ch}^2 \frac{\omega}{2T}} \text{Im}^2 G_i^R(\omega, \mathbf{p}, \mu_i), \quad (1)$$

где i — номер зоны, $G_i^R(\omega, \mathbf{p}, \mu_i)$ — аналитически продолженная в верхнюю полуплоскость комплексной частоты температурная функция Грина

$$G_i^{-1}(\omega_n, \mathbf{p}) = i\omega_n - \frac{p^2}{2m_i} + \mu_i - i \text{Im} \Sigma_i(\omega_n, \mu_i), \quad (2)$$

$$\omega_n = 2\pi T (n + 1/2).$$

Получим выражения для собственно-энергетической части. Будем считать, что в области не слишком высоких температур носители в основном рассеиваются на примесях. Рассеяние для простоты предполагается точечным и изотропным. При этом учитываются как внутризонные, так и междузонные процессы. Амплитуды внутризонных и междузонных переходов полагаются величинами одного порядка. Система уравнений Дайсона для функций Грина первой и второй зон

$$G_i^R = G_i^{R(0)} + G_i^{R(0)} \Sigma_i^R G_i^R, \quad \Sigma_i^R = \Sigma_{i1}^R + \Sigma_{i2}^R \quad (3)$$

изображена в графическом виде на рис. 2. При этом мы оставили только те графики, которые дают основной вклад в рассматриваемой области

значений хипотенциала и при $\epsilon_0 \tau \gg 1$. Поясним, каким образом проводился отбор графиков. Поскольку $|\mu_2| \ll \epsilon_0$, а амплитуды междузонных и внутризонных переходов (стоящие в вершинах) по величине одного порядка, то $\text{Im} \Sigma_{i2}^R \ll \text{Im} \Sigma_{i1}^R$. При этом в перенормировку функции Грина G_2^R в Σ_{i2}^R основной вклад дают процессы междузонного рассеяния. Жирная электронная линия в Σ_{i2}^R соответствует функции Грина второй зоны, перенормированной только за счет междузонных переходов. Перенормировка G_2^R в Σ_{i2}^R за счет процессов внутризонного рассеяния во второй зоне приводит к поправкам, малым по параметру μ_2/ϵ_0 по сравнению с поправками за счет междузонного рассеяния. Поэтому мы можем отбросить графики более высокого порядка как с пересекающимися, так и с непересекающимися примесными линиями, в которых все внутренние электронные линии относятся ко второй зоне. Перенормировка электронной линии первой зоны в Σ_{i1}^R за счет наиболее существенных процессов внутризонных переходов в первой зоне приводит к поправкам, малым по параметру $(\epsilon_0 \tau)^{-1}$. Вклад графиков с пересекающимися примесными линиями, в которых есть одна или более внутренняя электронная линия первой зоны, мал по параметрам $(\epsilon_0 \tau)^{-1}$ и μ_2/ϵ_0 . Малость по параметру $(\epsilon_0 \tau)^{-1}$ связана с тем, что интегрирование по внутренним импульсам не может быть про-

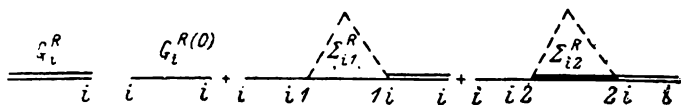


Рис. 2. Система уравнений Дайсона для функций Грина 1 и 2 зон.

ведено независимо [14]. Малость по параметру μ_2/ϵ_0 связана с малостью вклада внутризонных процессов во второй зоне и междузонных переходов из зоны 1 в зону 2.

В дальнейшем мы рассмотрим поведение кинетических коэффициентов в окрестности ЭТП как в чистом ($\tau^{-1} \ll T$), так и в грязном ($\tau^{-1} \geq T$) случаях. В связи с этим важно подчеркнуть, что, несмотря на малость $\text{Im} \Sigma_{i2}^R$ по сравнению с $\text{Im} \Sigma_{i1}^R$, именно величина $\text{Im} \Sigma_{i2}^R$ приводит к сильной особенности в термоэдс (и более слабой особенности в проводимости) и именно перенормировка линии G_2^R в Σ_{i2}^R (за счет междузонных процессов) наиболее существенна в грязном случае. Сильное влияние $\text{Im} \Sigma_{i2}^R$ на термоэдс связано с тем, что хотя $\text{Im} \Sigma_{i2}^R \ll \text{Im} \Sigma_{i1}^R$, тем не менее зависящий от частоты член в $\text{Im} \Sigma_{i2}^R$ в области большей связности ПФ в $(\epsilon_0/\mu_2)^{1/2}$ раз больше соответствующего члена в $\text{Im} \Sigma_{i1}^R$.

Решение системы уравнений для $\text{Im} \Sigma_{i1}^R$ и $\text{Im} \Sigma_{i2}^R$ приводит к выражениям

$$\left. \begin{aligned} \text{Im} \Sigma_1^R &= \frac{1}{2\tau_1} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\omega}{\epsilon_0}\right) + \frac{1}{2\sqrt{2} \tau_2} \left\{ \frac{\omega + \mu_2}{\epsilon_0} + \left[\frac{(\omega + \mu_2)^2}{\epsilon_0^2} + \frac{1}{4(\tau_3 \epsilon_0)^2} \right]^{1/2} \right\}^{1/2}, \\ \text{Im} \Sigma_2^R &= \frac{1}{2\tau_3} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{\omega}{\epsilon_0}\right) + \frac{1}{2\sqrt{2} \tau_4} \left\{ \frac{\omega + \mu_2}{\epsilon_0} + \left[\frac{(\omega + \mu_2)^2}{\epsilon_0^2} + \frac{1}{4(\tau_3 \epsilon_0)^2} \right]^{1/2} \right\}^{1/2}, \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

где введены следующие обозначения

$$\begin{aligned} \tau_1^{-1} &= m_1^2 n V_1^2 (2\epsilon_0)^{1/2} / \pi, & \tau_2^{-1} &= m_2^2 n M_1^2 (2\epsilon_0)^{1/2} / \pi, \\ \tau_3^{-1} &= m_1^2 n M_2^2 (2\epsilon_0)^{1/2} / \pi, & \tau_4^{-1} &= m_2^2 n V_2^2 (2\epsilon_0)^{1/2} / \pi, \end{aligned}$$

$V_i (M_i)$ — модуль амплитуды внутризонного (междузонного) рассеяния носителей в i -й зоне, n — концентрация примесей. Из (4) видно, что при $\tau^{-1} \geq T$ становится существенным член $(2\tau\epsilon_0)^{-2}$ в квадратных скобках. Учет любых других графиков в уравнениях Дайсона приводит к появлению в (4) малых по $(\epsilon_0 \tau)^{-1}$ и μ_2/ϵ_0 поправок.

3. Поскольку собственно энергетическая часть не зависит от импульса, интегрирование по импульсам в (1) осуществляется в общем виде

$$\left(\frac{\tau_i}{\beta_i}\right) = \frac{em_i^{1/2}}{4\pi^2 T^2} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{2eT}{\omega}\right) \frac{d\omega}{ch^2 \frac{\omega}{2T}} \frac{[\omega + \mu_i + [(\omega + \mu_i)^2 + (1m \Sigma_i^R)^2]^{1/2}]}{|1m \Sigma_i^R|}. \quad (5)$$

Рассмотрим сначала чистый случай $\tau^{-1} \ll T$. Отбрасывая несущественный при этом член $(2\tau\epsilon_0)^{-2}$ в (4) и интегрируя по частоте в (5), получаем следующие выражения для проводимости и термоэдс при ЭТП типа 1

$$\sigma = \sigma_0 \begin{cases} 1 - (\tau_1 \tau_2) (\mu_2/\epsilon_0)^{1/2}, & \mu_2 \geq T, \\ 1 - 0.5 (\tau_1 \tau_2) (T/\epsilon_0)^{1/2} (1 + 0.67\mu_2 T), & |\mu_2| \ll T, \\ 1 - 0.89 (\tau_1 \tau_2) (T/\epsilon_0)^{1/2} \exp(\mu_2 T), & \mu_2 \leq -T, \end{cases} \quad (6a)$$

$$\quad (6b)$$

$$\alpha = \alpha_0 \begin{cases} 0.5 (1 + (\tau_1^2/\tau_2^2)) - 0.25 (\tau_1 \tau_2) (\epsilon_0/\mu_2)^{1/2}, & \mu_2 \geq T, \\ -0.15 (\tau_1 \tau_2) (\epsilon_0/T)^{1/2} (1 + 0.26\mu_2 T), & |\mu_2| \ll T, \\ 0.5 + 0.13 (\tau_1 \tau_2) (\epsilon_0/T)^{1/2} (\mu_2 T) \exp(\mu_2 T), & \mu_2 \leq -T, \end{cases} \quad (7a)$$

$$\quad (7b)$$

$$\quad (7c)$$

где ¹

$$\sigma_0 = e^2 m_1^{1/2} \tau_1 (2\epsilon_0)^{3/2} / (3\pi^2), \quad (8)$$

$$\alpha_0 = -\pi^2 T / (3 |e| \epsilon_0). \quad (9)$$

Полученные выражения (6) и (7) соответствуют парциальному вкладу в проводимость и термоэдс носителей первой зоны. Вычисление парциальных величин для второй зоны показывает, что в окрестности ЭТП при $|\mu_2| \ll \epsilon_0$, где справедливы выражения (6) и (7), вклад носителей второй зоны пренебрежимо мал (в области большей связности ПФ при $\mu_2 \geq T$ вклад второй зоны в σ мал по параметру $(\mu_2/\epsilon_0)^{3/2}$, а в α — по параметру $(\mu_2/\epsilon_0)^{1/2}$).

Из (6) видно, что при $T=0$ К в зависимости проводимости от μ_2 имеется излом, который замыкается при конечной температуре (рис. 3). Со стороны области меньшей связности ПФ при $\mu_2 \leq -T$ поправки к проводимости экспоненциально малы, и с уменьшением μ_2 она быстро выходит на нормальное поведение. В области большей связности ПФ при $T \leq \mu_2 \ll \epsilon_0$ проводимость убывает корневым образом с ростом μ_2 . Более сильная особенность имеется в термоэдс (7). При приближении к переходу со стороны отрицательных μ_2 термоэдс, отрицательная вдали от перехода, начинает расти и обращается в нуль при $\mu_2 \sim -T \ln(\epsilon_0/T)$ (рис. 3). С ростом μ_2 термоэдс резко возрастает, достигая максимального положительного значения $\sim |\alpha_0| (\epsilon_0/T)^{1/2}$ при $\mu_2 \sim T$. Затем в области $T \leq \mu_2 \ll \epsilon_0$ термоэдс убывает как $(\epsilon_0/\mu_2)^{1/2}$. Таким образом, в рассматриваемом варианте ЭТП типа 1 (рис. 1, а), в зависимости термоэдс от μ_2 в окрестности перехода имеется пик положительной полярности (термоэдс меняет знак). Пик имеет асимметричную форму и асимметрия его тем больше, чем больше энергетический зазор ϵ_0 . Наличие описанных особенностей в проводимости и термоэдс связано с междузонным рассеянием носителей. Ниже мы покажем, что в отсутствие междузонного рассеяния поведение кинетических коэффициентов в окрестности ЭТП должно быть качественно иным.

В области большей связности ПФ с ростом μ_2 как проводимость, так и термоэдс должны выходить на нормальное поведение. Для ЭТП типа 1 это значит, что проводимость, убывающая как $(\mu_2/\epsilon_0)^{1/2}$ в области $T \leq \mu_2 \ll \ll \epsilon_0$, с ростом μ_2 должна пройти через локальный минимум. Термоэдс при некотором значении μ_2 проходит через нуль и становится отрицательной. Однако соответствующие значения μ_2 не могут быть оценены из выражений (6а) и (7а), справедливых в окрестности перехода при $(\mu_2/\epsilon_0)^{1/2} \ll$

¹ В рассматриваемом нами случае вместо величины α_0 следовало бы ввести величину, в два раза меньшую. Однако в целях удобства сопоставления результатов с результатами [3] мы оставили определение α_0 (9), принятое в [3].

$\ll 1$. Используя выражения для парциальных величин σ и α первой зоны в области $\mu_2 \gg T$, полученные без использования разложения по параметру μ_2/ϵ_0 , можно показать, что как минимум в проводимости, так и обращении в нуль термоэдс в области большей связности ПФ соответствует $\mu_2 \sim 0.1 \epsilon_0$. Однако эта оценка является оценкой сверху, поскольку неучитываемый вклад носителей второй зоны в зависимости от соотношения между параметрами первой и второй зон может быть существенным при $\mu_2 \sim 0.1 \epsilon_0$. Вклад носителей второй зоны должен привести к сдвигу μ_2 в сторону ЭТП.

Причину изменения знака термоэдс в окрестности перехода можно качественно пояснить следующим образом. Поскольку $\alpha \sim \langle (\epsilon - \mu) \tau \rangle$, то знак термоэдс определяется соотношением вкладов электронов, запол-

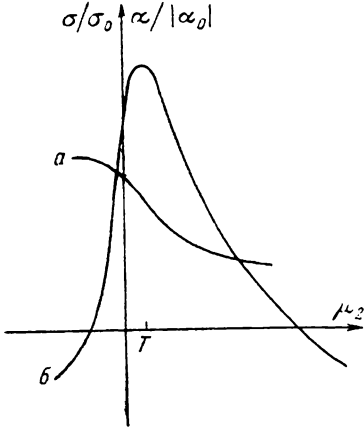


Рис. 3. Качественная зависимость проводимости (кривая *a*) и термоэдс (кривая *b*) от параметра перехода μ_2 при ЭТП типа I в чистом случае при сильном междузонном рассеянии носителей.

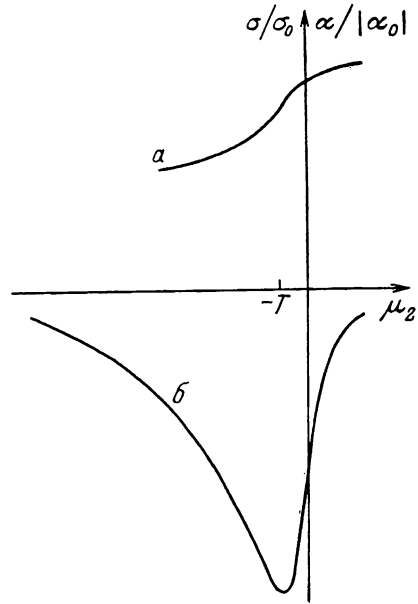


Рис. 4. Качественная зависимость проводимости (кривая *a*) и термоэдс (кривая *b*) от параметра перехода μ_2 при ЭТП типа II в чистом случае при сильном междузонном рассеянии носителей.

няющих состояния выше и ниже ПФ. Отрицательный знак α вдали от перехода соответствует тому, что больший вклад дают электроны, расположенные над ПФ. При приближении величины μ_2 к нулю со стороны отрицательных значений электроны, находящиеся над ПФ, включаются в процесс междузонного рассеяния. Время релаксации для этих электронов уменьшается, что и приводит к смене знака термоэдс. При дальнейшем увеличении $\mu_2 > 0$ термоэдс выходит на нормальное поведение, поскольку междузонное рассеяние испытывают все электроны.

Аналогичные вычисления для ЭТП типа II (рис. 1, б) в чистом случае приводят к следующим выражениям

$$\sigma = \sigma_0 \begin{cases} 1 - (\tau_1/\tau_2) (|\mu_2|/\epsilon_0)^{1/2}, & \mu_2 \leq -T, \\ 1 - 0.5 (\tau_1/\tau_2) (T/\epsilon_0)^{1/2} (1 - 0.67\mu_2/T), & |\mu_2| \leq T, \\ 1 - 0.89 (\tau_1/\tau_2) (T/\epsilon_0)^{1/2} \exp(-\mu_2/T), & \mu_2 \geq T, \end{cases} \quad (10a)$$

$$\alpha = \alpha_0 \begin{cases} 1 - 0.5 (\tau_1/\tau_2) (T/\epsilon_0)^{1/2} (1 - 0.67\mu_2/T), & |\mu_2| \leq T, \\ 1 - 0.89 (\tau_1/\tau_2) (T/\epsilon_0)^{1/2} \exp(-\mu_2/T), & \mu_2 \geq T, \end{cases} \quad (10b)$$

$$\sigma = \sigma_0 \begin{cases} 0.5 (1 - (\tau_1^2/\tau_2^2)) + 0.25 (\tau_1/\tau_2) (\epsilon_0/|\mu_2|)^{1/2}, & \mu_2 \leq -T, \\ 0.15 (\tau_1/\tau_2) (\epsilon_0/T)^{1/2} (1 - 0.26\mu_2/T), & |\mu_2| \leq T, \\ 0.5 - 0.13 (\tau_1/\tau_2) (\epsilon_0/T)^{1/2} (\mu_2/T) \exp(-\mu_2/T), & \mu_2 \geq T. \end{cases} \quad (11a)$$

$$\alpha = \alpha_0 \begin{cases} 0.5 (1 - (\tau_1^2/\tau_2^2)) + 0.25 (\tau_1/\tau_2) (\epsilon_0/|\mu_2|)^{1/2}, & \mu_2 \leq -T, \\ 0.15 (\tau_1/\tau_2) (\epsilon_0/T)^{1/2} (1 - 0.26\mu_2/T), & |\mu_2| \leq T, \\ 0.5 - 0.13 (\tau_1/\tau_2) (\epsilon_0/T)^{1/2} (\mu_2/T) \exp(-\mu_2/T), & \mu_2 \geq T. \end{cases} \quad (11b)$$

Качественное поведение σ и α изображено на рис. 4. Зависимости для проводимости в случае ЭТП типа I и ЭТП типа II в окрестности перехода идентичны — проводимость убывает в области большей связности поверхности Ферми. В термоэдс же имеется пик отрицательной полярности. Таким образом, термоэдс в окрестности ЭТП типа II не меняет знак. Физическая причина того, что знак термоэдс вдаль и в окрестности перехода один и тот же, заключается в том, что при приближении к переходу со стороны положительных μ_2 междузонное рассеяние сначала становится существенным для электронов, расположенных под ПФ. При этом они в меньшей степени компенсируют вклад электронов, расположенных над ПФ, что и приводит к возникновению в термоэдс пика того же знака, что и вдаль от перехода в области меньшей связности ПФ.

4. В грязном случае $\tau^{-1} \geq T \gg \tau^{-1}/(\epsilon_0 \tau)$ с использованием (4) и (5) для ЭТП типа I получаем

$$\sigma = \sigma_0 \begin{cases} 1 - (\tau_1 \tau_2) (\mu_2 / \epsilon_0)^{1/2}, & \mu_2 \geq \tau^{-1}, \\ 1 - 0.5 (\tau_1 \tau_2) (\epsilon_0 \tau_3)^{-1/2} (1 + \mu_2 \tau_3), & |\mu_2| \ll \tau^{-1}, \\ 1 - 0.25 (\tau_1 \tau_2) (\epsilon_0 \tau_3)^{-1/2} (|\mu_2| \tau_3)^{-1/2}, & -\tau^{-1} (\epsilon_0 \tau)^{1/2} \leq \mu_2 \leq -\tau^{-1}, \end{cases} \quad (12a)$$

$$\sigma = \sigma_0 \begin{cases} 1 - (\tau_1 \tau_2) (\mu_2 / \epsilon_0)^{1/2}, & \mu_2 \geq \tau^{-1}, \\ 1 - 0.5 (\tau_1 \tau_2) (\epsilon_0 \tau_3)^{-1/2} (1 + \mu_2 \tau_3), & |\mu_2| \ll \tau^{-1}, \\ 1 - 0.25 (\tau_1 \tau_2) (\epsilon_0 \tau_3)^{-1/2} (|\mu_2| \tau_3)^{-1/2}, & -\tau^{-1} (\epsilon_0 \tau)^{1/2} \leq \mu_2 \leq -\tau^{-1}, \end{cases} \quad (12b)$$

$$\alpha = \alpha_0 \begin{cases} 0.5 (1 + (\tau_1^2 \tau_2^2)) - 0.25 (\tau_1 \tau_2) (\epsilon_0 / \mu_2)^{1/2}, & \mu_2 \geq \tau^{-1}, \\ -0.25 (\tau_1 / \tau_2) (\epsilon_0 \tau_3)^{1/2} (1 + \mu_2 \tau_3), & |\mu_2| \ll \tau^{-1}, \\ 0.5 - 0.06 (\tau_1 \tau_2) (\epsilon_0 \tau_3)^{1/2} (|\mu_2| \tau_3)^{-3/2}, & -\tau^{-1} (\epsilon_0 \tau)^{1/2} \leq \mu_2 \leq -\tau^{-1}. \end{cases} \quad (13a)$$

$$\alpha = \alpha_0 \begin{cases} 0.5 (1 + (\tau_1^2 \tau_2^2)) - 0.25 (\tau_1 \tau_2) (\epsilon_0 / \mu_2)^{1/2}, & \mu_2 \geq \tau^{-1}, \\ -0.25 (\tau_1 / \tau_2) (\epsilon_0 \tau_3)^{1/2} (1 + \mu_2 \tau_3), & |\mu_2| \ll \tau^{-1}, \\ 0.5 - 0.06 (\tau_1 \tau_2) (\epsilon_0 \tau_3)^{1/2} (|\mu_2| \tau_3)^{-3/2}, & -\tau^{-1} (\epsilon_0 \tau)^{1/2} \leq \mu_2 \leq -\tau^{-1}. \end{cases} \quad (13b)$$

$$\alpha = \alpha_0 \begin{cases} 0.5 (1 + (\tau_1^2 \tau_2^2)) - 0.25 (\tau_1 \tau_2) (\epsilon_0 / \mu_2)^{1/2}, & \mu_2 \geq \tau^{-1}, \\ -0.25 (\tau_1 / \tau_2) (\epsilon_0 \tau_3)^{1/2} (1 + \mu_2 \tau_3), & |\mu_2| \ll \tau^{-1}, \\ 0.5 - 0.06 (\tau_1 \tau_2) (\epsilon_0 \tau_3)^{1/2} (|\mu_2| \tau_3)^{-3/2}, & -\tau^{-1} (\epsilon_0 \tau)^{1/2} \leq \mu_2 \leq -\tau^{-1}. \end{cases} \quad (13c)$$

Выражения для σ и α в области большей связности ПФ в грязном случае (12a) и (13a) совпадают с соответствующими выражениями в чистом случае (6a) и (7a). Излом в проводимости, как это видно из (12), замыкается примесным рассеянием в интервале $|\mu_2| \leq \tau^{-1}$. В области меньшей связности ПФ с уменьшением μ_2 в интервале $-\tau^{-1} (\epsilon_0 \tau)^{1/2} \leq \mu_2 \leq \leq -\tau^{-1}$ отрицательное слагаемое в проводимости уменьшается по степенному закону в отличие от экспоненциального убывания в чистом случае. В термоэдс имеется пик положительной полярности при $\mu_2 \sim \tau^{-1}$, величина которого в максимуме $\sim |\alpha_0| (\epsilon_0 \tau_3)^{1/2}$. Таким образом, при понижении температуры от значений $T \gg \tau^{-1}$ (чистый случай) величина отношения термоэдс в максимуме к нормальной термоэдс возрастает как $(\epsilon_0 / T)^{1/2}$ вплоть до величины $(\epsilon_0 \tau_3)^{1/2}$, и при более низких температурах от температуры не зависит. Положение максимума термоэдс при понижении температуры смещается в сторону перехода и при $T \leq \tau^{-1}$ перестает зависеть от температуры. Абсолютное значение термоэдс стремится к нулю линейно по температуре. В области меньшей связности ПФ с уменьшением μ_2 в интервале $-\tau^{-1} (\epsilon_0 \tau)^{1/2} \leq \mu_2 \leq -\tau^{-1}$ термоэдс убывает по закону $(\tau_3 |\mu_2|)^{-3/2}$ в отличие от экспоненциального убывания в чистом случае. Поэтому асимметрия пика в грязном случае меньше, чем в чистом.

Выражения для σ и α в окрестности ЭТП типа II в грязном случае получаются из соответствующих выражений для ЭТП типа I (12) и (13) таким же изменением знаков, как и в чистом случае (сравни выражения (6) и (7) с (10) и (11)). Выражения для кинетических коэффициентов в окрестности ЭТП типов III и IV (рис. 1, *в* и *г*) отличаются от соответствующих выражений для ЭТП типов I и II только знаком α_0 (при этом энергия отсчитывается от дна дырочной зоны 1 «вниз»).

Отметим, что в выражениях, описывающих особенности в поведении кинетических коэффициентов в окрестности ЭТП типа «разрыв перемычки» [3], роль энергетического зазора между дном первой и второй зон ϵ_0 играет энергия $p_{x0}^2 / (2m_x)$, где p_{x0} — предельный импульс.

5. Ниже на основе полученных выражений мы проанализируем имеющиеся экспериментальные данные, но для того чтобы прояснить роль междузонного рассеяния предварительно коротко рассмотрим случай, когда междузонное рассеяние является пренебрежимо слабым. Очевидно, что в такой ситуации особенности в кинетических коэффициентах в окрестности ЭТП могут быть связаны только с парциальным вкладом носите-

лей во второй зоне. Рассмотрим ЭТП типа I (рис. 1, а). В чистом случае ($T \gg \tau^{-1}$) электропроводность легко вычисляется во всем интервале значений химического потенциала

$$\sigma = \sum_{i=1}^2 \sigma_i = \sum_{i=1}^2 \sigma_{i0} \frac{T}{\varepsilon_0} \left[\frac{\mu_i}{2T} + \ln \operatorname{ch} \frac{\mu_i}{2T} + \ln 2 \right], \quad (14)$$

$$\sigma_{10} = \sigma_0, \quad \sigma_{20} = e^2 m_2^{1/2} \tau_4 (2\varepsilon_0)^{3/2} / (3\pi^2).$$

Из (14) видно, что при $T = 0$ К в зависимости проводимости от μ_2 имеется излом при $\mu_2 = 0$. При конечной температуре этот излом сглаживается. В отличие от случая сильного междузонного рассеяния дополнительное слагаемое в проводимости в области большей связности ПФ положительно и линейно по μ_2/ε_0

$$\sigma = \sigma_{10} \left[\frac{\mu_1}{\varepsilon_0} + \gamma \frac{T}{\varepsilon_0} \left(\frac{\mu_2}{T} + \exp(-\mu_2/T) \right) \right], \quad \mu_2 \gg T, \quad (15)$$

$$\gamma = (m_2/m_1)^{1/2} (\tau_4/\tau_1) = (m_1/m_2) (V_1^2/V_2^3).$$

Используя (4) и (5) при $\tau_2, \tau_3 \rightarrow \infty$, для термоэдс в чистом случае ЭТП типа I получаем

$$\alpha = 0.5 \alpha_0 \frac{\varepsilon_0}{\mu_1} \begin{cases} (1 + \gamma)/(1 + \gamma\mu_2/\mu_1), & \mu_2 \gg T, \\ \frac{1 + \gamma(0.5 + 0.21\mu_2/T)}{1 + \gamma(T/\mu_1)(0.69 + 0.5\mu_2/T)}, & |\mu_2| \ll T, \\ 1, & \mu_2 \leq -T, \end{cases} \quad (16)$$

где мы отбросили все экспоненциально малые слагаемые.

Из (16) следует, что проявление особенности в термоэдс при ЭТП зависит от величины параметра γ (при учете междузонного рассеяния мы полагали $\gamma \sim 1$). Если $\gamma \ll 1$, то в зависимости термоэдс от μ_2 особенность фактически не проявляется и $\alpha \sim 0.5 \alpha_0$ в окрестности перехода. Если $\gamma \sim 1$, то $\alpha \sim 0.75 \alpha_0$ в области $|\mu_2| \ll T$ и $\alpha \sim \alpha_0$ в области $\mu_2 \sim T$. При дальнейшем увеличении $\mu_2 \gg T$ термоэдс плавно выходит на нормальную зависимость (рис. 5). При больших $\gamma \gg 1$ возможны два следующих предельных случая. Если $\gamma T/\varepsilon_0 \gg 1$, то термоэдс резко возрастает по абсолютной величине (не меняя знака) при $\mu_2 \sim T$ до величины $\sim \alpha_0 \varepsilon_0/T$ и с ростом μ_2 в области большей связности ПФ убывает как $\alpha_0 \varepsilon_0/\mu_2$. При

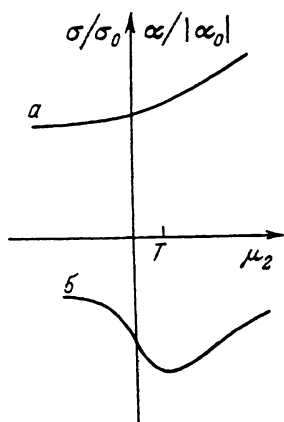


Рис. 5. Качественная зависимость проводимости (кривая а) и термоэдс (кривая б) от параметра перехода μ_2 при ЭТП типа I в чистом случае в пределе пренебрежимо слабого междузонного рассеяния носителей и при $\gamma = (m_1 V_1^2)/(m_2 V_2^3) \sim 1$.

достаточно низких температурах $\gamma T/\varepsilon_0 \ll 1$. Тогда α достигает величины $\sim \gamma \alpha_0$ при $\mu_2 \sim T$ и в области $T \leq \mu_2 \leq \mu_1/\gamma$ слабо зависит от μ_2 . При $\mu_2 > \mu_1/\gamma$ термоэдс убывает по абсолютной величине как $\alpha_0 \varepsilon_0/\mu_2$. Таким образом, максимальное значение термоэдс в чистом случае ограничено величиной $\sim \alpha_0 \varepsilon_0/T$. Пик в термоэдс имеет асимметричную форму с более резким фронтом со стороны области меньшей связности ПФ. Подчеркнем, что в случае слабого междузонного рассеяния полярность пика в термоэдс обратна полярности пика в случае сильного междузонного рассеяния. Т. е. полярность пика в этом случае совпадает со знаком парциальной термоэдс в образующейся при ЭТП полости. Мы не останавливаемся на случае пренебрежимо слабого междузонного рассеяния по-

дробно, поскольку имеющиеся экспериментальные данные однозначно указывают на важность междузонных процессов в ЭТП типа «образование новой полости».

В случае слабого междузонного рассеяния при $\gamma \sim 1$ вклад носителей второй зоны в проводимость в окрестности ЭТП в области большей связности ПФ мал по параметру μ_2/ε_0 , а вклады обеих зон в коэффициент β в той же области одного порядка. Однако в случае сильного междузонного рассеяния, как это отмечалось выше, вклад носителей второй зоны в окрестности ЭТП в σ и β мал по параметрам $(\mu_2/\varepsilon_0)^{1/2}$ и $(\mu_2/\varepsilon_0)^{1/2}$ соответственно.

6. При анализе экспериментальных результатов мы остановимся на тех работах, в которых энергетический спектр носителей в исследованных образцах в окрестности ЭТП качественно соответствует рассмотренной выше модели двух простых зон. В [8] исследовались особенности термоэдс и сопротивления при ЭТП в висмуте и его сплавах с сурьмой, легированных теллуром и оловом. Висмут и его сплавы являются чрезвычайно удобным объектом для наблюдения особенностей в кинетических коэффициентах при ЭТП, поскольку в них при анизотропном деформировании легко осуществляется непрерывный переход через критическое значение энергии Ферми в одном образце. ЭТП типа I наблюдался на монокристаллах $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}+10^{-4}$ ат. % Те. Сжатие вдоль оси C_1 приводит к перетеканию электронов из трех эллипсоидов в один. При этом в термоэдс в окрестности ЭТП имеется пик положительной полярности. Со стороны области большей связности ПФ термоэдс убывает корневым образом. В зависимости сопротивления от деформации имеется максимум, смещенный относительно максимума термоэдс. В соответствии с полученными выше результатами в сопротивлении в окрестности перехода должен наблюдаться максимум, величина которого зависит от интенсивности междузонного рассеяния. Однако остается непонятным наблюдаемое смещение этого максимума в область меньшей связности ПФ. ЭТП типа III наблюдался в образцах $\text{Bi}+10^{-2}$ ат. % Sn. При сжатии вдоль оси C_2 на фоне более тяжелого дырочного эллипсоида образуются два легких электронных эллипсоида. В окрестности перехода имеется слабо выраженный максимум в сопротивлении и пик положительной полярности в термоэдс. В области большей связности ПФ как термоэдс, так и сопротивление уменьшаются вследствие притока легких электронов. ЭТП с образованием дырочной полости на фоне трех электронных эллипсоидов (тип II) исследовался на образцах $\text{Bi}+10^{-3}$ ат. % Те. В окрестности перехода наблюдался очень слабо выраженный максимум в сопротивлении и пик отрицательной полярности в термоэдс. Пик в термоэдс имеет асимметричную форму с более плавным поведением со стороны области большей связности ПФ. Таким образом, экспериментально наблюдаемые особенности в кинетических коэффициентах при ЭТП различных типов качественно хорошо описываются полученными выражениями при учете междузонного рассеяния носителей и не соответствуют результатам в случае пренебрежимо слабого междузонного рассеяния. Согласуется с теоретическими результатами и тот факт, что в области низких температур (при понижении температуры от 4.2 К до 2 К) положение и форма пика в термоэдс не изменяются, а при повышении температуры положение пика смещается в сторону меньших деформаций (при ЭТП типа I). При этом с ростом температуры пик размывается и полностью исчезает при температуре жидкого азота. Следует отметить, что во всех четырех типах ЭТП, рассмотренных выше, сопротивление в окрестности перехода $|\mu_2| \ll \varepsilon_0$ имеет положительное дополнительное слагаемое, связанное с междузонным рассеянием носителей. Положительный знак этого слагаемого однозначно связан со знаком полярности пика термоэдс в каждом конкретном типе ЭТП. Однако поскольку особенность в сопротивлении по сравнению с особенностью в термоэдс слабая, она может очень слабо проявляться в эксперименте.

В [9] по аномалии в термоэдс и сопротивлению определительно исследовались полужонные T -зоны проводимости в висмуте, легированном теллуром. Измерения проводились на серии образцов с разными значениями концентрации носителей. В температурной и концентрационной зависимостях термоэдс наблюдался пик положительной полярности (со сменой знака), а в сопротивлении — излом, сопровождающийся ростом в области большей связности ПФ.

Поведение термоэдс вискероов висмута исследовано в [12]. При растяжении исчезает один из трех L -электронных эллипсоидов. В термоэдс имеется пик положительной полярности.

В [13] исследовались особенности в термоэдс у монокристаллов n - $\text{Bi}_{0.9}\text{Sb}_{0.1}$ под действием анизотропной деформации, приводящей к перетеканию электронов в один эллипсоид (ЭТП типа I). В окрестности перехода на фоне отрицательной термоэдс наблюдался пик положительной полярности.

В [14] исследовалась концентрационная зависимость термоэдс и сопротивления на серии образцов полупроводниковых сплавов $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$, легированных оловом (ЭТП типа III). В окрестности ЭТП наблюдался пик в термоэдс со сменой знака и резкий рост сопротивления.

Анализ имеющихся экспериментальных данных на основе полученных теоретических результатов позволяет говорить о том, что особенности в термоэдс и проводимости при ЭТП Лифшица типа «образование новой полости» связаны с междузонным рассеянием носителей в окрестности перехода. В нашем рассмотрении не учитывались эффекты электрон-фононного взаимодействия, которые должны быть существенны при достаточно высоких температурах. В [4] показано, что электрон-фононное рассеяние подавляет особенность в термоэдс, а вклад в термоэдс, связанный с фононным увлечением, не имеет особенности в окрестности ЭТП. В области низких температур эффектами, связанными с электрон-фононным взаимодействием, можно пренебречь по причине вымораживания фононов.

В заключение автор приносит благодарность А. В. Гольцеву, В. В. Косареву и Н. А. Редько за полезные обсуждения.

Л и т е р а т у р а

- [1] Лифшиц И. М. ЖЭТФ, 1960, т. 38, № 5, с. 1569—1576.
- [2] Васк В. Г., Трефилов А. В., Фомичев С. В. ЖЭТФ, 1981, т. 80, № 4, с. 1614—1621.
- [3] Варламов А. А., Панцулая А. В. ЖЭТФ, 1985, т. 89, № 6, с. 2188—2196.
- [4] Абрикосов А. А., Панцулая А. В. ФТТ, 1986, т. 28, № 7, с. 2140—2144.
- [5] Варламов А. А., Панцулая А. В. Письма в ЖЭТФ, 1986, т. 44, № 3, с. 139—142.
- [6] Каганов М. И., Мёбиус А. ЖЭТФ, 1984, т. 86, № 2, с. 691—699.
- [7] Заваицкий Н. В., Суслев И. М. ЖЭТФ, 1984, т. 87, № 6, с. 2152—2165.
- [8] Брандт Н. Б., Егоров В. С., Лавренко М. Ю., Микина Н. Я., Савин А. М. ЖЭТФ, 1985, т. 89, № 6, с. 2257—2269.
- [9] Бойко М. П., Редько Н. А., Родионов Н. А., Польшин В. И. Письма в ЖЭТФ, 1986, т. 43, № 1, с. 41—43.
- [10] Егоров В. С., Федоров А. Н. ЖЭТФ, 1983, т. 85, с. 1647—1657.
- [11] Варламов А. В., Егоров В. С. Письма в ЖЭТФ, 1984, т. 39, № 11, с. 510—513.
- [12] Гайдуков Ю. П., Данилова Н. П., Никифоренко Е. В. Письма в ЖЭТФ, 1984, т. 39, № 11, с. 522—524.
- [13] Егоров В. С., Лавренко М. Ю., Микина Н. Я., Савин А. М. Письма в ЖЭТФ, 1984, т. 40, № 1, с. 25—28.
- [14] Грязнов О. С., Иванов Г. А., Мойжес Б. Я., Наумов В. Н., Немчинский В. А., Родионов Н. А., Редько Н. А. ФТТ, 1982, т. 24, № 8, с. 2335—2343.
- [15] Заваицкий Н. В., Макаров В. Н., Юргенс А. А. Письма в ЖЭТФ, 1985, т. 42, № 4, с. 148—151.
- [16] Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. М.: Физматгиз, 1962. 443 с.