

# Термоэдс в квазидвумерных системах при рассеянии носителей тока на фононах

© Б.М. Аскеров, Б.И. Гулиев, С.Р. Фигарова, И.Р. Гадирова

Бакинский государственный университет,  
370148 Баку, Азербайджан

(Поступила в Редакцию 1 апреля 1997 г.)

Исследована термоэдс  $\alpha$  в электронных системах с квазидвумерным энергетическим спектром в приближении тензора времени релаксации. Вычислены продольная и поперечная компоненты термоэдс при рассеянии носителей тока на фононах различного типа. Показано, что анизотропия термоэдс в таких системах существенна. Рассмотрена зависимость  $\alpha$  от соотношения между энергией Ферми  $\varepsilon_F$  и полушириной одномерной зоны проводимости  $\varepsilon_0$ . При рассеянии на акустических и неполярных оптических фононах происходит изменение знака термоэдс:  $\alpha$  становится положительной при  $\varepsilon_F < \varepsilon_0$ . Сравнение теории с имеющимися в литературе экспериментальными данными показывает хорошее количественное согласие.

Явления переноса в квазидвумерных электронных системах в последние годы интенсивно исследуются как теоретически [1], так и экспериментально [2,3]. Квазидвумерными системами являются, например, слоистые кристаллы дихалькогенидов переходных металлов, сверхрешетки и т.д. Анизотропия электронных свойств таких систем связана с особенностями энергетического спектра, имеющего квазидвумерный характер:

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m_{\perp}} + \varepsilon_0(1 - \cos(ak_z)), \quad (1)$$

где  $k_{\perp} = (k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$  — величина волнового вектора в плоскости слоев,  $\varepsilon_0$  — полуширина одномерной зоны проводимости в направлении  $k_z$ ,  $a$  — постоянная решетки в направлении, перпендикулярном плоскости слоев,  $m_{\perp}$  — эффективная масса носителей тока в плоскости слоев.

Другой причиной анизотропии являются особенности рассеяния, которые в приближении времени релаксации в анизотропных системах описываются тензором обратного времени релаксации. Анизотропия энергетического спектра естественным образом отражается на времени релаксации, даже если учитывать ее только через плотность состояний. В общем случае тензор обратного времени релаксации носителей тока на фононах различного типа имеет вид [4]

$$1/\tau_i = A_r g(\varepsilon) / |k_i k_{\perp}|^r, \quad (2)$$

где  $g(\varepsilon)$  — плотность состояний в квазидвумерных системах [5],  $r = 0$  соответствует рассеянию носителей тока на акустических и неполярных оптических фононах, а  $r = 1$  — рассеянию на полярных оптических и пьезоакустических фононах,  $k_i$  означает продольную  $k_{\perp}$  и поперечную  $k_z$  компоненты волнового вектора. Значения  $A_r$  для различных механизмов рассеяния приведены в монографии [6].

При разработке теории явлений переноса, которая могла бы объяснить поведение кинетических коэффициентов в таких системах, необходимо учитывать оба

фактора последовательно. Данная работа посвящена теоретическому исследованию термоэдс в квазидвумерных системах с учетом анизотропии рассеяния носителей тока на фононах.

На основании решения кинетического уравнения в приближении тензора обратного времени релаксации для компонент термоэдс в плоскости слоев  $\alpha_{\perp}$  и в направлении, перпендикулярном слоям  $\alpha_{\parallel}$ , имеем

$$\alpha_{\perp} = \alpha_0 \left[ \frac{\varepsilon_F}{k_B T} (r+1) \frac{I_{0,0,r}}{I_{0,0,r+1}} - \frac{\varepsilon_F}{\varepsilon_0} \frac{\Theta(2\varepsilon_0 - \varepsilon_F)}{z_0 \sin z_0} \right], \quad (3)$$

$$\alpha_{\parallel} = \alpha_0 \left[ \frac{\varepsilon_F}{k_B T} \frac{r}{2} \frac{I_{r,2,r/2-1}}{I_{r,2,r/2}} - \frac{\varepsilon_F}{\varepsilon_0} \frac{\Theta(2\varepsilon_0 - \varepsilon_F)}{z_0 \sin z_0} \right]. \quad (4)$$

Здесь  $\varepsilon_F$  — энергия Ферми,  $\alpha_0 = -(\pi^2/3)(k_0/l) \times (k_B T/\varepsilon_F)$ ,  $\Theta(x)$  — ступенчатая функция:  $\theta(x) = 0$  при  $x < 0$ ,  $\theta(x) = 1$  при  $x > 0$ ,

$$I_{k,l,m} = \int_0^{z_0} z^k (\sin z)^l \left( \frac{\varepsilon_F}{\varepsilon_0} - \frac{2\varepsilon_0}{k_B T} \sin^2 \frac{z}{2} \right)^m dz, \quad (5)$$

$z = ak_z$ ,  $z_0 = \pi$  при  $\varepsilon_F > 2\varepsilon_0$  и  $z_0 = \arccos\left(1 - \frac{\varepsilon_F}{\varepsilon_0}\right)$  при  $\varepsilon_F < 2\varepsilon_0$ .

В случае рассеяния на акустических и неполярных оптических фононах из-за одинаковой зависимости времени релаксации от волнового вектора для обоих механизмов рассеяния термоэдс описываются одним и тем же выражением. При  $\varepsilon_F > 2\varepsilon_0$

$$\alpha_{\perp} = \alpha_0 / (1 - \varepsilon_0/\varepsilon_F), \quad \alpha_{\parallel} = 0, \quad (6)$$

при  $\varepsilon_F < 2\varepsilon_0$

$$\alpha_{\perp} = \alpha_0 \operatorname{tg} \frac{z_0}{2} \left[ \frac{1}{1/z_0 - \operatorname{ctg} z_0} - \frac{1}{z_0} \right],$$

$$\alpha_{\parallel} = -\alpha_0 \frac{\operatorname{tg}(z_0/2)}{z_0}. \quad (7)$$

Из приведенных выражений видно, что в случае рассеяния на акустических и неполярных оптических фононах

термоэдс поперек слоев при  $\varepsilon_F > 2\varepsilon_0$  равна нулю, а при  $\varepsilon_F < 2\varepsilon_0$  имеет положительный знак. Такое поведение  $\alpha_{\parallel}$ , по-видимому, связано с особенностями энергетического спектра, из которого следует, что эффективная масса анизотропна и ее поперечная компонента  $m_z$  является знакопеременной функцией  $k_z$ . Знак термоэдс определяется не только знаком заряда, но и знаком эффективной массы.

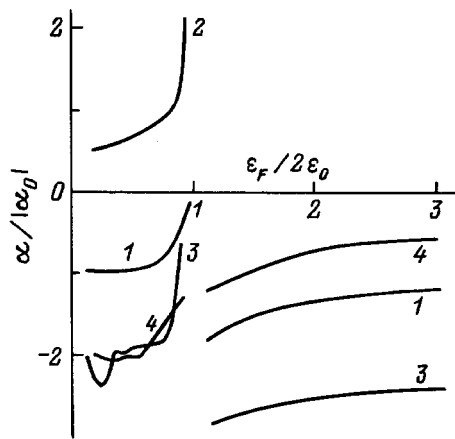
В случае рассеяния носителей тока на полярных оптических и пьезоакустических фононах аналитическое выражение удается получить только для термоэдс в плоскости слоев. При  $\varepsilon_F > 2\varepsilon_0$

$$\alpha_{\perp} = 2\alpha_0 \left( \frac{\varepsilon_F}{\varepsilon_0} \right) \frac{\varepsilon_F/\varepsilon_0 - 1}{(\varepsilon_F/\varepsilon_0 - 1)^2 + 1/2}, \quad (8)$$

при  $\varepsilon_F < 2\varepsilon_0$

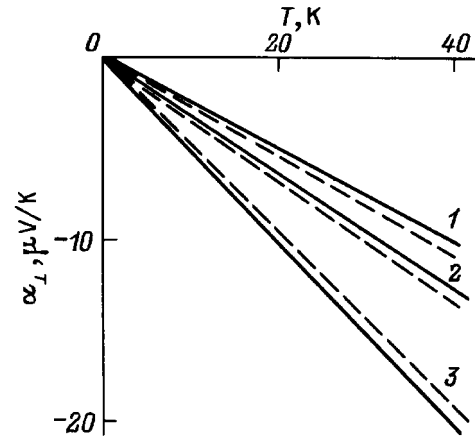
$$\alpha_{\perp} = 2\alpha_0 \operatorname{tg} \frac{z_0}{2} \left[ \frac{(\operatorname{tg} z_0)/z_0 - 1}{\operatorname{ctg} z_0 + 1/\sin(2z_0) - 3/(2z_0)} - \frac{1}{2z_0} \right]. \quad (9)$$

На основе численного расчета и аналитических формул (6)–(9) были построены графики зависимости термоэдс от соотношения между энергией Ферми  $\varepsilon_F$  и полушириной одномерной зоны проводимости  $\varepsilon_0$  (рис. 1), из которых видно, что при рассеянии на полярных оптических и пьезоакустических фононах и  $\varepsilon_F < 2\varepsilon_0$  анизотропия термоэдс незначительна, а в случае  $\varepsilon_F > 2\varepsilon_0$  анизотропия существенна.



**Рис. 1.** Зависимость термоэдс от соотношения между энергией Ферми и полушириной одномерной зоны проводимости.  $r = 0$  (1, 2) и 1 (3, 4). 1, 3 —  $\alpha_{\perp}$ , 2, 4 —  $\alpha_{\parallel}$ .

Отметим, что авторы экспериментальной работы [3] при определении механизма рассеяния в квазидвумерных кристаллах  $\gamma$ - $\text{Mo}_4\text{O}_{11}$  по температурной зависимости термоэдс использовали теоретическую формулу для изотропной модели [6], что является грубым приближением и не может претендовать на количественное согласие. Результаты настоящей работы находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными, приведенными в [3]. Действительно, как видно из рис. 2, в области низких температур зависимость термоэдс от



**Рис. 2.** Зависимость термоэдс  $\alpha_{\perp}$  от температуры в области низких температур. Штриховые линии — экспериментальные [3], сплошные — теоретические.  $\varepsilon_F$  (eV): 1 — 0.20, 2 — 0.17, 3 — 0.12.  $r = 1$ .

температуры носит линейный характер, причем тангенс угла наклона экспериментальной кривой совпадает с результатом вычислений, проведенных по формуле (8). При этом предполагалось, что имеет место рассеяние на полярных оптических фононах. Кроме того, значения термоэдс при различных значениях энергии Ферми  $\varepsilon_F$ , вычисленные по формуле (8), количественно совпадают со значениями  $\alpha$ , экспериментально определенными для образцов:  $\gamma$ -4 ( $\varepsilon_F = 0.20$  eV),  $\gamma$ -5 ( $\varepsilon_F = 0.17$  eV),  $\gamma$ -6 ( $\varepsilon_F = 0.12$  eV). Таким образом, используя полученные выражения, можно определить механизм рассеяния в квазидвумерных кристаллах, а также значения энергии Ферми  $\varepsilon_F$  и полуширины одномерной зоны проводимости  $\varepsilon_0$  по экспериментально найденным значениям термоэдс  $\alpha$ .

## Список литературы

- [1] Y. Kurihara. J. Phys. Soc. Jap. **61**, 975 (1992).
- [2] Proc. Int. Conf. on Layered Materials and Intercalates (Nijmegen, 1979). Physica **B-C 99**, 176 (1980).
- [3] M. Inoue, S. Chara, S. Horisana, M. Koyano, H. Negishi. Phys. Stat. Sol. (b) **2**, 148, 659 (1988).
- [4] B.M. Askerov, B.I. Kuliev, S.R. Figarova, I.R. Gadirova. J. Phys.: Condens. Matter **7**, 843 (1995).
- [5] R.C. Fivaz. Nuovo Cimento **63B**, 10 (1969).
- [6] B.M. Askerov. Electron Transport Phenomena in Semiconductors. World Scientific, Singapore (1994). 394 p.