

12,03

Особенности термоэдс в квантовых проволоках Vi в поперечных магнитном и электрическом полях

© Э.П. Синявский¹, В.Г. Соловенко²

¹ Институт прикладной физики АН Молдавии, Кишинев, Молдавия

² Приднестровский государственный университет им. Т.Г. Шевченко, Тирасполь, Молдавия

E-mail: vasogor@yandex.ru

(Поступила в Редакцию 22 мая 2013 г.

В окончательной редакции 5 марта 2014 г.)

Проведен расчет термоэдс в квантовых проволоках Vi в модели потенциала в форме параболоида вращения в однородном магнитном поле \mathbf{H} , направленном перпендикулярно оси исследуемой наноструктуры, и в постоянном электрическом поле $\mathbf{E} \parallel \mathbf{H}$. Показано, что с ростом \mathbf{E} термоэдс при различных значениях \mathbf{H} описывается немонотонной функцией. Предложена физическая интерпретация такого поведения α_{xx} от \mathbf{E} при учете взаимодействия носителей с шероховатой поверхностью нанопроволоки.

Исследования термомагнитных явлений в объемных материалах в поперечном магнитном поле представляются очень важными, поскольку квантовые эффекты в этом случае проявляются очень ярко. Именно по этой причине описание кинетических явлений с использованием классического уравнения Больцмана, которое неприменимо в квантовых магнитных полях, является сомнительным [1]. В массивных образцах в поперечном магнитном поле термоэдс простым образом связана с потоком тепловой энергии $W_{\alpha\beta}$ и с электропроводностью $\sigma_{\alpha\beta}$ (принцип Онзагера)

$$\alpha_{xx}(H) = \frac{W_{yx}}{T\sigma_{yx}}$$

и при $\omega_c\tau \gg 1$ (ω_c — циклотронная частота, τ — время релаксации) не зависит от механизма рассеяния [1]. В низкоразмерных системах термоэдс в поперечном магнитном поле принципиальным образом отличается от массивных образцов. Это связано с тем, что диагональные по квантовым числам матричные элементы операторов плотности электрического тока, через которые определяются корреляционные функции плотности потока тепловой энергии и электропроводности, отличны от нуля. Поэтому термоэдс в рассматриваемом случае

$$\alpha_{xx}(H) = \frac{W_{xx}}{T\sigma_{xx}} \quad (1)$$

и зависит от механизмов рассеяния носителей в системах с пониженной размерностью (квантовые ямы, квантовые проволоки). Для последовательного описания термоэдс в поперечном квантовом магнитном поле в работе используются общие соотношения неравновесной квантовой статистики для потока тепловой энергии, электропроводности [2], расчет которых можно провести без использования решения классического уравнения Больцмана [3]. Усреднение по фононной подсистеме, усреднение по реализации случайного процесса при

учете рассеяния носителей на шероховатой поверхности проводится с использованием метода кумулянтного усреднения [4]. В результате:

$$\left. \begin{aligned} W_{xx} &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle \hat{j}_x(t) \hat{Q}_x \rangle dt \\ &= \frac{e\hbar^2}{2k_0TVm_e^2} \sum_{\alpha} (E_{\alpha} - \xi) k_x^2 \tau_{\alpha} n_{\alpha} (1 - n_{\alpha}), \\ \sigma_{xx} &= \int_{-\infty}^{\infty} \langle \hat{j}_x(t) \hat{j}_x \rangle dt = \frac{e^2\hbar^2}{2k_0TVm_e^2} \sum_{\alpha} k_x^2 \tau_{\alpha} n_{\alpha} (1 - n_{\alpha}), \end{aligned} \right\} \quad (2)$$

n_{α} — равновесная функция распределения носителей, α — набор квантовых чисел, описывающих квантовое состояние электрона, $1/\tau_{\alpha}$ — полная квантотомеханическая вероятность рассеяния частиц в единицу времени, ξ — химический потенциал, k_x — волновой вектор вдоль оси Ox для электрона с эффективной массой m_e , $\langle \dots \rangle$ — описывает усреднение с равновесной матрицей плотности.

Именно примененный в работе метод расчета термоэдс, не использующий классическое кинетическое уравнение Больцмана, позволяет последовательно рассматривать квантовые магнитные поля, а также учитывать корневые особенности в плотности состояний на дне размерно-квантованной зоны, возникающие в одномерных системах.

В дальнейшем рассматриваем параболическую квантовую проволоку в однородном магнитном поле \mathbf{H} , направленном перпендикулярно оси Ox исследуемой низкоразмерной системы, и в постоянном электрическом поле $\mathbf{E} \parallel \mathbf{H}$. В модели потенциала в форме параболоида вращения (такая модель часто используется при расчетах кинетических коэффициентов в нанопроволоках [3,5,6] и находит математическое подтверждение [7])

в рассматриваемой конфигурации внешних полей собственные значения электрона в зоне проводимости имеют вид

$$E_\alpha = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\omega_e}{\Omega_e} \right)^2 k_x^2 + \hbar\Omega_e \left(n + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_e \left(m + \frac{1}{2} \right) - \Delta_c, \quad (3)$$

$$\Omega_e^2 = \omega_c^2 + \omega_e^2, \quad \omega_c = \frac{eH}{m_e c}, \quad \Delta_c = \frac{e^2 E^2}{2m_e \omega_e^2},$$

$\hbar\omega_e$ — энергия размерного квантования электрона в параболическом потенциале, которая простым образом связана с величиной потенциальной энергии ΔE_c на границе квантовой проволоки радиусом R

$$\hbar\omega_e = \frac{\hbar}{R} \sqrt{\frac{2\Delta E_c}{m_e}}.$$

Как непосредственно следует из (3) с ростом напряженности поперечного электрического поля дно размерно-квантованной зоны проводимости опускается в область запрещенных значений энергии.

Расчет времени релаксации, определяемый упругим рассеянием заряженных частиц на длинноволновых акустических колебаниях τ_f и на шероховатой поверхности τ_s , проводится аналогично [8]. В результате:

$$\frac{1}{\tau_f^e} = \Gamma_f^{(e)} \frac{1}{|k_x|}, \quad \Gamma_f^{(e)} = \frac{2m_e^2 E_{1e}^2 k_0 T \sqrt{\omega_e \Omega_e}}{\hbar^4 v^2 \rho \pi^2} \left(\frac{\Omega_e}{\omega_e} \right)^2 T_n T_m, \quad (4)$$

$$T_n = \frac{1}{(2^n n!)^2} \int_{-\infty}^{\infty} dx H_n^4(x) \exp(-2x^2).$$

$$\frac{1}{\tau_s^e} = \Gamma_s^{(e)} \frac{1}{|k_x|}, \quad \Gamma_s^{(e)} = \frac{2\gamma V_\alpha^2 m_e}{\hbar^3} \left(\frac{\Omega_e}{\omega_e} \right)^2, \quad (5)$$

$$V_\alpha = -\frac{\hbar\omega_e}{R} \left[m + \frac{1}{2} + \frac{\omega_2}{\Omega_e} \left(n + \frac{1}{2} \right) + \frac{2\Delta_c}{\hbar\omega_e} \right].$$

Здесь введены следующие обозначения: E_{1e} — константа деформационного потенциала электронов в C -зонах, v — скорость звука в наноструктуре плотностью ρ , T — абсолютная температура, $\gamma^{1/3}$ определяет высоту флуктуации, $H_n(x)$ — полиномы Эрмита.

При записи $\gamma_s^{(e)}$ пренебрегалось в V_α зависимостью от волнового вектора электрона, так как в дальнейшем рассматриваем низкие температуры, когда $k_0 T \ll \hbar\omega_e$. Время релаксации τ_s^e зависит от \mathbf{E} . Заметим, что при учете упругого рассеяния носителей на длинноволновых акустических колебаниях, на шероховатой поверхности при низких температурах τ_f^e , τ_s^e в точности совпадают с транспортным временем релаксации, используемым при решении кинетического уравнения Больцмана.

В дальнейшем исследуем термоэдс в квантовых проволоках W в простейшей модели пересекающихся зон (рис. 1). Выражения для электропроводности, потока тепловой энергии, времен релаксации можно аналогично (2), (4), (5) записать для дырок в V -зоне, если учесть,

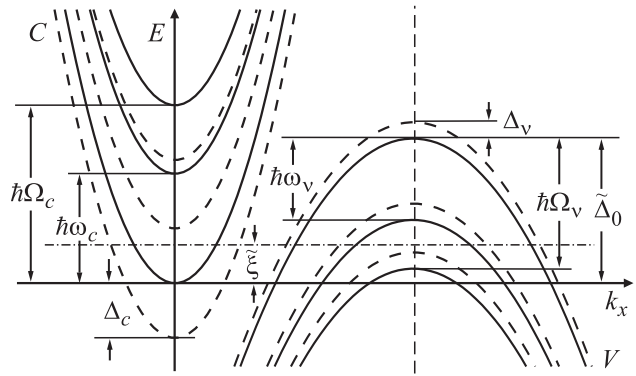


Рис. 1. Схема зонной структуры в магнитном поле. Сплошными линиями указаны три нижайшие размерно-квантованные зоны (C — зоны проводимости, V — валентные зоны). Штриховыми линиями изображены размерно-квантованные зоны в поперечном электрическом поле. Штрих-пунктирной линией изображен ξ — химический потенциал, отсчитанный от дна зоны проводимости квантовой проволоки в магнитном поле. $\tilde{\Delta}_0 = \Delta_0 - \hbar(\omega_e + \Omega_e + \omega_v + \Omega_v)/2$.

что собственные значения для дырок в рассматриваемой модели определяются соотношением

$$E_\alpha^{(v)} = \Delta_0 - \frac{\hbar^2}{2m_v} \left(\frac{\omega_v}{\Omega_v} \right)^2 k_x^2 - \hbar\Omega_v \left(n + \frac{1}{2} \right) - \hbar\omega_v \left(m + \frac{1}{2} \right) + \Delta_v, \quad (6)$$

$\hbar\omega_v$ — энергия размерного квантования в V -зоне, $\Omega_v^2 = \omega_v^2 + \omega_0^2$, $\omega_0 = eH/m_v c$, $\Delta_v = e^2 E^2 / 2m_v \omega_v^2$, m_v — эффективная масса носителей в V -зоне.

Если подставить (4) и (5) в (2) (аналогично для носителей в V -зоне) и проинтегрировать по квазиимпульсам носителей, то выражение для термоэдс (тянущее слабое электрическое поле направлено вдоль оси квантовой проволоки) можно записать следующим образом:

$$\alpha_{xx} = -\frac{k_0}{e} \left\{ \sum_{nm} \left[p(F_2(\eta_{nm}^e) - \eta_{nm}^e F_1(\eta_{nm}^e)) u_{nm}^{(e)} - (F_2(\eta_{nm}^v) - \eta_{nm}^v F_1(\eta_{nm}^v)) u_{nm}^{(v)} \right] \right\} \times \left[\sum_{nm} \left[pF_1(\eta_{nm}^e) u_{nm}^{(e)} + F_1(\eta_{nm}^v) u_{nm}^{(v)} \right] \right]^{-1}. \quad (7)$$

Здесь обозначено ($i = (e, v)$):

$$u_{nm}^{(i)} = \frac{1}{\Gamma_s^{(i)} + \Gamma_f^{(i)}},$$

$$\eta_{nm}^{(e)} = \frac{1}{k_0 T} (\tilde{\xi} - \hbar\Omega_e n - \hbar\omega_e m + \Delta_c),$$

$$\eta_{nm}^{(v)} = \frac{1}{k_0 T} (\Delta_v - \tilde{\xi} - E_{ge} - \hbar\Omega_v n - \hbar\omega_v m);$$

$$E_{ge} = \Delta_0 - \hbar(\Omega_e + \Omega_v + \omega_e + \omega_v)/2,$$

$$\tilde{\xi} = \xi - (\hbar\omega_e + \hbar\Omega_e)/2.$$

$\tilde{\xi}$ — химический потенциал, отсчитываемый от дна нижней размерно-квантованной зоны проводимости, p — число зон проводимости, участвующих в кинетических процессах.

$$F_\nu(\eta) = \nu \int_0^\infty \frac{x^{\nu-1}}{\exp(x-\eta) + 1} dx, \quad F_1(\eta) = \ln[\exp(\eta) + 1].$$

Для типичных параметров квантовой проволоки ($m_e = 0.01m_0$, $m_v = 0.1m_0$, $\nu = 3 \cdot 10^5$ cm/s, $E_{1e} = 10$ eV, $E_{1v} = 7$ eV, $\Delta E_c = 0.255$ eV, $\Delta E_v = 2/3\Delta E_c$) влиянием упругого рассеяния носителей на акустических колебаниях при низких температурах ($T = 10$ K) можно пренебречь, если $(10^{-2}R/\gamma^{1/3})^3 \ll 1$ (R измеряется в Å). Если высота флуктуаций $\gamma^{1/3} \sim 10$ Å, что описывает экспериментально наблюдаемые значения подвижности в квантовых проволоках, то $R < 10^3$ Å.

В рассматриваемом случае термоэдс принимает следующий вид:

$$\alpha_{xx} = -\frac{k_0}{e} \left\{ \sum_{nm} \left[p \frac{F_2(\eta_{nm}^e) - \eta_{nm}^e F_1(\eta_{nm}^e)}{w_c(n, m)} - \frac{F_2(\eta_{nm}^v) - \eta_{nm}^v F_1(\eta_{nm}^v)}{w_v(n, m)} \right] \right\} \times \left[\sum_{nm} \left[p \frac{F_1(\eta_{nm}^e)}{w_c(n, m)} + \frac{F_1(\eta_{nm}^v)}{w_v(n, m)} \right] \right]^{-1}. \quad (8)$$

$$w_c(n, m) = \left(m + \frac{1}{2} + \frac{\omega_e}{\Omega_e} \left(n + \frac{1}{2} \right) + 2N_c \right)^2;$$

$$w_v(n, m) = a \left(m + \frac{1}{2} + \frac{\omega_v}{\Omega_v} \left(n + \frac{1}{2} \right) + 2bN_c \right)^2;$$

$$a = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_v} \frac{1 + \delta_v^2}{1 + \delta_e^2}, \quad b = \left(\frac{\Delta E_c}{\Delta E_v} \right)^{3/2} \left(\frac{m_v}{m_e} \right)^{1/2};$$

$$\delta_i = \frac{\omega_0^i}{\omega_i^i}, \quad N_c = \frac{\Delta_c}{\hbar\omega_e}.$$

Как непосредственно следует из (8) в отсутствие постоянного поперечного электрического поля ($N_c = 0$) при $\Delta E_c > \Delta E_v$ (последнее неравенство характерно для низкоразмерных систем) величина термоэдс определяется взаимодействием дырок с шероховатой поверхностью, поэтому $\alpha_{xx} > 0$. С ростом напряженности электрического поля ($m_v \gg m_e$, $b \approx 6$) влияние дырок на термоэдс заметным образом уменьшается и при больших E главный вклад в термоэдс определяют электроны, поэтому $\alpha_{xx} < 0$. Заметим, что в нанопроволоках с большим радиусом и при высоких температурах (например, $R = 10^3$ Å, $T = 300$ K) термоэдс определяется взаимодействием электронов в S -зонах с длинноволновыми

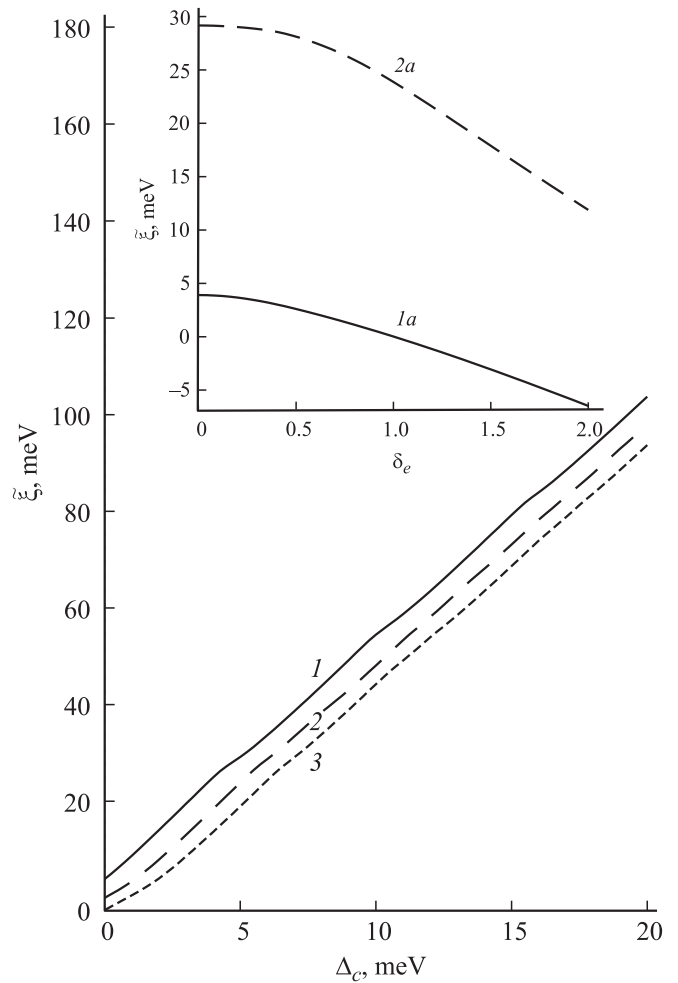


Рис. 2. Зависимость химического потенциала от напряженности поперечного электрического поля. Во вставке приведена зависимость $\tilde{\xi}$ от величины магнитного поля (кривые 1а и 2а вычислены при $\Delta_c = 0$ и $\Delta_c = 10$ meV соответственно).

акустическими колебаниями, не зависит от величины поперечного электрического поля и отрицательно.

Химический потенциал находим из условия электронейтральности исследуемой квантовой проволоки (число электронов в зонах проводимости равно числу дырок в валентной зоне)

$$p \left(\frac{m_e}{m_v} \right)^{1/2} \sum_{n,m} F_{1/2}(\eta_{nm}^e) = \sum_{n,m} F_{1/2}(\eta_{nm}^v).$$

В общем случае зависимость $\tilde{\xi}$ от величины поперечного электрического поля, вычисленная при $\Delta E_c = 0.5$ eV, $\Delta E_v = 0.1$ eV, $m_e = 0.01m_0$, $m_v = 0.1m_0$, $R = 10^3$ Å, приведена на рис. 2 при различных значениях напряженности магнитного поля. Кривые 1, 2, 3 получены при δ_e равных 0, 1, 2 соответственно. Как непосредственно следует из рис. 2 $\tilde{\xi} \propto E^2$ и с увеличением напряженности магнитного поля $\tilde{\xi}$ уменьшается (см. вставку на рис. 2). Последнее обстоятельство связано с тем, что с

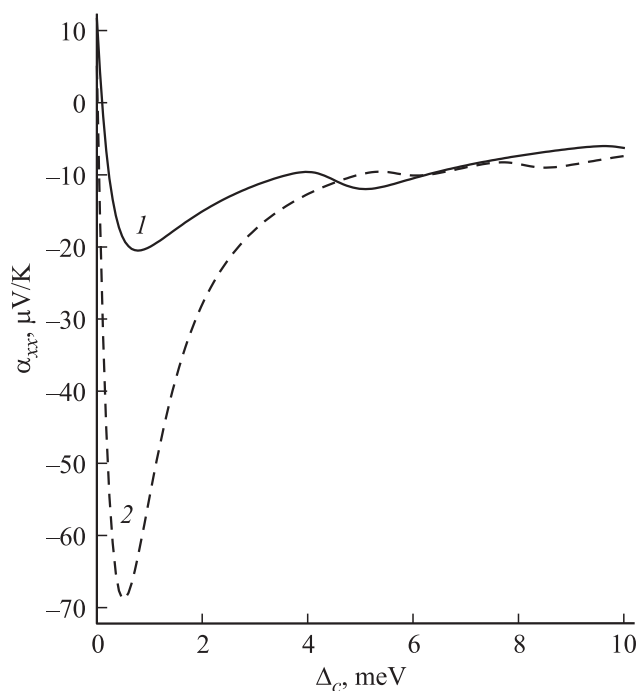


Рис. 3. Зависимость термоэдс от напряженности поперечного электрического поля при $T = 10$ К. Кривая 1 получена в отсутствие однородного магнитного поля ($\delta_e = 0$). Кривая 2 вычислена при $\delta_e = 1$.

ростом напряженности магнитного поля дно размерно-квантованной зоны проводимости поднимается в область больших значений энергии.

На рис. 3 приведены результаты численного расчета зависимости термоэдс от напряженности поперечного электрического поля в квантовых проволоках при указанных выше параметрах при различных значениях напряженности магнитного поля. При малых E и низких температурах величина термоэдс определяется взаимодействием дырок с шероховатой поверхностью, поэтому $\alpha_{xx} > 0$. С ростом E основной вклад в термоэдс связан с электронами, взаимодействующими с шероховатой поверхностью, поэтому $\alpha_{xx} < 0$ и с увеличением электрического поля α_{xx} сначала убывает и в дальнейшем описывается осциллирующей функцией. Такое немонотонное поведение $\alpha_{xx}(H)$ от E связано с тем, что с ростом напряженности поперечного электрического поля ξ поднимается по энергетической шкале и может попасть на дно размерно-квантованной зоны проводимости, где плотность состояний в одномерных квантовых системах имеет особенности. Именно это обстоятельство может приводить к слабой осцилляционной зависимости $\alpha_{xx}(H)$ от E . С ростом напряженности однородного магнитного поля (кривая 2 на рис. 3) термоэдс увеличивается по абсолютной величине. Известно, что для вырожденного электронного газа термоэдс увеличивается по абсолютной величине при уменьшении химического потенциала [1]. В рассматриваемой модели квантовой проволоки химический потенциал с ростом

напряженности магнитного поля уменьшается (вставка на рис. 2), что и приводит к росту (по абсолютной величине) α_{xx} (кривая 2 на рис. 3).

Список литературы

- [1] Б.М. Аскеров. Кинетические эффекты в полупроводниках. Наука, Л. (1970). 303 с.
- [2] R. Kubo, M. Yokota, S. Nakajima. J. Phys. Soc. Jpn. **12**, 1203 (1957).
- [3] Э.П. Синявский, Р.А. Хамидуллин. ФТП **36**, 989 (2002).
- [4] R. Kubo. J. Phys. Soc. Jpn. **17**, 1100 (1962).
- [5] В.А. Гейлер, В.А. Маргулис, Л.И. Филина. ЖЭТФ **113** (4), 1376 (1997).
- [6] A. Cros, A. Cantarero, C. Trallero-Giner, M. Cardona. Phys. Rev. B **46**, 12 627 (1992).
- [7] C.W. Beenakker, Hevan Houten. Solid State Physics / Ed. H. Ehrenrei, D. Turnboul. Academic Press, NY **44**, 83 (1991).
- [8] Э.П. Синявский, С.А. Карапетян. ФТП **45**, 1062 (2011).