Доклады Академии наук СССР
1972. Том 204, № 4

УДК 537.226+537.311.33 : 537+535

ФИЗИКА

Член-корреспондент АН СССР Н. С. ЛИДОРЕНКО, В. А. КОЗЛОВ, Э. Л. НАГАЕВ

ДВУХСТУПЕНЧАТОЕ УВЛЕЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ ФОНОНАМИ

Принято считать теорию термо-э.д.с. в полупроводниках практически завершенной. По-видимому, такое мнение недостаточно обосновано: возможны качественно новые эффекты, не укладывающиеся в рамки существующей теории термо-э.д.с. Рассмотрению одного из таких эффектов и посвящена настоящая работа.

Рассматривается термо-э.д.с. невырожденных полупроводников в условиях гидродинамического течения фононов под действием приложенного к ним градиента температур. В этих условиях поток фононов увлекает носители заряда. Система в известном смысле представляет квантовый аналог электрогидродинамического генератора: носители тока увлекаются здесь не потоком нейтральных частиц, а потоком квазичастиц существенно квантового происхождения. Теория увлечения электронов фононами, развитая Л. Э. Гуревичем, давно уже стала классической в теории твердого тела. Однако в рассматриваемых условиях, наряду с обычным эффектом увлечения электронов фононами, становится весьма существенным и другой эффект увлечения наиболее длинноволновых фононов тепловыми фононами, на что ранее не обращали внимания. Последний, как будет показано ниже, может вызвать аномально высокие значения термо-э.д.с. даже экспоненциально большие в случае очень совершенных кристаллов.

Физически картина выглядит следующим образом. Тепловые фононы с частотами $\sim kT$ рассеиваются, в основном, друг на друге, так как концентрация электронов проводимости в собственном полупроводнике экспоненциально мала. Считается, что частота N-процессов велика по сравнению с частотой U-процессов. В результате устанавливается распределение тепловых фононов, равновесное в системе координат, движущейся со скоростью v вдоль градиента температур [1].

Электроны проводимости взаимодействуют только с фононами, длина волны которых сравнима с их собственной [2]. При эффективной массе электрона m порядка истинной и $T > 1°$ K частота таких фононов (ниже они будут называться электронными) мала по сравнению с kT. Именно неравновесность таких электронных фононов и приводит к предсказанным Л. Э. Гуревичем аномалиям термо-э.д.с. при низких температурах.

При расчетах эффекта увлечения обычно предполагается, что взаимодействие электронных фононов с тепловыми приводит к диссипации импульса первых [2, 3]. Однако на самом деле оно может привести лишь к установлению дрейфа электронных фононов с той же скоростью, что и скорость потока тепловых фононов. Таким образом, тепловые фононы, будучи неравновесными, увлекают электронные фононы. В целом же увлечение электронов фононами оказывается двухступенчатым: электроны проводимости увлекаются электронными фононами, а те, в свою очередь, увлекаются тепловыми.

Кинетические уравнения для тепловых и электронных фононов записываются в виде

$$s\nabla T\,\partial F^0(\omega)\,/\,\partial T = J^N\{F\} + J^U\{F\}, \tag{1}$$

$$s\nabla T\partial G(\omega)\,/\,\partial T = J^N\{G,\,F\} + J^U\{G\}. \tag{2}$$

Здесь F и G — функции распределения для тепловых и электронных фононов соответственно, индексом 0 отмечены их равновесные значения. Символами J^N и J^U обозначены части интеграла столкновений, соответствующие процессам с сохранением полного квазиимпульса и без сохранения его, s — скорость фононов.

При написании уравнения для тепловых фононов (1) учитывается, что доминирующую роль играют их взаимные столкновения, влиянием же на них электронных фононов можно пренебречь. Предполагается, что для тепловых фононов частота N-столкновений $\nu_N{}^T$ велика по сравнению с частотой U-столкновений $\nu_U{}^T$. Если рассеянием на дефектах можно пренебречь, при низких температурах это условие выполнено всегда.

Что же касается уравнения для электронных фононов (2), то из-за малости их числа достаточно учесть только их N-столкновения с тепловыми фононами. Если для тепловых фононов выполнено условие $\nu_N{}^T \gg \nu_U{}^T$, то для электронных фононов должно выполняться соответствующее неравенство $\nu_N{}^e \gg \nu_U{}^e$. Действительно, если диссипация квазиимпульса вызвана процессами переброса, то обе величины ν_N и ν_U зависят от фононной частоты ω одинаковым образом: они пропорциональны ω^2. Если же диссипация вызвана рассеянием на точечных дефектах, то величина ν убывает с уменьшением частоты еще быстрее — как ω^4.

Как уже указывалось, решение уравнения (1) в главном приближении по $\nu_U{}^T / \nu_N{}^T$ дается выражением [1]:

$$F_{ql}[\exp\{(\omega_{ql} - vq) / (k_0T)\} - 1]^{-1}. \tag{3}$$

Скорость дрейфа v определяется равенством

$$\frac{v}{\tau^U} \equiv b\sum_l \int qJ^U\,[(vq)F_0'(\omega)]\,dq = -\gamma\nabla T,$$
$$\gamma = \frac{b}{T}\sum_l qs_l\omega_{ql}F_0'(\omega)\,dq, \qquad b^{-1} = \sum_l \int q^2F_0'(\omega)\,dq. \tag{4}$$

Электроны в изотропном кристалле взаимодействуют только с продольными длинноволновыми фононами. Имея в виду только такие фононы, индекс поляризации в уравнении (2) можно опустить. Его решение ищется в виде

$$G_q = G_q^0 - \varphi_q\,\partial G_q^0/\partial\omega. \tag{5}$$

При расшифровке уравнения (2) следует учитывать, что невозможны *трехфононные процессы, в которых одновременно поглощаются или испускаются* два тепловых фонона. С учетом соотношений (3) и (5) уравнение (2) принимает тогда вид

$$s\omega_q\nabla T/T - (vq)/\tau_q^N = -\varphi_q/\tau_q^N,$$
$$\frac{1}{\tau_q^N} = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{q'l'l''}(F_{q_1}^0 - F_{q+q_1}^0)\,|\,\Phi(q_1,\, q+q_1)\,|^2\,\delta(\omega_q + \omega_{q'} - \omega_{q+q_1}), \tag{6}$$

где Φ — матричный элемент для соответствующего трехфононного процесса. При написании (6) по условию $\nu_N{}^e \gg \nu_U{}^e$ отброшены члены $\sim \nu_U{}^T$ и использовано условие $\omega \ll kT$.

Кинетическое уравнение для электронов при наличии магнитного поля с учетом неравновесности фононов имеет вид [3, 4]

$$e\left\{E + \frac{1}{c}\,[\mathrm{v}_k \times \mathrm{H}]\right\}\nabla_k f_k + v_k\nabla_r f_k =$$
$$= -\frac{f_k - f_k^0}{\tau} - \frac{\partial f_k^0}{\partial\varepsilon}\frac{2\pi}{\hbar N}\sum_q |\,B(q)\,|^2\,\varphi_q\,[(G_q^0 + 1)\,\delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k-q}) - G_q^0\delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k+q})]. \tag{7}$$

Здесь f_k и f_k^0 — функция распределения электронов и равновесная ее часть соответственно, $B(q)$ — матричный элемент гамильтониана электрон-фононного взаимодействия для переходов с поглощением или испусканием фонона с квазиимпульсом q, τ — полное время релаксации электронов. При написании (7) учтено, что рассеяние электронов на фононах можно считать упругим, так как энергия последних мала по сравнению с kT.

Решение уравнения (7) можно искать в виде

$$f_k = f_k^0 - (v\psi)\,\partial f_k^0/\partial\varepsilon. \tag{8}$$

Стандартная процедура решения кинетического уравнения для электронов с учетом неравновесности фононов и выражения (8) ([3]) приводит к следующей системе уравнений для функции ψ:

$$P - \frac{e}{m^*c}\,[\mathbf{H}\times\psi] = \frac{\psi}{\tau},$$

$$P = e\nabla\varphi + \frac{\mu - \varepsilon - m^*s^2\tau^N/\tau_p' - T\gamma m^*\tau^U/\tau_p'}{T}\,\nabla T, \tag{9}$$

$$\frac{1}{\tau_p'} = \frac{2\pi}{\hbar N}\sum_k |B(p-k)|^2 G_{p-k}^0\left(1 - \frac{\mathbf{kp}}{|k|\,|p|}\right)\delta(\varepsilon_k - \varepsilon_p), \qquad \nabla\varphi = E - \frac{1}{c}\nabla\mu,$$

$e\,/\,(m^*c) = \alpha$ — постоянная тонкой структуры.

Для вычисления влияния двухступенчатого увлечения на термо-э.д.с. положим в системе (9) $H = 0$. После простых вычислений получим следующее выражение для коэффициентов термо-э.д.с.:

$$\alpha = \alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2,$$

$$\alpha_1 = \left(\frac{k_\beta}{e}\right)\frac{m^*s^2}{k_\beta T}\,\frac{\langle\tau_{ph}(p)\,\tau\,\tau_p'\rangle}{\langle\tau\rangle}, \qquad \alpha_2 = \left(\frac{k_\beta}{e}\right)\frac{\gamma m^*}{k_\beta}\,\frac{\langle\tau\tau^U/\tau_p'\rangle}{\langle\tau\rangle},$$

$$\tau_{ph}(p) = \frac{1}{4p^4}\int_0^{2p}\tau_{ph}^N(q)\,q^3\,dq, \qquad \langle F\rangle = -\int p^2\,\frac{\partial f_p^0}{\partial\varepsilon}\,F\,dp \Bigg/ \int p^2\,\frac{\partial f_p^0}{\partial\varepsilon}\,dp. \tag{10}$$

Здесь α_0 — термо-э.д.с., получающаяся без учета увлечения электронов фононами; α_1 — вклад в термо-э.д.с. за счет обычного увлечения электронов электронными фононами, получающийся в предположении равновесия тепловых фононов; α_2 — вклад в термо-э.д.с. за счет двухступечатого увлечения электронов электронными фононами, а тех — тепловыми фононами. Выражения α_0 и α_1 были получены ранее (см., например, ([2], [3])). Новым является член α_2.

Чтобы оценить порядок величины $\alpha_2\,/\,\alpha_1$ следует заметить, что для дебаевского спектра согласно формулам (4), в пренебрежении разницей скоростей поперечных и продольных фононов,

$$\alpha_2\,/\,\alpha_1 \approx \tau^U\,/\,\langle\tau_{ph}(p)\rangle.$$

Из условия гидродинамического течения фононов $\nu_U^T \equiv \tau_U^{-1} \ll \nu_N^T$ еще не следует, что это отношение велико по сравнению с единицей, так как $\langle\tau_{ph}(p)\rangle^{-1} = \nu_N^e \ll \nu_N^T$ не обязательно велико по сравнению с τ^U. Однако, в принципе, это неравенство может выполняться в очень чистых кристаллах. Тогда эффект двухступенчатого увлечения вносит в термо-э.д.с. вклад, который намного превышает эффект обычного увлечения электронов фононами. В этом случае возможно получение экспоненциально больших термо-э.д.с. $\sim\exp(\theta_0\,/\,T)$, где θ_0 — характерная температура порядка дебаевской.

Если даже условие $\nu_U^T \ll \nu_N^e$ и не выполнено, представляется вполне реалистичным соотношение $\nu_U^T \sim \nu_N^e$. И в этом случае рассматриваемый эффект существенно сказывается на величине термо-э.д.с.

Рассмотрим влияние двухступенчатого увлечения на эффект Нернста. Решение системы (9) при $H \neq 0$ приводит к следующему выражению для постоянной Нернста:

в случае слабого поля $\alpha\tau H \ll 1$

$$N = N_0 + N_1 + N_2,$$

$$N_1 = \left(\frac{k_\beta}{e}\right)\frac{m^* s^2}{k_\beta T}\frac{e}{m^* c}\,\frac{\langle\tau\rangle\langle\tau_{ph}(p)\,\tau^2/\tau'_p\rangle - \langle\tau^2\rangle\langle\tau_{ph}(p)/\tau_p^2\tau\rangle}{\langle\tau\rangle^2},$$

$$N_2 = \left(\frac{k_\beta}{e}\right)\frac{m^*\gamma}{k_\beta}\frac{e}{m^* c}\,\frac{\langle\tau\rangle\left\langle\frac{\tau^U}{\tau'_p}\tau^2\right\rangle - \langle\tau^2\rangle\left\langle\frac{\tau^U}{\tau'_p}\tau\right\rangle}{\langle\tau\rangle^2}; \tag{11}$$

для случая сильных магнитных полей $\alpha\tau H \gg 1$

$$N = N_0 + N_1 + N_2,$$

$$N_1 = \left(\frac{k_\beta}{e}\right)\frac{m^* s^2}{k_\beta T}\frac{m^* c}{eH^2}\left[\left\langle\frac{1}{\tau}\right\rangle\left\langle\frac{\tau_{ph}(p)}{\tau'_p}\right\rangle - \left\langle\frac{\tau_{ph}(p)}{\tau'_p\tau}\right\rangle\right],$$

$$N_2 = \left(\frac{k_\beta}{e}\right)\frac{m^*\gamma}{k_\beta}\frac{m^* c}{eH^2}\left[\left\langle\frac{1}{\tau}\right\rangle\left\langle\frac{\tau^U}{\tau'_p}\right\rangle - \left\langle\frac{\tau^U}{\tau'_p\tau}\right\rangle\right]. \tag{12}$$

Здесь N_0 — обычный коэффициент Нернста, получающийся без учета увлечения электронов фононами, N_1 — вклад за счет обычного увлечения электронов электронными фононами, N_2 — вклад за счет двухступенчатого увлечения.

Рассуждения, аналогичные приведенным для случая влияния двухступенчатого увлечения электронов фононами на термо-э.д.с., позволяют сделать вывод, что в условиях гидродинамического течения фононного газа $\nu_U^T \ll \nu_N^T$ N_2 будет намного превышать вклад от обычного эффекта увлечения. В случае очень чистых и совершенных образцов, этот вклад может быть даже экспоненциально велик $\sim \exp(\theta_0 / T)$.

Для количественной оценки влияния двухступенчатого увлечения на эффект Нернста рассмотрим отношение

$$\left(\frac{N_2}{N_0}\right) \Big/ \left(\frac{\alpha_2}{\alpha_0}\right) \approx -\frac{\mu}{k_\beta T}. \tag{13}$$

Для рассматриваемого случая невырожденных полупроводников это отношение много больше единицы, поэтому влияние двухступенчатого увлечения на эффект Нернста больше, чем на термо-э.д.с.

В заключение авторы выражают благодарность Р. Н. Гуржи, В. М. Конторовичу, И. Б. Рубашову за полезное обсуждение проблемы и полезные замечания.

Поступило
4 X 1971

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] Р. Н. Гуржи, УФН, 94, в. 4 (1968). [2] C. Herring, Phys. Rev., 96, 1163 (1954). [3] А. И. Ансельм, Введение в теорию полупроводников, 1962. [4] Дж. Займан, Электроны и фононы, ИЛ, 1962.