

ФОКУСИРОВКА ФОНОНОВ И ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЕ УВЛЕЧЕНИЕ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КРИСТАЛЛАХ С ВЫРОЖДЕННОЙ СТАТИСТИКОЙ НОСИТЕЛЕЙ ТОКА

И. Г. Кулеев , И. И. Кулеев, С. М. Бахарев, В. В. Устинов*

*Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук
620990, Екатеринбург, Россия*

Поступила в редакцию 11 марта 2016 г.

Исследовано влияние анизотропии упругих свойств на электрон-фононное увлечение и термоэлектрические явления в бесщелевых полупроводниках с вырожденной статистикой носителей тока. Показано, что фокусировка фононов приводит к ряду новых эффектов в термоэдс увлечения при низких температурах, когда диффузное рассеяние фононов на границах является доминирующим механизмом релаксации. Проанализировано влияние фокусировки фононов на зависимости термоэлектродвижущей силы в кристаллах HgSe:Fe от геометрических параметров и направлений теплового потока относительно осей кристалла в режиме кнудсеновского течения фононного газа. Определены кристаллографические направления, обеспечивающие максимальные и минимальные значения термоэдс. Изучена роль квазипродольных и квазипоперечных фононов в термоэдс увлечения в кристаллах HgSe:Fe при низких температурах. Показано, что в направлениях фокусировки медленные квазипоперечные фононы в достаточно длинных образцах вносят преобладающий вклад в термоэдс увлечения.

DOI: 10.7868/S0044451016090145

1. ВВЕДЕНИЕ

Анизотропия упругих свойств кубических кристаллов приводит к ряду новых эффектов в фононном транспорте. Одним из таких эффектов является фокусировка фононов, т. е. возникновение направлений, в которых будут преимущественно распространяться фононы данной колебательной моды [1–3]. Экспериментальные исследования [4] показали, что при достаточно низких температурах, когда длина свободного пробега фононов превышает поперечный размер образца, фокусировка фононов приводит к двум эффектам в теплопроводности. Первым эффектом является зависимость теплопроводности от направления градиента температуры относительно кристаллографических осей: для кристаллов Si с квадратным сечением величина теплопроводности при низких температурах в направлении [100] оказалась на 50% больше, чем в направлении [111]. Вторым эффектом является зависимость величин

теплопроводности образцов с прямоугольным сечением от ориентации широкой грани образца. Для двух одинаковых по размерам образцов и одинакового направления градиента температуры оказалось, что теплопроводность образца с широкой гранью {001} на 33% выше, чем для образца с широкой гранью {110}. Получить аналитические выражения для времен релаксации фононов в образцах конечной длины и проанализировать температурные зависимости теплопроводности авторам работы [4] не удалось. Такой расчет удалось выполнить в работах [5, 6]. В этих работах в рамках феноменологического подхода Казимира – МакКарди [4, 7] дано аналитическое решение задачи о кнудсеновском течении фононного газа в образцах конечной длины с круглым, квадратным и прямоугольным сечениями. Это позволило определить времена релаксации фононов различных поляризаций при диффузном рассеянии фононов на границах, а также проанализировать анизотропию и температурные зависимости теплопроводности для образцов кремния, исследованных в работе [4]. В работе [8] показано, что для корректного учета эффектов, обусловленных фокусировкой фононов, при расчете теплопроводности монокристаллических образцов необходимо ввести два

* E-mail: kuleev@imp.uran.ru

ориентационных параметра, которые учитывают зависимости кинетических характеристик от направления теплового потока $[L]$ и ориентации плоскости пленки (или широкой грани образца) $\{J\}$. При этом ориентационные параметры $[L]$ и $\{J\}$ определяются через компоненты групповой скорости, параллельные и перпендикулярные направлению теплового потока. Использование этого метода и вычисленных нами времен релаксации фононов [5, 6] позволило адекватно описать экспериментальные данные теплопроводности кристаллов кремния во всем диапазоне температур и объяснить оба эффекта в теплопроводности, обнаруженных в работе МакКарди [4]. Показано, что оба эффекта обусловлены непосредственно фокусировкой и дефокусировкой фононных мод. Здесь этот метод будет использован для анализа влияния фокусировки фононов на электрон-фононное увлечение и термоэлектрические явления в бесщелевых полупроводниках с вырожденной статистикой носителей тока.

Отметим, что проблема фокусировки фононов не ограничивается влиянием на фононный транспорт в диэлектрических кристаллах. Она может оказаться актуальной при исследовании кинетических явлений в металлах и полупроводниках, обусловленных увлечением электронов фононами и их взаимным увлечением. При достаточно низких температурах, когда электрон-фононное взаимодействие становится доминирующим механизмом релаксации электронов (а для взаимного увлечения оно должно доминировать и для фононов), такие кинетические коэффициенты как электропроводность и термоэдс увлечения становятся зависящими от механизма релаксации импульса фононов [10–17]. При достаточно низких температурах основным механизмом релаксации фононов является диффузное рассеяние на границах образца [10–18]. Естественно, что фокусировка фононов, приводящая к анизотропии теплопроводности в режиме граничного рассеяния, должна приводить также к анизотропии термоэдс увлечения. Поэтому целью настоящей работы является исследование влияния анизотропии упругой энергии на электрон-фононное увлечение и термоэлектрические явления в полупроводниковых кристаллах кубической симметрии при низких температурах. Планируется проанализировать влияние упругой анизотропии на зависимости термоэлектродвижущей силы в кристаллах HgSe:Fe от геометрических параметров и направлений теплового потока относительно осей кристалла при низких температурах, а также определить кристаллографические направления, обеспечивающие максимальные и минимальные зна-

чения термоэдс. Ранее при исследовании термоэдс увлечения в полупроводниках для фононов использовалась модель изотропной среды [12–18], поэтому эффекты, обусловленные влиянием анизотропии упругой энергии на электрон-фононное увлечение, не могли быть рассмотрены.

Хорошо известно [10–12], что в модели изотропной среды электроны могут взаимодействовать только с продольными фононами. Однако в упруго анизотропных кристаллах распространяются квазипродольные и квазипоперечные фононы, которые имеют отличную от нуля продольную компоненту и могут в рамках стандартной теории потенциала деформации [9] взаимодействовать с электронами. Анализ упругих волн в кубических кристаллах показал, что вклад поперечной компоненты в квазипродольные колебания в кубических кристаллах мал, и им можно пренебречь [19]. Вклад продольных компонент в квазипоперечные моды не является малым: максимальное значение его для медленной поперечной моды составляет 13, 14, 16.5% соответственно для кристаллов HgSe:Fe, Si, Ge и достигает 27% для кристалла KCl [19]. Следует отметить, что вклад поперечных мод в теплопроводность Si и Ge при низких температурах в направлениях $[100]$ превышает 90% как за счет большей плотности состояний, так и за счет эффектов, связанных с фокусировкой фононов. Итак, кроме эффектов, связанных с фокусировкой фононов, в отличие от ранее выполненных исследований будет изучена роль квазипоперечных фононов в электрон-фононном увлечении.

Для того чтобы излишне не усложнять анализ новых эффектов, мы сделаем ряд упрощающих предположений относительно подсистемы электронов. Во-первых, спектр электронов проводимости предполагается изотропным. Это позволит нам ограничиться только учетом анизотропии, связанной с подсистемой фононов. Во-вторых, рассмотрим термоэлектрические явления в полупроводниках с вырожденной статистикой носителей тока. Развитую теорию применим к анализу анизотропии и температурных зависимостей термоэдс увлечения в бесщелевом полупроводнике HgSe:Fe, в котором спектр электронов проводимости считается изотропным. В работах [20, 21] были измерены термоэдс и теплопроводность кристаллов HgSe:Fe с концентрацией примесей железа $N_{\text{Fe}} \approx 1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$, концентрацией электронов $n \approx 4.6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$ и энергией Ферми $\varepsilon_F = 155 \text{ мэВ}$. Для этих полупроводников при низких температурах выполняется условие сильного вырождения, что позволяет снять

интеграл по электронным энергиям при вычислении термоэдс.

Заметим, что в вырожденных полупроводниках с достаточно высокой энергией Ферми, из-за законов сохранения энергии в электрон-фононных взаимодействиях могут участвовать только электроны, находящиеся в пределах теплового размытия поверхности Ферми. Поэтому для них при температурах, гораздо меньших температуры Дебая, электроны могут взаимодействовать только с длинноволновыми фононами, волновой вектор которых существенно меньше дебаевского волнового вектора \mathbf{q}_d [10–12]. В связи с этим для фононов мы воспользуемся моделью анизотропного континуума [22, 23]. В этой модели упругая энергия кубического кристалла определяется тремя модулями упругости второго порядка c_{11} , c_{12} и c_{44} . Решения уравнений Кристоффеля позволяют определить спектр и векторы поляризации акустических мод [22, 23] и проанализировать влияние упругой анизотропии на увлечение электронов фононами и термоэлектрические коэффициенты.

Релаксация импульса фононов в неравновесной электрон-фононной системе анализируется в трехмодовой модели Каллавея [24] (см. также [18, 25–28]). При описании термоэдс увлечения мы определяем неравновесные функции распределения всех акустических мод, выделяем вклады резистивных и нормальных процессов релаксации фононов, а также учитываем эффекты, связанные с фокусировкой фононов, особую роль нормальных процессов рассеяния, которые перераспределяют энергию и импульс между различными фононными модами и стремятся установить дрейфовое локально-равновесное распределение.

В настоящей работе последовательно учитывается влияние анизотропии упругой энергии на электрон-фононное увлечение. Нам удалось сделать существенный шаг вперед в изучении эффектов, связанных с фокусировкой фононов в полупроводниках. Рассчитан вклад квазипоперечных фононов в термоэдс увлечения. Мы показали, что в направлениях фокусировки он может превышать вклад продольных фононов. Установлена непосредственная корреляция угловых зависимостей термоэдс увлечения, плотности фононных состояний и длин свободного пробега фононов медленной квазипоперечной моды в режиме кнудсеновского течения фононного газа для произвольного направления теплового потока.

2. ФОКУСИРОВКА ФОНОНОВ И АНИЗОТРОПИЯ ДЛИН СВОБОДНОГО ПРОБЕГА ФОНОНОВ В КРИСТАЛЛАХ HgSe:Fe ПРИ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУРАХ

Прежде чем переходить к анализу термоэдс увлечения, рассмотрим фокусировку фононов в кристаллах HgSe:Fe при низких температурах, когда доминирующую роль играет диффузное рассеяние фононов на границах образца. Этот эффект связан с неколлинеарностью фазовой и групповой скоростей фононов. Для определения этих величин воспользуемся моделью анизотропного континуума [22, 23]. В этой модели спектр фононов с поляризацией λ при $q \ll q_D$ может быть представлен в виде

$$\omega_q^\lambda = S^\lambda(\theta, \varphi) q. \quad (1)$$

Фазовая скорость $S^\lambda(\theta, \varphi)$ определяет анизотропию спектра. Она зависит от угловых переменных θ и φ вектора \mathbf{q} . В системе координат по ребрам куба она имеет вид [19]

$$S^\lambda(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{c_{44}}{\rho}} \left(1 + \frac{c_{11} - c_{44}}{c_{44}} \left(\frac{1}{3} + z_\lambda \right) \right)^{1/2}, \quad (2)$$

$$z_{t_1, t_2} = \frac{2}{3} r \cos \left(\frac{Q}{3} \mp \frac{2\pi}{3} \right), \quad z_L = \frac{2}{3} r \cos \frac{Q}{3},$$

$$Q = \arccos p,$$

$$p = \frac{1}{r^3} (1 + 4.5(k^2 - 1)\xi + 13.5\eta(k - 1)^2(2k + 1)),$$

$$r = \sqrt{1 + 3(k^2 - 1)\xi}, \quad k = \frac{c_{12} + c_{44}}{c_{11} - c_{44}},$$

где c_{ij} — упругие модули второго порядка, ρ — плотность кристалла, $\xi = n_1^2 n_2^2 + n_1^2 n_3^2 + n_2^2 n_3^2$ и $\eta = n_1^2 n_2^2 n_3^2$ — кубические гармоники, а $\mathbf{n} = \mathbf{q}/q = (\sin \theta \cos \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \theta)$ — единичный волновой вектор фонона. Индексы поляризации фононов λ выберем следующим образом: индекс L будет соответствовать продольным фононам, а t_1 и t_2 — соответственно «быстрой» (верхней) и «медленной» (нижней) поперечным колебательным модам. Векторы поляризации фононов различных колебательных ветвей определяются выражениями [19]

$$e_j^\lambda = \frac{1}{A_\lambda} \left\{ \frac{n_j}{\psi_j^\lambda} \right\}, \quad A_\lambda = \pm \sqrt{\sum_j \frac{n_j^2}{(\psi_j^\lambda)^2}}, \quad (3)$$

$$\mathbf{e}^\lambda \cdot \mathbf{n} = \frac{1}{A_\lambda} \sum_j \frac{n_j^2}{\psi_j^\lambda}, \quad \psi_j^\lambda = \frac{1}{3} + z_\lambda + (k - 1)n_j^2.$$

Угловые зависимости фазовых скоростей акустических мод в кристаллах HgSe:Fe для волновых векторов в плоскости грани куба приведены на рис. 1а.

Таблица. Модули упругости второго порядка c_{ij} , плотность ρ , параметр анизотропии $k - 1$ и углы $\theta_1^{t_2\{100\}}$, $\theta_2^{t_2\{100\}}$, $\theta_3^{t_2\{100\}}$ для кристаллов HgSe:Fe и Si

Соединение	$c_{11},$ 10^{12} дин/см ²	$c_{12},$ 10^{12} дин/см ²	$c_{44},$ 10^{12} дин/см ²	$\rho,$ г/см ³	$k - 1$	$\theta_1^{t_2\{100\}}$	$\theta_2^{t_2\{100\}}$	$\theta_3^{t_2\{100\}}$	$\langle\langle \mathbf{e}^L \cdot \mathbf{n} \rangle\rangle^2$	$\langle\langle \mathbf{e}^{t_1} \cdot \mathbf{n} \rangle\rangle^2$	$\langle\langle \mathbf{e}^{t_2} \cdot \mathbf{n} \rangle\rangle^2$
HgSe:Fe	0.69	0.51	0.23	8.26	0.61	35.5°	17.8°	21.2°	0.99	$6.7 \cdot 10^{-4}$	$7.0 \cdot 10^{-3}$
Si	1.677	0.65	0.804	2.33	0.67	23.5°	12.0°	6.9°	0.99	$7.5 \cdot 10^{-4}$	$7.9 \cdot 10^{-3}$

Значения модулей упругости второго порядка при $T = 4.2$ К взяты из работы [29]. Следует отметить, что величины модулей упругости в кристаллах HgSe:Fe значительно меньше, чем в Si, а их плотность в 3.5 раза больше, чем у Si (см. таблицу). В связи с этим для них в направлениях типа [100] фазовые скорости поперечных фононов в четыре раза, а фазовые скорости продольных фононов в три раза меньше, чем в Si (см. рис. 1б). Однако значения безразмерного параметра анизотропии упругой энергии $k - 1$ для кристаллов HgSe:Fe и Si близки и составляют соответственно 0.61 и 0.67. Поэтому угловые зависимости фазовых скоростей для акустических мод качественно подобны, различаясь фактически только масштабным множителем (см. рис. 1а).

Как видно на рис. 1а, максимальную анизотропию имеет медленная поперечная мода t_2 . Проиллюстрируем фокусировку фононов на примере этой моды. Построим для нее изоэнергетическую поверхность (см. рис. 1б). Групповая скорость фонона, определяющая направление переноса энергии, перпендикулярна этой поверхности. Для произвольного направления волнового вектора она может быть представлена в виде [5]

$$\begin{aligned}
 \mathbf{V}_g^\lambda(\theta, \varphi) &= S^\lambda(\theta, \varphi) \tilde{\mathbf{V}}_g^\lambda(\theta, \varphi), \\
 \tilde{\mathbf{V}}_g^\lambda(\theta, \varphi) &= \mathbf{n} + S_\theta^\lambda \mathbf{e}_\theta + S_\varphi^\lambda \mathbf{e}_\varphi, \\
 S_\theta^\lambda(\theta, \varphi) &= \left(\frac{1}{S^\lambda} \right) \frac{\partial S^\lambda}{\partial \theta}, \\
 S_\varphi^\lambda(\theta, \varphi) &= \frac{1}{\sin \theta} \left(\frac{1}{S^\lambda} \right) \frac{\partial S^\lambda}{\partial \varphi}.
 \end{aligned} \tag{4}$$

Здесь $\mathbf{e}_\theta = (\cos \theta \cos \varphi, \cos \theta \sin \varphi, -\sin \theta)$, $\mathbf{e}_\varphi = (-\sin \varphi, \cos \varphi, 0)$, а вектор \mathbf{n} определен выше. Векторы \mathbf{n} , \mathbf{e}_θ и \mathbf{e}_φ образуют взаимно ортогональную тройку единичных векторов. Как видно на рис. 1б, расходящийся сектор волновых векторов $-\theta_1 \leq \theta \leq \theta_1$ в плоскости {100} для моды t_2 превращается в сходящийся к направлению [001] сектор групповых

скоростей. Угол θ_1 определяет направление волнового вектора, для которого вектор групповой скорости $\mathbf{V}_g^{t_2}(\theta_g)$ будет параллелен направлению фокусировки — в данном случае направлению [001], тогда $\theta_g^\lambda = n\pi/2$ (n — целое) (см. рис. 1б). Угол θ_g определяет направление групповой скорости в плоскости {100} (см. рис. 1б). Характерными особенностями на изоэнергетической поверхности (поверхности медленности) являются линии нулевой кривизны, в которых происходит переход от выпуклых к вогнутым областям. Для сечения этой поверхности плоскостью грани куба {100} мы получаем точки нулевой кривизны, угол между которыми равен $2\theta_2$ (см. рис. 1б). В точках нулевой кривизны на поверхности медленности вектор групповой скорости фонона имеет максимальное отклонение от направления [100], и этот угол мы обозначим как $\theta_3 = \theta_g^\lambda(\theta_2)$. Построив $\mathbf{V}_g^{t_2}$ для углов $-\theta_2 \leq \theta \leq \theta_2$, мы определим угол «схождения» групповых скоростей θ_3 , или, точнее, величину сектора, внутри которого будут распространяться фононы с волновыми векторами, принадлежащими сектору $-\theta_1 \leq \theta \leq \theta_1$ (см. рис. 1б). В изотропной среде направления распространения фонона и его волнового вектора совпадают, поэтому фононы, распространяющиеся в изотропной среде в секторе $-\theta_1 \leq \theta \leq \theta_1$, в кристаллах HgSe:Fe будут распространяться в существенно меньшем секторе $-\theta_3 \leq \theta \leq \theta_3$ (см. рис. 1б). Таким образом, плотность состояний для этой моды в направлениях фокусировки близких к [100] существенно возрастает по сравнению с изотропной средой. Аналогично можно показать, что продольные фононы фокусируются в направлении [111], а быстрая поперечная мода — в направлении [110]. Из сравнения рис. 1а и 1б видно, что фокусировка фононов происходит в тех направлениях, где поверхность постоянной частоты принимает минимальные значения, а фазовая скорость — максимальные.

Предложенный нами метод анализа фокусировки медленной квазипоперечной моды позволяет сде-

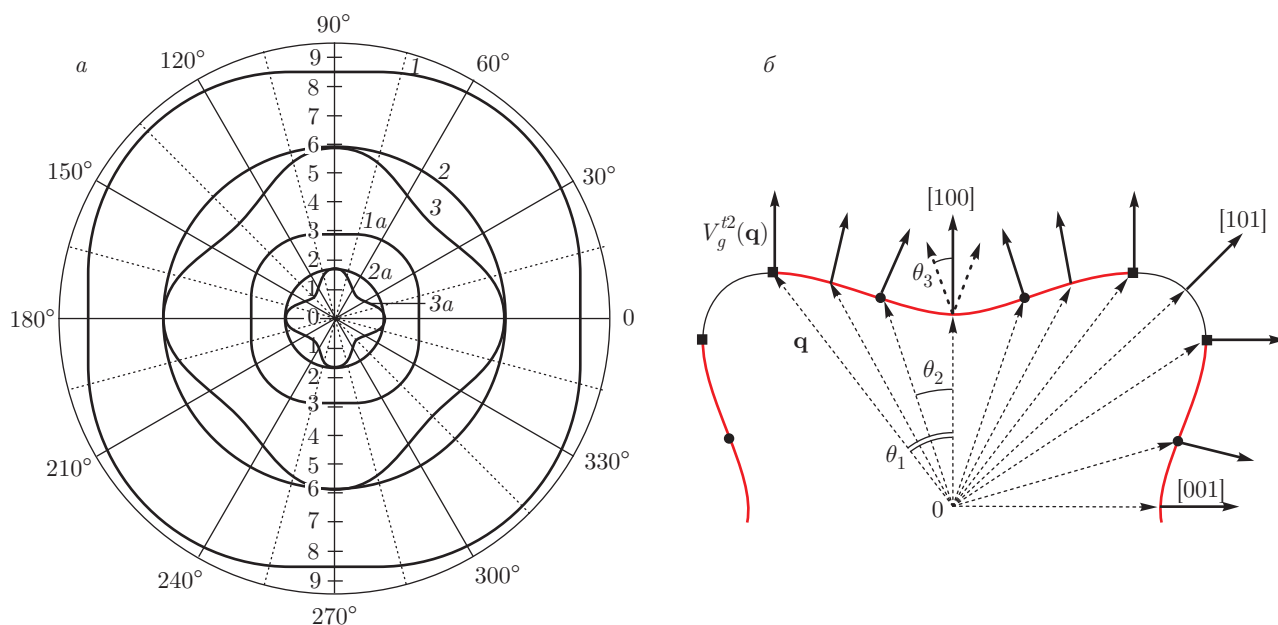


Рис. 1. а) Угловые зависимости фазовых скоростей $S^\lambda(\theta, \varphi)$ (10^5 см/с) в кристаллах Si (кривые 1, 2, 3) и HgSe:Fe (кривые 1a, 2a, 3a) для волновых векторов в плоскости грани куба: кривые 1, 1a — для продольных, 2, 2a — для быстрых, 3, 3a — для медленных поперечных фононов. б) Сечение изоэнергетической поверхности плоскостью xz в кристалле HgSe:Fe для медленной поперечной моды. Стрелками изображены волновые векторы внутри поверхности и соответствующие им групповые скорости фононов вне ее

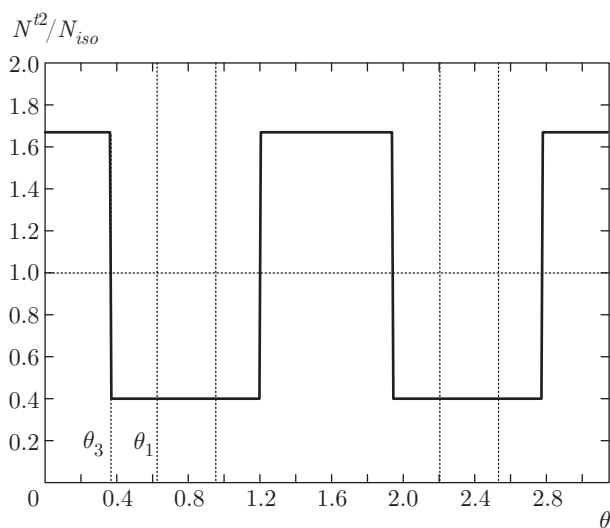


Рис. 2. Угловое распределение плотности состояний медленной квазиперечной моды для волновых векторов в плоскости $\{100\}$ в кристаллах HgSe:Fe

лать количественные оценки изменения углового распределения плотности фононных состояний в кристаллах HgSe:Fe. Для этого введем среднюю плотность фононных состояний моды t_2 для волновых векторов в плоскости $\{100\}$, приходящуюся на

единичный угол для областей фокусировки $-\theta_3 \leq \theta \leq \theta_3$ $N_F^{\{100\}}$ и изотропной среды $N_{iso}^{(1)} = N_{iso}/2\pi$. Поскольку расходящийся сектор волновых векторов для изотропной среды в плоскости $\{100\}$ с углом $2\theta_1 = 71.0^\circ$ превращается в расходящийся сектор векторов групповых скоростей фононов с углом $2\theta_3 = 42.4^\circ$, средняя плотность состояний в областях фокусировки фононов будет больше, чем в изотропной среде, $N_{F[100]}^{\{100\}t_2}/N_{iso}^{(1)} = 2\theta_1/2\theta_3 = 1.67$. Для области дефокусировки средняя плотность состояний $N_{D[110]}^{\{100\}t_2}$ будет меньше, чем $N_{iso}^{(1)}$. Для нее нетрудно получить $N_{D[110]}^{\{100\}t_2}/N_{iso}^{(1)} = (\pi - 4\theta_1)/(\pi - 4\theta_3) = 0.40$. Из этого следует, что средняя плотность состояний для волновых векторов в плоскости $\{100\}$ в областях фокусировки будет больше, чем для областей дефокусировки, в 4.2 раза (см. рис. 2). Как мы увидим далее, такое резкое уменьшение плотности фононных состояний при переходе от направлений фокусировки $[001]$ к направлениям дефокусировки $[011]$ приведет к резкому уменьшению вклада в термоэдс от медленной квазиперечной моды в этом же интервале углов.

Что касается векторов поляризации, то для медленной моды скалярное произведение $\mathbf{e}^{t_2} \cdot \mathbf{n}$ обращается в нуль для симметричных направлений, а

его максимальное значение составляет 13 % и 14 % соответственно для кристаллов HgSe:Fe и Si. Усредненные величины $\langle (e^{t2} \cdot \mathbf{n})^2 \rangle$, входящие в константу электрон-фононного взаимодействия, составляют $7.0 \cdot 10^{-3}$ и $8.0 \cdot 10^{-3}$ для кристаллов HgSe:Fe и Si (см. таблицу). Для быстрой поперечной моды усредненные величины $\langle (e^{t1} \cdot \mathbf{n})^2 \rangle$ оказываются на порядок меньше, тогда как для продольных фононов в обоих кристаллах этот фактор в электрон-фононном взаимодействии на два порядка больше, $\langle (e^L \cdot \mathbf{n})^2 \rangle \approx 0.99$.

Проанализируем анизотропию длин свободного пробега фононов для всех акустических мод в кристаллах HgSe:Fe аналогично тому, как это было сделано в работе [5] для кристаллов Si, и сравним с результатами, полученными для образцов Si с квадратным сечением, исследованных в работе [4]. Для этого рассмотрим образцы HgSe:Fe тех же геометрических размеров, что и в работе [4], т. е. возьмем стержень с квадратным сечением $D = 0.293$ см и длиной $L = 2.9$ см. При температурах, гораздо меньших температуры Дебая ($T \ll T_D$), представим теплопроводность в виде аддитивной суммы вкладов от всех колебательных ветвей (см. [5, 32]):

$$\begin{aligned} \kappa_{[I(\psi)]}^{\{J\}}(T) &= \frac{1}{3} C_V(T) \bar{S} \Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}} = \\ &= \sum_{\lambda} \frac{1}{3} C_V^{\lambda}(T) \bar{S}^{\lambda} \Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}\lambda}, \\ C_V &= \frac{2\pi^2 k_B^4}{5\hbar^3} T^3 \frac{1}{3} \sum_{\lambda} \langle (S^{\lambda})^{-3} \rangle, \\ \bar{S} &= \frac{\sum_{\lambda} \langle (S^{\lambda})^{-2} \rangle}{\sum_{\lambda} \langle (S^{\lambda})^{-3} \rangle}, \quad \bar{S}^{\lambda} = \frac{\langle (S^{\lambda})^{-2} \rangle}{\langle (S^{\lambda})^{-3} \rangle}, \\ \langle (S^{\lambda})^{-n} \rangle &= \frac{1}{4\pi} \int d\Omega_q (S_{\lambda})^{-n}, \\ d\Omega_q &= \sin \theta d\theta d\varphi. \end{aligned} \tag{5}$$

Удельные теплоемкости $C_V(T)$ и $C_V^{\lambda}(T)$, а также средние скорости фонона \bar{S} и \bar{S}^{λ} не зависят от направления потока тепла. Поэтому анизотропия теплопроводности и вкладов в нее от колебательных мод определяются длинами свободного пробега $\Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}}$ и $\Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}\lambda}$. Мы рассчитали угловые зависимости длин пробега фононов для случаев, когда тепловой поток вращается в плоскости грани куба yz $\{J\} = \{100\}$ или в диагональной плоскости $\{J\} = \{110\}$. Для анизотропии теплопроводности и средних длин пробега в кристаллах HgSe:Fe и Si мы получили близкие результаты: в кристаллах HgSe:Fe $\Lambda_{[100]} : \Lambda_{[110]} : \Lambda_{[111]} = 1.51 : 1.13 : 1$, в кри-

сталлах Si $\Lambda_{[100]} : \Lambda_{[110]} : \Lambda_{[111]} = 1.50 : 1.08 : 1$ (см. рис. 3). Отметим, что для кристаллов Si результаты расчета в симметричных направлениях хорошо согласуются с экспериментальными данными [4]. Как видно на рис. 3, для образцов с квадратным сечением длины свободного пробега фононов для каждой колебательной моды в кристаллах HgSe:Fe и Si достигают максимальных значений в направлениях их фокусировки, причем в этих направлениях они превышают длины пробега фононов остальных колебательных мод. Так, например, в кристаллах HgSe:Fe для отношения длин пробега в направлениях типа [100] имеем $\Lambda_{[100]}^{\{100\}t2} : \Lambda_{[100]}^{\{100\}t1} : \Lambda_{[100]}^{\{100\}L} = 2.11 : 1.61 : 1$, в направлениях типа [111] — $\Lambda_{[111]}^{\{110\}L} : \Lambda_{[111]}^{\{110\}t2} : \Lambda_{[111]}^{\{110\}t1} = 1.58 : 1.26 : 1$, а в направлениях типа [110] — $\Lambda_{[110]}^{\{100\}t1} : \Lambda_{[110]}^{\{100\}L} : \Lambda_{[110]}^{\{100\}t2} = 1.26 : 1.12 : 1$ (см. рис. 3). Качественно подобные результаты получаются и для кристаллов Si: в направлениях типа [100] имеем $\Lambda_{[100]}^{\{100\}t2} : \Lambda_{[100]}^{\{100\}t1} : \Lambda_{[100]}^{\{100\}L} = 2.33 : 1.46 : 1$, в направлениях типа [111] — $\Lambda_{[111]}^{\{110\}L} : \Lambda_{[111]}^{\{110\}t2} : \Lambda_{[111]}^{\{110\}t1} = 1.56 : 1.35 : 1$, а в направлениях типа [110] — $\Lambda_{[110]}^{\{100\}t1} : \Lambda_{[110]}^{\{100\}L} : \Lambda_{[110]}^{\{100\}t2} = 1.50 : 1.27 : 1$. Это не удивительно, так как значения параметра анизотропии $k-1$ для кристаллов HgSe:Fe и Si близки (см. таблицу).

Из приведенных выше результатов следует, что анизотропия теплопроводности в кристаллах HgSe:Fe, как и в Si, в режиме граничного рассеяния обусловлена медленной поперечной модой, которая фокусируется в направлении [100]. Она обеспечивает максимум теплопроводности в этом направлении, и ее вклад составляет 64 % и 61 % соответственно для кристаллов HgSe:Fe и Si. Направление [100] соответствует направлению дефокусировки продольных фононов. Их вклад в теплопроводность кристаллов HgSe:Fe и Si минимален и составляет соответственно 5 % и 8 %. В направлениях типа [111] фокусируются продольные фононы и их вклад в теплопроводность кристаллов HgSe:Fe и Si возрастает более, чем в два раза и составляет соответственно 12 % и 19 %. Таким образом, поперечные фононы вносят преобладающий вклад в теплопроводность этих кристаллов.

Ранее при интерпретации экспериментальных данных по теплопроводности кристаллов HgSe:Fe в работах [20, 21, 30] использовалась изотропная одномодовая модель, основанная на предположении, что все три акустические моды вносят одинаковый и изотропный вклад в теплопроводность. Очевид-

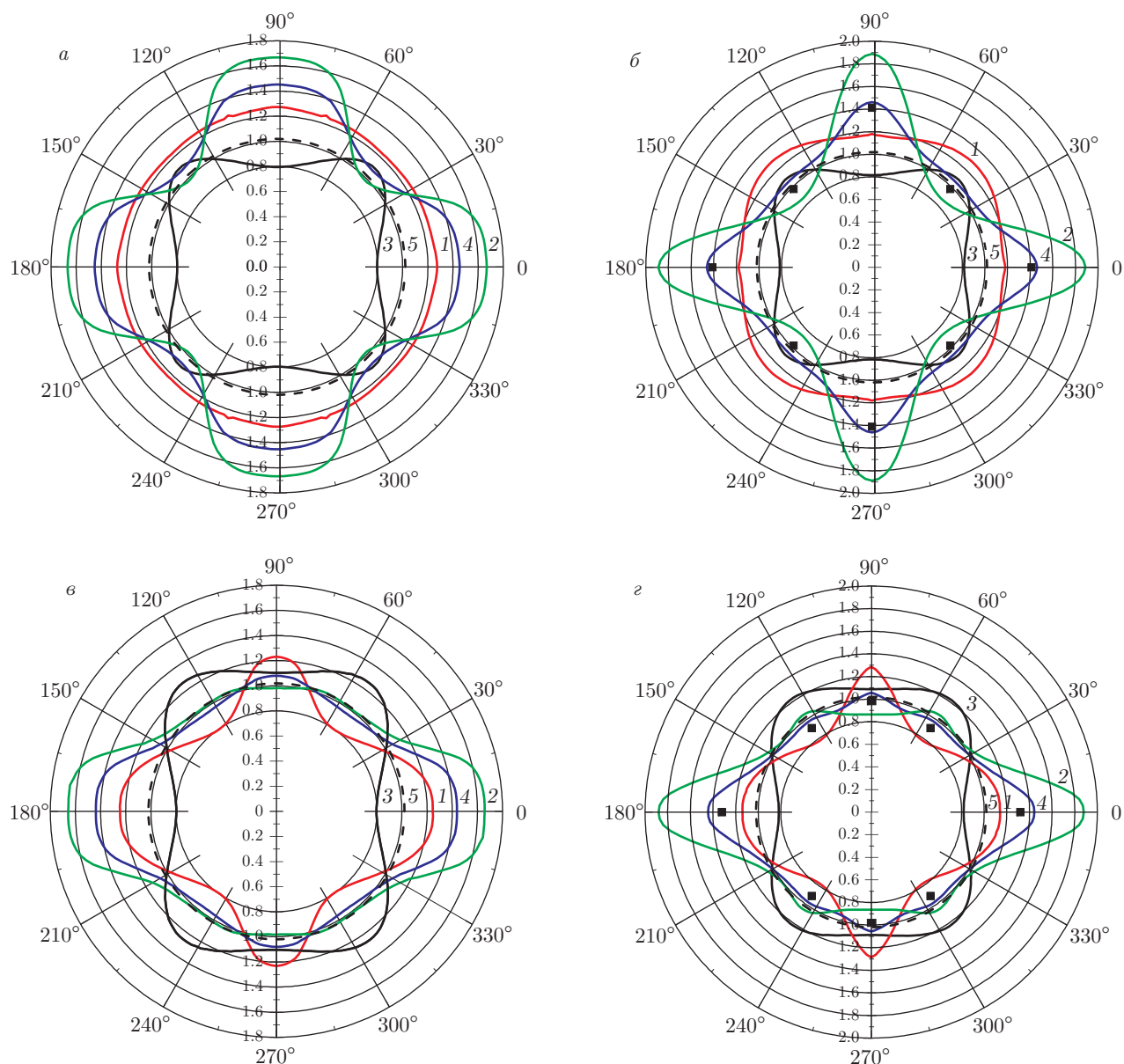


Рис. 3. Угловые зависимости длин свободного пробега фононов $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}\lambda} = \Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}\lambda}/D$ и $\tilde{\Lambda}_{[I(\psi)]}^{\{J\}} = \Lambda_{[I(\psi)]}^{\{J\}}/D$ в HgSe:Fe (*а, б*) и Si (*б, г*) для образцов с квадратным сечением $D = 0.293$ см и длиной $L = 2.9$ см в случаях, когда градиент температуры вращается в плоскости грани куба (*а, б*) и в диагональной плоскости (*в, г*): 1 — быстрая поперечная мода, 2 — медленная поперечная мода, 3 — продольная мода, 4 — средняя длина свободного пробега. Штриховая кривая 5 — для изотропной среды ($\Lambda_{iso} = 1.02D$). Точки — экспериментальные значения длин пробега для Si [5]

но, что это предположение некорректно. Вклад различных акустических мод в теплопроводность для различных направлений различается значительно и существенно зависит от направления их фокусировки. Анализ фононного транспорта в образцах конечной длины с прямоугольным сечением, проведен-

ный в работах [31, 32] в рамках феноменологического подхода Казимира – МакКарди, показал, что длины пробега для фононов различных поляризаций в модели изотропной среды равны друг другу и средней длине пробега. Они не зависят от модулей упругости, а полностью определяются геометрическими

параметрами образцов (см. рис. 3), поэтому могут использоваться в качестве удобной системы сравнения для длин пробега в различных упруго анизотропных структурах. На рис. 3 их зависимости приведены штриховыми линиями. Как видно на рис. 3, в направлениях фокусировки фононов их длины пробега значительно превышают значения, полученные в модели изотропной среды, $\Lambda_{iso} = 1.02D$. Однако в направлениях дефокусировки длины пробега фононов в кристаллах HgSe:Fe и Si заметно меньше, чем Λ_{iso} . Таким образом, изотропная модель является некорректной, и необходим учет эффектов, обусловленных анизотропией упругой энергии.

Итак, мы показали, что в направлениях фокусировки не только плотность состояний, но и длины свободного пробега фононов для каждой колебательной моды имеют максимальные значения. Очевидно, что чем больше длина свободного пробега фононов, тем больше вероятность электрона столкнуться с неравновесным фононом и получить дополнительный импульс от градиента температуры. Поэтому термоэдс увлечения при взаимодействии электронов с модой λ должна иметь максимальные значения в направлениях фокусировки этой моды. Из проведенного выше анализа можно сделать качественный вывод относительно анизотропии термоэдс увлечения. Если главную роль в электрон-фононном увлечении будут играть продольные фононы, то максимальные значения термоэдс при достаточно низких температурах должны наблюдаться в направлениях типа [111], а минимальные значения — в направлениях их дефокусировки — [100]. Если главную роль в электрон-фононном увлечении (как это имеет место в теплопроводности) будет играть медленная квазипоперечная мода, то максимальные значения термоэдс при достаточно низких температурах должны наблюдаться в направлениях типа [100]. Следует отметить, что соотношения этих вкладов (а также положения максимумов) в значительной степени будут определяться величинами констант деформационного взаимодействия электронов с продольными и квазипоперечными фононами и факторами $\langle (e^\lambda \cdot \mathbf{n})^2 \rangle$.

3. ВЛИЯНИЕ N -ПРОЦЕССОВ ФОНОН-ФОНОННОГО РАССЕЯНИЯ НА РЕЛАКСАЦИЮ ИМПУЛЬСА ЭЛЕКТРОНОВ И ФОНОНОВ В НЕРАВНОВЕСНОЙ ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЙ СИСТЕМЕ

Рассмотрим для простоты полупроводник с изотропным законом дисперсии носителей тока. Вычис-

лим поток заряда, обусловленный действием электрического поля ($\mathbf{E} = \{E_x, 0, 0\}$) и градиента температуры $\nabla T = (\nabla_x T, 0, 0)$. Система кинетических уравнений для неравновесных электронной $f(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ и фононной $N^\lambda(\mathbf{q}, \mathbf{r})$ функций распределения с учетом N -процессов рассеяния фононов имеет вид [15–17]

$$\begin{aligned} \frac{e}{\hbar} \mathbf{E}_0 \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} + (\mathbf{v}_k \nabla_r) f_{\mathbf{k}} &= I_{ei}(f_{\mathbf{k}}) + I_{eph}(f_{\mathbf{k}}, N_q^\lambda), \\ \mathbf{V}_g^\lambda \nabla_r N_q^\lambda &= -(N_q^\lambda - N_{q\lambda}^{(0)}) \nu_{ph}^{(1)\lambda} - \\ &\quad - (N_q^\lambda - N(\mathbf{q}, \mathbf{u}^\lambda)) \nu_{phN}^\lambda + I_{phe}(N_q^\lambda, f_{\mathbf{k}}). \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь $\mathbf{v}_k = (1/\hbar) \partial \varepsilon_k / \partial \mathbf{k}$, $\mathbf{V}_g^\lambda = \partial \omega_q^\lambda / \partial \mathbf{q}$ — групповые скорости электронов и акустических фононов с поляризацией λ , $N_{q\lambda}^0$ — функция Планка, $\nu_N^\lambda(q)$ — скорость релаксации фононов в нормальных процессах (N -процессах) рассеяния, частота $\nu_{ph}^{(1)\lambda} = \nu_{phU}^\lambda(q) + \nu_{phI}^\lambda(q) + \nu_{phB}^\lambda(q)$ включает все неэлектронные резистивные скорости релаксации фононов, обусловленные рассеянием фононов на фононах в процессах переброса $\nu_U^\lambda(q)$, дефектах и изотопическом беспорядке $\nu_{phI}^\lambda(q)$ и границах образца $\nu_{phB}^\lambda(q)$. В уравнении (1) учтено, что N -процессы рассеяния приводят фононную подсистему к локально-равновесному распределению Планка с дрейфовой скоростью \mathbf{u}^λ , которая может быть различной для фононов различной поляризации [17, 18, 24–26]:

$$\begin{aligned} N(\mathbf{q}, \mathbf{u}^\lambda) &= \left(\exp \left(\frac{\hbar \omega_q^\lambda - \hbar \mathbf{q} \cdot \mathbf{u}^\lambda}{k_B T} \right) - 1 \right)^{-1} \approx \\ &\approx N_{q\lambda}^0 + \frac{\hbar \mathbf{q} \cdot \mathbf{u}^\lambda}{k_B T} N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1). \end{aligned} \quad (7)$$

Интегралы столкновений электронов с примесями I_{ei} , фононами I_{eph} и фононов с электронами I_{phe} определены в работах [12–18]:

$$\begin{aligned} I_{eph}(f_{\mathbf{k}}, N_{\mathbf{q}}) &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} |C_q^\lambda|^2 \times \\ &\quad \times \{ [f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(1 - f_{\mathbf{k}})(N_{\mathbf{q}}^\lambda + 1) - \\ &\quad - f_{\mathbf{k}}(1 - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})N_{\mathbf{q}}^\lambda] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar \omega_q^\lambda) - \\ &\quad - [f_{\mathbf{k}}(1 - f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})(N_{\mathbf{q}}^\lambda + 1) - f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}(1 - f_{\mathbf{k}})N_{\mathbf{q}}^\lambda] \times \\ &\quad \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \hbar \omega_q^\lambda) \}, \\ I_{phe} &= \frac{4\pi}{\hbar} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}} |C_q^\lambda|^2 [f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}(1 - f_{\mathbf{k}})(N_{\mathbf{q}}^\lambda + 1) - \\ &\quad - f_{\mathbf{k}}(1 - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}})N_{\mathbf{q}}^\lambda] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar \omega_q^\lambda), \end{aligned} \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} |C_q^\lambda(\theta, \varphi)|^2 &= (C_0^\lambda(\theta, \varphi))^2 q, \\ (C_0^\lambda(\theta, \varphi))^2 &= \frac{E_{0\lambda}^2 (e^\lambda(\theta, \varphi) \mathbf{n})^2 \hbar}{S^\lambda(\theta, \varphi) \rho}, \end{aligned}$$

$E_{0\lambda}$ — константа деформационного потенциала. Спектр электронов проводимости предполагается изотропным, а для фононов используется модель анизотропного континуума [22, 23].

Ограничимся линейным приближением по внешним возмущениям и представим функции распределения электронов и фононов в виде [11, 12]

$$f_{\mathbf{k}} = f_0(\varepsilon_k) + \delta f_{\mathbf{k}}, \quad N_{\mathbf{q}}^\lambda = N_{q\lambda}^0 + g^\lambda(\mathbf{q}), \quad (9)$$

где $f_0(\varepsilon_k)$ и $N_{q\lambda}^0$ — локально равновесные функции распределения для электронов и для фононов, а $\delta f_{\mathbf{k}}$ и $g^\lambda(\mathbf{q})$ — неравновесные добавки к ним. Линеаризуем интегралы столкновений (3) по этим добавкам:

$$\begin{aligned} I_{eph}(f_{\mathbf{k}}, N_{\mathbf{q}}^\lambda) &= I_{eph}(\delta f_{\mathbf{k}}, N_{q\lambda}^0) + \\ &+ I_{eph}(f_0(\varepsilon_k), g^\lambda(\mathbf{q})), \\ I_{phe}(f_{\mathbf{k}}, N_{\mathbf{q}}^\lambda) &= I_{phe}(\delta f_{\mathbf{k}}, N_{q\lambda}^0) + \\ &+ I_{phe}(f_0(\varepsilon_k), g^\lambda(\mathbf{q})). \end{aligned} \quad (10)$$

Интегралы столкновений $I_{ie}(\delta f_{\mathbf{k}})$, $I_{phe}(f_0, g^\lambda(\mathbf{q}))$, а также $I_{eph}(\delta f_{\mathbf{k}}, N_{q\lambda}^0)$ в приближении упругого рассеяния электронов на фононах представим через соответствующие скорости релаксации [5, 6]:

$$\begin{aligned} I_{ei}(\delta f_{\mathbf{k}}) &= -\nu_{ei}(k)\delta f_{\mathbf{k}}, \\ I_{phe}(f_0, g^\lambda(\mathbf{q})) &= -\nu_{phe}^\lambda(q)g^\lambda(\mathbf{q}), \\ I_{eph}(\delta f_{\mathbf{k}}, N_{q\lambda}^0) &\approx -\nu_{eph}(k)\delta f_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \quad (11)$$

Здесь $\nu_{ei}(k)$ — скорость релаксации электронов на примесях [11, 12], $\nu_{eph}(k)$ — скорость релаксации электрона с волновым вектором k на фононах при учете анизотропии спектра фононов, $\nu_{phe}^\lambda(k_F, q)$ — скорость релаксации фононов с волновым вектором q на вырожденных электронах при учете анизотропии спектра фононов:

$$\begin{aligned} \nu_{eph}(k) &= \frac{m}{8\pi^2\hbar^3(k)^3} \sum_{\pm} \int_0^{2k \pm q_0} (Z_q^\lambda)^5 dZ_q^\lambda \times \\ &\times \int_0^{2\pi} d\varphi_q |C_0^\lambda|^2 (qT\lambda)^5 N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1) \Phi_\lambda^\pm(\varepsilon_k, q), \end{aligned} \quad (12)$$

$$\Phi_\lambda^\pm(\varepsilon_k, q) = \pm \left[\frac{f(\varepsilon_{\mathbf{k}} \pm \hbar\omega_{\mathbf{q}}^\lambda) - f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{f_0(1 - f_0)} \right] \left[1 \mp \frac{q_0^\lambda(\theta, \varphi)}{q} \right],$$

$$q_0^\lambda(\theta, \varphi) = \frac{2m_F S^\lambda(\theta, \varphi)}{\hbar},$$

$$\begin{aligned} \nu_{eph0}^\lambda(k, q_T^\lambda) &= \frac{m(\varepsilon_k)(C_0^\lambda)^2}{2\pi\hbar^3 k^3} (q_T^\lambda)^5 N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1), \\ q_T^\lambda &= \frac{k_B T}{\hbar S^\lambda(\theta, \varphi)}, \quad Z_q^\lambda = \frac{q}{q_T^\lambda}, \end{aligned} \quad (12a)$$

$$\begin{aligned} \nu_{phe}^\lambda(q, \theta, \varphi) &\approx k_B T \frac{m_F^2}{\hbar^5} \frac{|C_0^\lambda|^2}{\pi} \times \\ &\times \ln \left\{ \frac{1 + \exp(x_{min} - \eta)}{1 + \exp(x_{min} - \eta + Z_q^\lambda)} \right\}, \\ x_{min}(\theta, \varphi) &= \frac{(\hbar q)^2}{4k_B T m_F} \left[1 - \frac{q_0^\lambda(\theta, \varphi)}{q} \right], \\ \eta &= \frac{\varepsilon_F}{k_B T}. \end{aligned} \quad (13)$$

Здесь $\nu_{eph0}^\lambda(k, q_T^\lambda)$ — скорость релаксации электрона с волновым вектором k на тепловом фононе с волновым вектором q_T^λ ; m_F и k_F — масса и волновой вектор электрона на уровне Ферми ($\varepsilon = \varepsilon_F$). При расчете интегралов столкновений $I_{eph}(f_0(\varepsilon_k), g^\lambda(\mathbf{q}))$ и $I_{phe}(f_0, g^\lambda(\mathbf{q}))$, описывающих передачу импульса от неравновесных фононов к равновесным электронам, учтем неупругость столкновений, не ограничиваясь линейным приближением по параметру неупругости. Подстановка выражений (7) и (9)–(11) в систему уравнений (6) для неравновесных функций распределения дает

$$\begin{aligned} \delta f_{\mathbf{k}} &= \delta f_{\mathbf{k}}^{(1)} + \delta f_{\mathbf{k}}^{(eph)}, \\ \delta f_{\mathbf{k}}^{(1)} &= e\tau_e(\varepsilon_k) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_k} \right) \times \\ &\times \left(\mathbf{v}_k \left(\mathbf{E} + \frac{k_B}{e} \left(\frac{\varepsilon_k - \zeta}{k_B T} \right) \nabla T \right) \right), \\ \delta f_{\mathbf{k}}^{(eph)} &= -\tau_e(\varepsilon_k) I_{eph}(f_0(\varepsilon_k), g^\lambda(\mathbf{q})), \\ \tau_e(\varepsilon_k) &= -[\nu_{ei}(k) + \nu_{eph}(k)]^{-1}, \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} g^\lambda(\mathbf{q}) &= -\frac{N_{q\lambda}^0(N_{q\lambda}^0 + 1)}{\nu_{ph}^\lambda(q)} \frac{\hbar\omega_q^\lambda}{k_B T^2} (\mathbf{V}_g^\lambda \nabla T) + \\ &+ \frac{\hbar\mathbf{q} \cdot \mathbf{u}^\lambda}{k_B T} N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1) \frac{\nu_{phN}^\lambda(q)}{\nu_{ph}^\lambda(q)}. \end{aligned} \quad (15)$$

Здесь $\tau(\varepsilon_k)$ — полное время релаксации электронов, $\nu_{ph}^\lambda(q) = \nu_{phR}^\lambda(q) + \nu_{phN}^\lambda(q)$ — полная скорость релаксации фононов с волновым вектором \mathbf{q} и поляризацией λ , а $\nu_{phe}^\lambda(q)$ — скорость релаксации импульса фононов на электронах [11, 12]. Неравновесную функцию электронов мы разбиваем на две части. Функция $\delta f_{\mathbf{k}}^{(1)}$ обусловлена непосредственным действием электрического поля и градиента температуры на систему электронов, она имеет известный вид [11–18]. Второй член $\delta f_{\mathbf{k}}^{(eph)}$ учитывает передачу импульса от неравновесных фононов к электронам и приводит к эффекту увлечения электронов [13, 14]:

$$\delta f_{\mathbf{k}}^{(eph)} = -\tau(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} |C_q^\lambda|^2 g^\lambda(\mathbf{q}) \times \\ \times \{ [f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_q^\lambda) - \\ - [f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}) - f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_q^\lambda) \}. \quad (16)$$

В отличие от ранее выполненных исследований, мы проанализируем влияние фокусировки фононов на электрон-фононное увлечение, а также роль квази-поперечных фононов в термоэдс увлечения.

В уравнении (15) учитывается особая роль нормальных процессов фонон-фононного рассеяния, в которых суммарный импульс сталкивающихся фононов сохраняется. N -процессы перераспределяют энергию и импульс между различными фононными модами и формируют неравновесную функцию распределения фононов, приводя ее к дрейфовому локально-равновесному распределению. Скорости дрейфа \mathbf{u}^λ находятся из уравнения баланса импульса фононов [17, 18, 24–26]:

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} \hbar \mathbf{q} \nu_{phN}^\lambda(q) \frac{N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1)}{k_B T \nu_{ph}^\lambda(q)} \times \\ \times \left[\frac{\hbar \omega_q^\lambda}{k_B T} (\mathbf{V}_g^\lambda k_B \nabla_r T) + \hbar (\mathbf{q} \cdot \mathbf{u}^\lambda) \nu_{phR}^\lambda(q) \right] = 0. \quad (17)$$

Согласно [25, 26] основными механизмами в N -процессах рассеяния являются механизм Ландау–Румера [33] для поперечных фононов и механизм Херринга для продольных [34]. В этих механизмах релаксации участвуют фононы различных поляризаций. В механизме Ландау–Румера [33] слияние поперечного фонона с продольным порождает продольный фонон, а в механизме Херринга [34] слияние продольного фонона с медленным поперечным фононом порождает быстрый фонон. В этом случае N -процессы стремятся установить одинаковую скорость дрейфа для всех фононов, и скорость дрейфа не зависит от поляризации [17, 18]. При учете фокусировки фононов неравновесную функцию распределения фононов можно представить в виде суммы диффузионного и дрейфового слагаемых [9]:

$$g_\lambda(\mathbf{q}) = G_0 \left\{ \left(\tilde{\mathbf{V}}_g^\lambda \nabla_r T \right) + (\mathbf{n} \nabla_r T) B(T) \right\} = \\ = g_\lambda^{dif}(\mathbf{q}) + g_\lambda^{dr}(\mathbf{q}), \\ \tilde{\mathbf{V}}_g^\lambda = \mathbf{V}_g^\lambda / S^\lambda(\theta, \varphi), \\ G_0 = -k_B \frac{S^\lambda(\theta, \varphi) N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1)}{k_B T \nu_{ph}^\lambda(q)} \frac{\hbar \omega_q^\lambda}{k_B T}, \\ \mathbf{u} = -k_B \nabla_r T (S^\lambda(\theta, \varphi))^2 \frac{B^\lambda(T, \theta, \varphi)}{k_B T \nu_{phN}^\lambda(q)}. \quad (18)$$

Коэффициент $B(T)$ имеет вид

$$B^\lambda(T, \theta, \varphi) = \frac{\nu_{phN}^\lambda(q)}{(S^\lambda(\theta, \varphi))^2} \frac{\sum_\lambda \Psi_N^\lambda}{\sum_\lambda \Psi_{NR}^\lambda}, \\ \Psi_N^\lambda = 3 \int_{-1}^1 \cos \theta d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\varphi (y)^4 \times \\ \times \int_0^1 \frac{V_{gz}^\lambda Z_q^\lambda x^3}{(\text{sh}(Z_q^\lambda/2))^2} \frac{\nu_{phN}^\lambda}{\nu_{ph}^\lambda} dx, \\ \Psi_{NR}^\lambda = \int_{-1}^1 d(\cos \theta) \int_0^{2\pi} d\varphi (y)^5 \times \\ \times \int_0^1 \frac{x^4}{(\text{sh}(Z_q^\lambda/2))^2} \frac{\nu_{phN}^\lambda \nu_{phR}^\lambda}{\nu_{ph}^\lambda} dx. \quad (19)$$

Здесь

$$x = \frac{q}{q_{max}(\theta, \varphi)}, \quad y(T, \theta, \varphi) = \frac{q_{max}(\theta, \varphi)}{q_T^\lambda}.$$

Следует отметить, что в изотропном случае направления групповой и фазовой скоростей фононов совпадают, поэтому диффузионное и дрейфовое слагаемые в функции $g^\lambda(\mathbf{q})$ могут быть объединены и можно ввести эффективную частоту релаксации фононов (см. [17, 18]).

4. ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ С ВЫРОЖДЕННОЙ СТАТИСТИКОЙ НОСИТЕЛЕЙ ТОКА

Рассмотрим теперь релаксацию электронной подсистемы. Резистивными процессами, обеспечивающими релаксацию импульса электронов, являются рассеяние электронов на примесях ν_{ei} , а механизмы электрон-фононной релаксации, характеризуемые частотами ν_{eph} и ν_{phe} , приводят к перераспределению импульса внутри электрон-фононной системы, причем электроны взаимодействуют только с длинноволновыми фононами. Перенормировку термоэдс за счет взаимного увлечения электронов и фононов мы здесь не рассматриваем. Следует отметить, что такие эффекты, как термоэдс и теплопроводность, находятся из условия равенства нулю полного тока через образец. В этом случае средняя скорость упорядоченного движения электронов в любом физически малом объеме образца равна

нулю. Поэтому передача импульса упорядоченного движения электронов в фононную подсистему мала, и влиянием неравновесности электронов на электроны через подсистему фононов можно пренебречь [17, 18]. С другой стороны, при наличии градиента температуры существует стационарный поток фононов от горячего конца образца к холодному, и передача импульса упорядоченного движения фононов электронам в значительной степени определяет величины термоэдс.

4.1. Диффузионная термоэдс в полупроводниках с вырожденной статистикой носителей тока. Произвольное вырождение

Вычислим ток проводимости \mathbf{j} , разбив его на две части, пропорциональные неравновесным добавкам к функции распределения электронов $\delta f_{\mathbf{k}}^{(1)}$ и $\delta f_{\mathbf{k}}^{(eph)}$:

$$\mathbf{j} = -\frac{2e}{V} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_k \left(\delta f_{\mathbf{k}}^{(1)} + \delta f_{\mathbf{k}}^{(eph)} \right) = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_{drag}. \quad (20)$$

Полагая, что электрическое поле и градиент температуры направлены вдоль оси x , запишем выражение для потоков через кинетические коэффициенты [11, 12]:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_1^x &= \frac{e^2}{3\pi^2} \int_0^\infty d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{k^3}{m(\varepsilon)} \tau(\varepsilon) \times \\ &\times \left(\mathbf{E} + \frac{k_B}{e} \left(\frac{\varepsilon - \varepsilon_F}{k_B T} \right) \nabla T \right) = \sigma_{xx} E_x - \beta_{xx} \nabla_x T, \\ \sigma_{xx} &= \frac{e^2}{3\pi^2} \int_0^\infty d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{k^3}{m(\varepsilon)} \tau(\varepsilon) = \\ &= \frac{e^2 (k_F)^3}{3\pi^2 m_F} \int_0^\infty dx \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) x^{3/2} \tau(x) = \frac{e^2 n_e \langle \tau \rangle}{m_F}, \\ x &= \left(\frac{k}{k_F} \right)^2, \\ \langle \tau(\varepsilon) \rangle &= \int_0^\infty dx \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) x^{3/2} \tau(x) \times \\ &\times \left(\int_0^\infty dx \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) x^{3/2} \right)^{-1} = \langle \tau \rangle_{3/2} / \langle 1 \rangle_{3/2}, \quad (21) \\ n_e &= n_{e0} \int_0^\infty x^{3/2} dx \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) = n_{e0} \langle 1 \rangle_{3/2}, \\ n_{e0} &= \frac{(k_F)^3}{3(\pi)^2}. \end{aligned}$$

Для термоэлектрического коэффициента найдем

$$\begin{aligned} \beta_{xx} &= -\frac{k_B}{e} \frac{e^2}{3\pi^2} \int_0^\infty d\varepsilon \left(-\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \times \\ &\times \frac{k^3 \tau(\varepsilon)}{m(\varepsilon)} \left(\frac{k_B}{e} \left(\frac{\varepsilon - \zeta}{k_B T} \right) \right) = \frac{k_B}{e} \left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F} \right) \times \\ &\times \sigma_{xx} \left(1 - \frac{\langle \tau(x) \rangle_{5/2}}{\langle \tau(x) \rangle_{3/2}} \right), \quad (22) \\ \langle \tau(x) \rangle_{5/2} &= \int_0^\infty dx \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) x^{5/2} \tau(x), \\ \langle \tau(x) \rangle_{3/2} &= \int_0^\infty dx \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) x^{3/2} \tau(x). \end{aligned}$$

В условиях сильного вырождения диффузионная термоэдс является величиной первого порядка малости по параметру вырождения $k_B T / \varepsilon_F \ll 1$:

$$\begin{aligned} \alpha_{dif} &= \frac{\beta_{xx}^{dif}}{\sigma_{xx}} = \frac{k_B}{e} \left(\frac{\pi^2 k_B T}{3} \right) \times \\ &\times \frac{d}{d\varepsilon} \left[\ln \left(\frac{k^3(\varepsilon) \tau(\varepsilon)}{m(\varepsilon)} \right) \right]_{\varepsilon=\varepsilon_F}. \quad (23) \end{aligned}$$

4.2. Влияние фокусировки фононов на термоэдс увлечения в полупроводниках с вырожденной статистикой носителей тока

Подставим (16) в (20) и получим исходное выражение для тока увлечения:

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_{drag} &= \frac{2e}{V} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_k \tau(\varepsilon_k) \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} |C_q^\lambda|^2 g_\lambda(\mathbf{q}) \times \\ &\times \{ [f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}) - f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_q^\lambda) - \\ &- [f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}) - f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}})] \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_q^\lambda) \}. \quad (24) \end{aligned}$$

В отличие от работ [10–17], релаксацию импульса фононов в неравновесной электрон-фононной системе мы учитываем, не ограничиваясь линейным приближением по параметру неупругости. Предполагая спектр электронов изотропным, вычислим угловые интегралы по волновым векторам электронов в формуле (24) и снимем δ -функции в законах сохранения энергии для процессов поглощения (+) и испускания (–) фононов в электрон-фононных столкновениях

$$\begin{aligned} J^\pm &= \int_{-1}^1 dx_k \int_0^{2\pi} d\varphi_k \nu_k^i \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}\pm\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} \mp \hbar\omega_q^\lambda) = \\ &= \mp n_i \frac{\pi}{\hbar k} \left[1 \mp \frac{q_0}{q} \right], \quad (25) \\ |q \mp q_0| &< 2k, \quad 0 \leq q \leq 2k \pm q_0. \end{aligned}$$

Подставив выражение (18) для неравновесной функции фононов в (24) и воспользовавшись интегралами (25), получим

$$\mathbf{j}_{drag}^i = \frac{em_F k_B T}{(2\pi\hbar)^4} \int_0^\infty dx \tau(x) \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) \times \\ \times \sum_{\lambda, \pm} \int_0^{2k_{\pm q_0}} q^2 dq \int d\Omega_q |C_q^\lambda|^2 \Phi_\lambda^\pm(\varepsilon, q) G_0(q) \times \\ \times \mathbf{n}_i \left\{ \left(\tilde{\mathbf{V}}_g^\lambda \nabla_r T \right) + \left(\mathbf{n} \nabla_r T \right) B^\lambda(T, \theta, \varphi) \right\}. \quad (26)$$

Здесь функция $\Phi_\lambda^\pm(\varepsilon, q)$ определена формулой (12). Нетрудно убедиться, что при усреднении по углам $d\Omega_q$ произведений компонент волновых векторов и групповых скоростей отличными от нуля останутся только диагональные элементы, а именно

$$\langle \mathbf{n}_i \cdot \tilde{\mathbf{V}}_{g(j)}^\lambda \rangle_{\Omega_q} = \delta_{ij} \cdot \langle \mathbf{n}_i \cdot \tilde{\mathbf{V}}_{g(i)}^\lambda \rangle_{\Omega_q}, \\ \langle \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{n}_j \rangle_{\Omega_q} = \delta_{ij} \cdot \langle \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{n}_i \rangle_{\Omega_q} = \frac{1}{3} \delta_{ij}. \quad (27)$$

Поэтому выражение для тока увлечения может быть представлено через термоэлектрический коэффициент β_{drag} :

$$\mathbf{j}_{drag} = -\beta_{drag} \nabla_r T. \quad (28)$$

В коэффициенте β_{drag} выделим скорость релаксации фермиевского электрона с импульсом k_F на тепловом фононе с импульсом $q_T^\lambda = k_B T / (\hbar S^\lambda)$ согласно выражению (12) для $\nu_{eph0}^\lambda(k_F, q_T^\lambda)$, тогда получим

$$\beta_{drag} = \frac{k_B}{2e} \sigma_{xx} \int_0^\infty dx \frac{\tau(x)}{\langle \tau \rangle_{3/2}} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) \times \\ \times \sum_{\lambda, \pm} \left(\frac{1}{4\pi} \right) \int d\Omega_q \times \\ \times \int_0^{Z_{2k_{\pm q_0}}^\lambda} (Z_q^\lambda)^4 dZ_q^\lambda \left(\frac{\nu_{eph0}^\lambda(k_F, q_T^\lambda)}{\nu_{ph}^\lambda(q)} \right) \left(\frac{T_\delta^\lambda}{2T} \right) \times \\ \times \Phi^\pm(\varepsilon, q) \left\{ 3\tilde{V}_{g3}^\lambda n_{q3} + B^\lambda(T, \theta, \varphi) \right\}, \\ \delta^\lambda(\theta, \varphi) = \frac{2m_F (S^\lambda(\theta, \varphi))^2}{k_B T} = \frac{T_\delta^\lambda(\theta, \varphi)}{T}, \quad (29)$$

где \tilde{V}_{g3}^λ и n_{q3} — проекции групповой скорости и единичного волнового вектора фонона на направление градиента температур.

Итак, мы получили термоэлектрический коэффициент в виде суммы вкладов от диффузионного и дрейфового движений фононов. Из условия равенства полного тока через образец $\mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_{drag} = 0$ найдем полную термоэдс $\alpha = \alpha_{dif} + \alpha_{drag}$ и термоэдс фононного увлечения:

$$\alpha_{drag} = \frac{k_B}{2e} \int_0^\infty dx \frac{\tau(x)}{\langle \tau \rangle_{3/2}} \left(-\frac{\partial f_0}{\partial x} \right) \times \\ \times \sum_{\lambda, \pm} \left(\frac{1}{4\pi} \right) \int d\Omega_q \times \\ \times \int_0^{Z_{2k_F \pm q_0}^\lambda} (Z_q^\lambda)^4 dZ_q^\lambda \left(\frac{\nu_{eph}^\lambda(k_F, q_T)}{\nu_{ph}^\lambda(q)} \right) \left(\frac{T_\delta^\lambda}{2T} \right) \times \\ \times \Phi^\pm(\varepsilon, q) \left\{ 3\tilde{V}_{g3}^\lambda n_{q3} + B^\lambda(T, \theta, \varphi) \right\}, \\ T_\delta^\lambda = \frac{2m_F}{k_B} (S^\lambda(\theta, \varphi))^2. \quad (30)$$

В предельном случае сильного вырождения ($\varepsilon_k = \varepsilon_F$) представим функцию $\Phi_\lambda^\pm(\varepsilon_k, q)$ в виде

$$\Phi_\lambda^\pm(\varepsilon_F, q) = 2 \operatorname{th}(Z_q^\lambda/2) (Z_q^\lambda \mp \delta) / Z_q^\lambda,$$

выделим в явном виде члены, соответствующие поглощению (+) и испусканию (−) фонона, и для термоэдс фононного увлечения получим

$$\alpha_{drag} = \frac{k_B}{e} \sum_{\lambda, \pm} \left(\frac{1}{4\pi} \right) \int d\Omega_q \times \\ \times \int_0^{Z_{2k_F + q_0}^\lambda} (Z_q^\lambda)^3 dZ_q^\lambda \left(\frac{\nu_{eph0}^\lambda(k_F, q_T^\lambda)}{\nu_{ph}^\lambda(q)} \right) \left(\frac{T_\delta^\lambda(\theta, \varphi)}{2T} \right) \times \\ \times \operatorname{th} \left(\frac{Z_q^\lambda}{2} \right) (Z_q^\lambda - \delta) \left\{ 3\tilde{V}_{g3}^\lambda n_{q3} + B^\lambda(T, \theta, \varphi) \right\} + \\ + \int_0^{Z_{2k_F - q_0}^\lambda} (Z_q^\lambda)^3 dZ_q^\lambda \left(\frac{\nu_{eph0}^\lambda(k_F, q_T^\lambda)}{\nu_{ph}^\lambda(q)} \right) \left(\frac{T_\delta^\lambda(\theta, \varphi)}{2T} \right) \times \\ \times \operatorname{th} \left(\frac{Z_q^\lambda}{2} \right) (Z_q^\lambda + \delta) \left\{ 3\tilde{V}_{g3}^\lambda n_{q3} + B^\lambda(T, \theta, \varphi) \right\}. \quad (31)$$

В работах [20, 21] исследования термоэдс и теплопроводности проводились на кристаллах HgSe:Fe с концентрацией примесей железа $N_{Fe} = 1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$,

концентрацией электронов $n_e = 4.6 \cdot 10^{18} \text{ см}^{-3}$, энергией Ферми 155 мэВ и эффективной массой на поверхности Ферми $m_F \approx 0.07m_0$ (m_0 — масса свободного электрона). Для этих значений величина q_0 мала по сравнению с фермиевским волновым импульсом $q_0/2k_F < 1 \cdot 10^{-2}$. Поэтому в верхнем пределе интегрирования $Z_{2k_F \pm q_0}^\lambda$ мы можем пренебречь добавкой $\pm q_0$, тогда для коэффициента α_{drag} получим

$$\alpha_{drag} = \frac{k_B}{e} \sum_{\lambda} \left(\frac{1}{4\pi} \right) \int d\Omega_q \times \int_0^{T_F^\lambda(\theta, \varphi)/T} (Z_q^\lambda)^4 \text{th} \left(\frac{Z_q^\lambda}{2} \right) dZ_q^\lambda \left(\frac{\nu_{eph}^\lambda(k_F, q_T^\lambda)}{\nu_{ph}^\lambda(q)} \right) \times \left(\frac{T_\delta^\lambda}{T} \right) \left\{ 3\tilde{V}_{g3}^\lambda n_{q3} + B^\lambda(T, \theta, \varphi) \right\}. \quad (32)$$

Здесь

$$T_F^\lambda(\theta, \varphi) = 2\hbar k_F S^\lambda(\theta, \varphi)/k_B.$$

Оценка параметров $T_F^\lambda(\theta, \varphi)$ и $T_\delta^\lambda(\theta, \varphi)$ для кристаллов HgSe:Fe в направлении [100] дает для продольных фононов $T_{F[100]}^L \approx 23 \text{ К}$ и $T_{\delta[100]}^L \approx 0.072 \text{ К}$, а для медленной поперечной моды $T_{F[100]}^{t2} \approx 13 \text{ К}$ и $T_{\delta[100]}^{t2} \approx 0.024 \text{ К}$. Если мы ограничимся первым порядком по неупругости электрон-фононного рассеяния, т. е. предположим, что $Z_q^\lambda \ll 1$, то получим

$$\alpha_{drag} = \frac{k_B}{e} \sum_{\lambda} \left(\frac{1}{4\pi} \right) \int d\Omega_q \times \int_0^{T_F^\lambda(\theta, \varphi)/T} (Z_q^\lambda)^5 dZ_q^\lambda \left(\frac{\nu_{eph}^\lambda(k_F, q_T^\lambda)}{\nu_{ph}^\lambda(q)} \right) \times \left(\frac{T_\delta^\lambda}{2T} \right) \left\{ 3\tilde{V}_{g3}^\lambda n_{q3} + B^\lambda(T, \theta, \varphi) \right\}. \quad (33)$$

Это приближение является корректным в области достаточно высоких температур, когда выполняется неравенство $T_F^\lambda(\theta, \varphi)/T \ll 1$. Однако нас больше интересует низкотемпературная область, когда параметр $T_F^\lambda(\theta, \varphi)/T$ больше единицы. В этом случае оно является явно недостаточным, поскольку $Z_q^\lambda \approx 1$ и фононы взаимодействуют со всеми электронами в пределах теплового размытия уровня Ферми. Более того, подынтегральные выражения в (31) и (32) как функции Z_q^λ имеют максимум при $Z_q^\lambda \approx 4$. Поэтому для расчета термоэдс увлечения следует пользоваться выражением (32).

Оценим зависимости термоэдс увлечения от температуры, эффективной массы и концентрации

электронов при достаточно низких температурах, когда доминирует граничное рассеяние фононов и для каждой из фононных мод выполняются неравенства $T \ll T_F^\lambda(\theta, \varphi)$. В этом случае, во-первых, можно пренебречь слагаемым, обусловленным дрейфовым движением фононов в выражении (32), во-вторых, верхний предел интегрирования по Z_q^λ устремим к бесконечности. Тогда для термоэдс получим

$$\alpha_{drag} = J_\alpha \frac{k_B}{e} \sum_{\lambda} \left(\frac{3}{4\pi} \right) \int d\Omega_q \left(\frac{T_\delta^\lambda}{T} \right) \times \frac{m_F(E_{0\lambda})^2 (q_T^\lambda)^5}{2\pi \hbar^2 S^\lambda(\theta, \varphi) \rho(k_F)^3} (\mathbf{e}_q^\lambda \cdot \mathbf{n})^2 \left(\frac{\tilde{V}_{g3}^\lambda n_{q3}}{\nu_{phB}^\lambda(q)} \right), \quad (34)$$

$$J_\alpha = \lim_{T \rightarrow 0} \int_0^{T_F^\lambda(\theta, \varphi)/T} (Z_q^\lambda)^4 \times \text{th} \left(\frac{Z_q^\lambda}{2} \right) N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1) dZ_q^\lambda \Rightarrow \Rightarrow \frac{1}{4} \int_0^\infty (Z_q^\lambda)^4 \text{th} \left(\frac{Z_q^\lambda}{2} \right) / \left(\text{sh} \left(\frac{Z_q^\lambda}{2} \right) \right)^2 dZ_q^\lambda = 24.1.$$

Если мы ограничимся первым порядком по неупругости и воспользуемся приближением $\text{th}(Z_q^\lambda/2) \approx Z_q^\lambda/2$, то получим $J_\alpha = 62.2$. Очевидно, что в низкотемпературной области при $T_F^\lambda(\theta, \varphi)/T \geq 1$ это приближение некорректно. Введем обозначения

$$q_{T[100]}^\lambda = \frac{k_B T}{\hbar S_{[100]}^\lambda}, \quad \tilde{S}^\lambda(\theta, \varphi) = \frac{S^\lambda(\theta, \varphi)}{S_{[100]}^\lambda},$$

тогда для термоэдс получим

$$\alpha_{drag} = J_\alpha \frac{k_B}{e} \sum_{\lambda} \left(\frac{(m_F)^2 E_{0\lambda}^2}{\rho n_e (\pi \hbar)^3} \left[\frac{k_B T}{\hbar S_{[100]}^\lambda} \right]^4 \right) \times \left(\frac{1}{4\pi} \right) \int d\Omega_q (\mathbf{e}_q^\lambda \cdot \mathbf{n})^2 \times \left(\frac{\tilde{V}_{g3}^\lambda n_{q3}}{\nu_{phB}^\lambda(q) (\tilde{S}^\lambda(\theta, \varphi))^4} \right). \quad (35)$$

В пределе кнудсеновского течения фононного газа, когда доминирует граничное рассеяние фононов, термоэдс увлечения будет иметь характерную зависимость:

$$\alpha_{drag} \lim_{T \rightarrow 0} \rightarrow \sim n_e^{-1} (m_F)^2 T^4. \quad (36)$$

Как следует из (36), зависимость от концентрации электронов убывающая, для зависимости от эффективной массы имеем известный результат [10–16]: чем легче электроны, тем меньше они увлекаются фононами. Зависимость термоэдс в режиме граничного рассеяния от температуры $\alpha_{drag} \approx \lim_{T \rightarrow 0} T^4$ должна наблюдаться в достаточно чистых полупроводниках, согласно нашим оценкам, для вклада продольных фононов при $T < 4$ К, а для вклада в термоэдс, обусловленного медленной поперечной модой, — при $T < 1$ К.

5. АНИЗОТРОПИЯ ТЕРМОЭДС УВЛЕЧЕНИЯ В РЕЖИМЕ ГРАНИЧНОГО РАССЕЯНИЯ

Влияние фокусировки фононов на анизотропию термоэдс определяется граничным рассеянием фононов. Для образцов с прямоугольным сечением $D \times W$ длиной L скорости релаксации фононов на границах определяются кусочно-гладкими функциями для различных интервалов углов, определяемых соотношениями между компонентами групповой скорости и геометрическими параметрами $k_0 = L/2D$ и $\mu = W/D$. При выполнении неравенств $\mu|V_{g1}^\lambda| > |V_{g2}^\lambda|$ и $|V_{g3}^\lambda/V_{g1}^\lambda| \geq k_0$ или $\mu|V_{g1}^\lambda| < |V_{g2}^\lambda|$ и $|V_{g3}^\lambda/V_{g2}^\lambda| \geq k_0/\mu$ скорости релаксации имеют вид [8]

$$\nu_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}(x, \theta, \varphi) = \frac{|V_{g3}^\lambda|}{k_0 D} \times \left\{ 1 - \frac{k_0}{2} \frac{|V_{g2}^\lambda| + \mu|V_{g1}^\lambda|}{\mu|V_{g3}^\lambda|} + \frac{(k_0)^2}{3} \frac{|V_{g1}^\lambda||V_{g2}^\lambda|}{\mu(V_{g3}^\lambda)^2} \right\}^{-1} \quad (37)$$

При выполнении противоположных неравенств они имеют вид

$$\nu_{B[I]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi) = \nu_{B[\infty[I]}^{\lambda\{J\}}(\theta, \varphi) = \begin{cases} \frac{6\mu}{D} \frac{(V_{g1}^\lambda)^2}{3\mu|V_{g1}^\lambda| - |V_{g2}^\lambda|}, & |V_{g2}| < \mu|V_{g1}|, \\ \frac{|V_{g3}^\lambda|}{|V_{g1}^\lambda|} < k_0, \\ \frac{6}{\mu D} \frac{(V_{g2}^\lambda)^2}{3|V_{g2}^\lambda| - \mu|V_{g1}^\lambda|}, & |V_{g2}| > \mu|V_{g1}|, \\ \frac{|V_{g3}^\lambda|}{|V_{g2}^\lambda|} < \frac{k_0}{\mu}. \end{cases} \quad (38)$$

Для того чтобы перейти к образцам с квадратным сечением, достаточно в формулах (37) и (38) положить $\mu = 1$. Зависимости термоэдс от направления

градиента температуры $[I(\psi)]$ и ориентации боковых граней образца относительно осей кристалла $\{J\}$ определяются величинами компонент групповой скорости фононов. Они входят непосредственно в термоэдс и в скорости релаксации $\nu_{B[I(\psi)]}^{\lambda\{J\}}$.

Проанализируем угловые зависимости термоэдс увлечения в режиме граничного рассеяния для кристаллов HgSe:Fe при вращении градиента температуры в плоскостях $\{100\}$ и $\{110\}$. Для этого определим систему координат с осью «3» вдоль направления теплового потока. В образцах с квадратным сечением оси «1» и «2» взаимно ортогональны и направлены перпендикулярно оси образца и его боковым граням. При этом ось «1» является осью вращения. Тогда компоненты групповой скорости фононов для рассматриваемых случаев могут быть представлены в следующем виде [31]:

$$\begin{aligned} (1) \quad & V_{g3}^\lambda = -V_{gy}^\lambda \sin \psi + V_{gz}^\lambda \cos \psi, \\ & V_{g2}^\lambda = V_{gy}^\lambda \cos \psi + V_{gz}^\lambda \sin \psi, \quad V_{g1}^\lambda = V_{gx}^\lambda, \\ (2) \quad & V_{g3}^\lambda = (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \sin \psi / \sqrt{2} + V_{gz}^\lambda \cos \psi, \\ & V_{g2}^\lambda = (-V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) \cos \psi / \sqrt{2} - V_{gz}^\lambda \sin \psi, \\ & V_{g1}^\lambda = (V_{gx}^\lambda + V_{gy}^\lambda) / \sqrt{2}. \end{aligned} \quad (39)$$

Ориентационные параметры $[I(\psi)]$ и $\{J\}$ для произвольного направления теплового потока относительно осей кристалла могут быть определены через компоненты групповой скорости, параллельные и перпендикулярные теплового потоку. Зависимость направления теплового потока от угла ψ определяется компонентой групповой скорости V_{g3}^λ . Проекция групповой скорости V_{g1}^λ не зависит от угла ψ , поскольку является осью вращения (см. формулы (39)). Итак, формулы (34) и (37)–(39) позволяют анализировать особенности термоэдс увлечения в режиме кнудсеновского течения фононного газа.

Анализ температурных зависимостей термоэдс при учете граничного и рэлеевского механизмов рассеяния в кристаллах HgSe:Fe с концентрацией примесей железа $N_{Fe} = 1 \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ показал, что для пренебрежения рассеянием фононов на примесях необходимо ограничиться температурами ниже 0.4 К. Поэтому мы зафиксируем температуру 0.4 К и рассчитаем вклады в нее от различных ветвей фононного спектра, предполагая, что константы деформационного потенциала для всех мод одинаковы. Оценки, приведенные в таблице, и непосредственный расчет показали, что вклад быстрой поперечной моды в термоэдс увлечения мал из-за малости продольной компоненты этой моды, и им можно пренебречь. Вклад продольных фононов в термо-

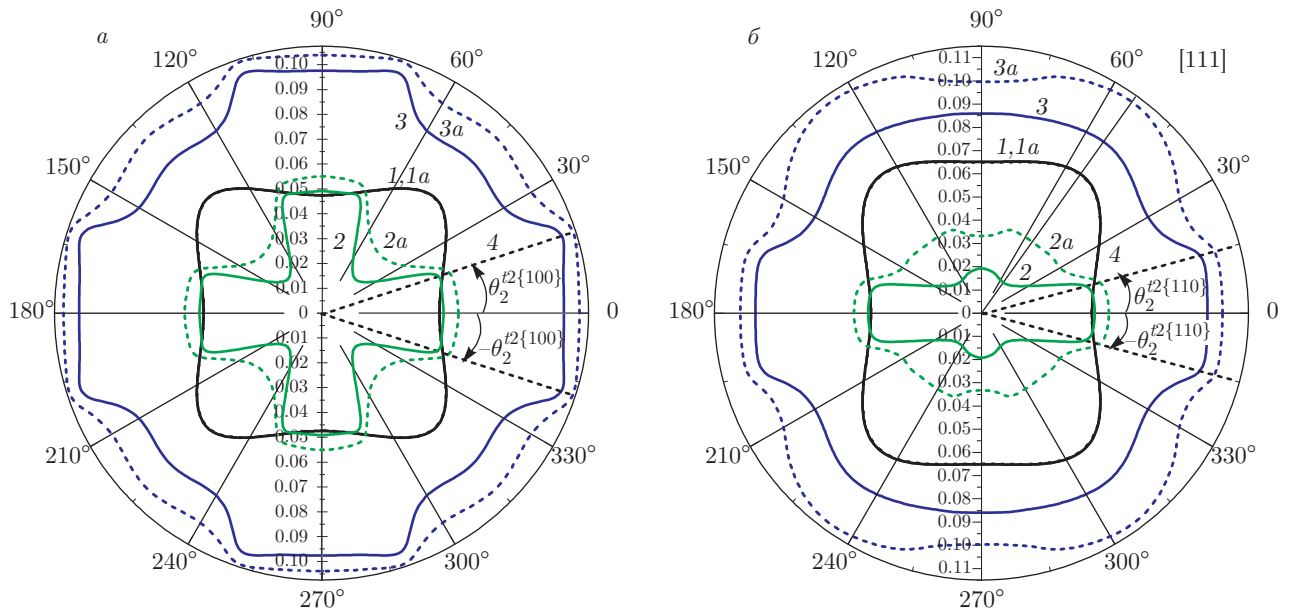


Рис. 4. Угловые зависимости термоэдса α_{drag} (мВ/К) (кривые 3 и 3a), вкладов продольных α_{drag}^L (кривые 1 и 1a) и квазипоперечных фононов α_{drag}^{t2} (кривые 2 и 2a) для образцов длиной $L = 2.9$ см с квадратным сечением $D = 0.1$ см, рассчитанные в режиме кнудсеновского течения фононного газа, согласно формулам (35) (сплошные линии) и (40) (штриховые линии) для случаев, когда тепловой поток вращается в плоскости {100} (a) и {110} (б). Прямые линии 4 указывают направления точек нулевой кривизны (см. рис. 2б)

эдса увлечения, как и их длина свободного пробега, имеют максимум в направлении фокусировки, т.е. в направлении [111], а минимум — в направлении дефокусировки [001] (см. рис. 4). Отношения вкладов продольных фононов в термоэдс в симметричных направлениях равно $\alpha_{drag}^{L[111]} : \alpha_{drag}^{L[110]} : \alpha_{drag}^{L[100]} = 1.54 : 1.37 : 1$, т.е. анизотропия превышает 50%. Максимум термоэдса увлечения, обусловленный медленной поперечной модой, достигается в направлениях ее фокусировки, т.е. в направлении [001]. В этом направлении его значение совпадает по величине с вкладом продольных фононов, и он в три раза больше минимального значения, которое достигается в направлении [111] (см. рис. 4). Отношение вкладов моды t_2 в термоэдс в симметричных направлениях равно $\alpha_{drag}^{t2[100]} : \alpha_{drag}^{t2[110]} : \alpha_{drag}^{t2[111]} = 3.01 : 1.19 : 1$.

Следует отметить две особенности в термоэдсе увлечения, связанные с фокусировкой медленной поперечной моды. Во-первых, как видно из сравнения угловых зависимостей термоэдса $\alpha_{drag}^{t2[110]}$ и длин свободного пробега $\Lambda^{t2\{110\}}$, для медленной поперечной моды в диагональной плоскости направления максимумов обеих величин совпадают. Однако минимум $\alpha_{drag}^{t2[110]}$ реализуется для направления [111], а в направлении [110] имеет место локальный максимум, тогда как для длин пробега $\Lambda^{\{110\}t_2}$ ситу-

ация обратная — значение $\Lambda_{[111]}^{\{110\}t_2}$ на 5–10% превышает величину $\Lambda_{[110]}^{\{110\}t_2}$. Как показал проведенный анализ, это расхождение связано с резкой зависимостью вектора поляризации медленной поперечной моды, входящего в термоэдс через множитель $\langle (\mathbf{e}^{t_2} \cdot \mathbf{n})^2 \rangle$ (см. для более детального анализа векторов поляризации работу [19]). Для того чтобы убедиться в этом, мы провели дополнительный расчет термоэдса, предварительно усреднив скалярное произведение $\langle (\mathbf{e}^{t_2} \cdot \mathbf{n})^2 \rangle$ по всем углам в соответствии с выражением (35):

$$\alpha_{drag}^{t_2}(\psi) = J_\alpha \frac{k_B}{e} \langle (\mathbf{e}^{t_2} \cdot \mathbf{n})^2 \rangle \times \left(\frac{(m_F)^2 E_{0\lambda}^2 (q_T^{[100]})^4}{\rho n_F (\pi \hbar)^3} \right) \left(\frac{1}{4\pi} \right) \times \int d\Omega_q \left(\frac{\tilde{V}_{g3}^\lambda n_{g3}}{\nu_B^\lambda(q) (\tilde{S}^\lambda(\theta, \varphi))^4} \right). \quad (40)$$

Расчет в приближении (40) воспроизведен на рис. 4 штриховыми линиями. Как видно, результаты расчетов заметно различаются, причем при использовании приближения (40) в направлениях [110] действительно имеет место минимум термоэдса. Наибольшее

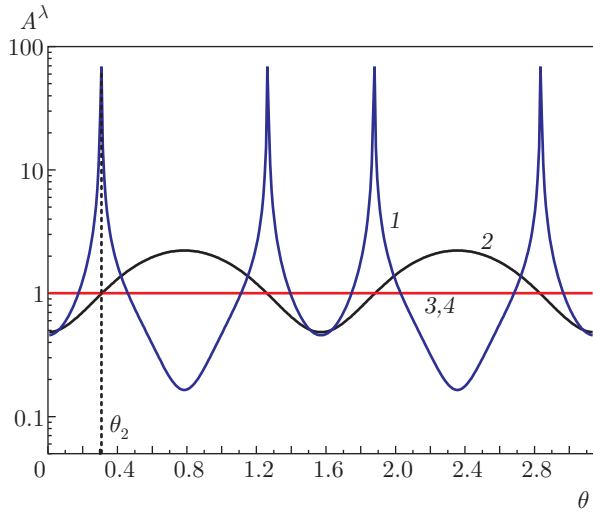


Рис. 5. Угловые зависимости коэффициента усиления A^λ в кристалле HgSe:Fe для волновых векторов в плоскости грани куба. Кривая 1 — для медленной поперечной моды, кривая 2 — для продольных фононов. Прямые 3 и 4 — для быстрой поперечной моды и модели изотропной среды

различие результатов имеет место для теплового потока в диагональной плоскости: значения термоэдс в направлениях [110] и [111] при использовании приближения (40) оказались на 16% и 23% больше, чем при точном учете векторов поляризации медленной моды. Второй особенностью вклада в термоэдс $\alpha_{drag}^{t2}(\psi)$ является ее характерная угловая зависимость в плоскости {100} в виде «тевтонского креста», причем угловые параметры сектора определяются направлениями волновых векторов, соответствующих точкам нулевой кривизны на поверхности медленности (см. рис. 1б и 4а): $\theta_2^{t2\{100\}} = \pm 0.31 + n\pi/2$, 0.31 рад = 21.2° (n — целое число). Внутри каждого из секторов $-0.31 + n\pi/2 < \theta_2^{t2\{100\}} < 0.31 + n\pi/2$ величина $\alpha_{drag}^{t2\{100\}}(\psi)$ не зависит от угла ψ (ее значения для направлений [001] и углов $\theta_2^{t2\{100\}} = \pm 0.31 + n\pi/2$ совпадают), тогда как вне этого угла она резко убывает, уменьшаясь в 2.6 раза для направлений дефокусировки [011]. Такое резкое уменьшение вклада в термоэдс от медленной квазипоперечной моды при переходе от направлений [001] к направлениям [011] связано с влиянием фокусировки фононов на кнудсеновское течение фононного газа в кристаллах HgSe:Fe.

Для количественной характеристики плотности потока энергии фононов в заданном направлении волнового вектора \mathbf{q} относительно изотропной среды ранее был введен «коэффициент усиления» A^λ [1, 3], который равен отношению потока тепла ко-

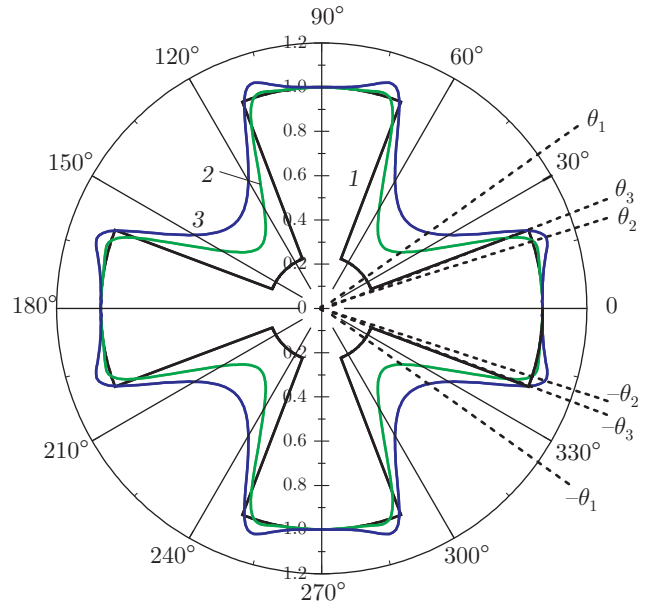


Рис. 6. Угловые зависимости плотности состояний $N^{\{100\}t2}(\theta)/N_{[100]}^{\{100\}t2}$ для волновых векторов в плоскости {100} (кривая 1), вклада в термоэдс $\alpha_{drag}^{t2}(\psi)/\alpha_{drag}^{t2[100]}$ (кривая 2) и длин пробега $\Lambda^{\{100\}T2}(\psi)/\Lambda_{[100]}^{\{100\}T2}$ (кривая 3), рассчитанные для кристаллов HgSe:Fe ($L = 2.9$ см, $D = 0.1$ см) в режиме кнудсеновского течения фононного газа для случаев, когда тепловой поток вращается в плоскости {100} (см. рис. 5а кривая 2). Все величины нормированы на значения для направлений [001]. Прямые линии указывают направления, соответствующие углам θ_1 , θ_2 и θ_3 (см. таблицу)

лебательной моды λ для выбранного направления в исследуемом кристалле к соответствующему потоку тепла в изотропной среде. Мы провели расчет коэффициента усиления в кристаллах HgSe:Fe для волновых векторов в плоскости {100}. Как видно на рис. 5, в точках нулевой кривизны коэффициент A^λ обращается в бесконечность, как и для ряда других кристаллов [1–3], причем при $\theta > \theta_2$ он резко уменьшается с увеличением θ и в направлении дефокусировки становится гораздо меньше единицы. Можно было бы связать резкое уменьшение вклада $\alpha_{drag}^{t2}(\psi)$ с поведением коэффициента A^λ при $\theta > \theta_2$, однако его поведение при $\theta < \theta_2$ качественно отличается от зависимости $\alpha_{drag}^{t2}(\psi)$ при $\psi < \theta_2$ (см. рис. 4 и 5а).

По нашему мнению, представления, развитые нами при анализе фокусировки фононов в кристаллах HgSe:Fe, позволяют дать более простую и наглядную интерпретацию угловых зависимостей термоэдс, чем использование коэффициента усиления (см. рис. 4, 5 и 6). Определение углов θ_1 , θ_2 и θ_3 , характеризующих различие распространения квазипопе-

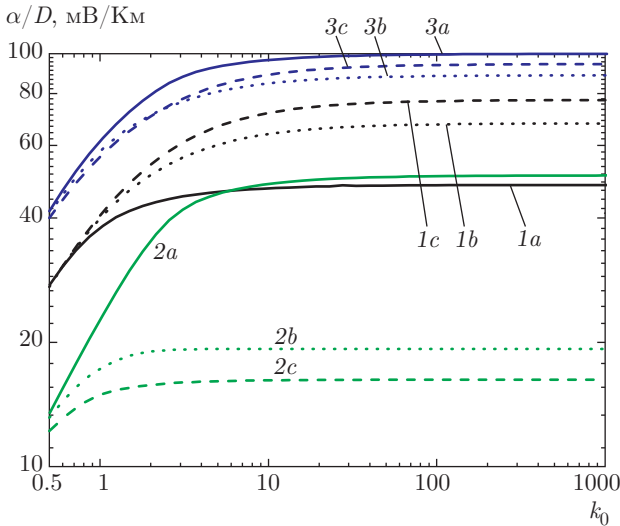


Рис. 7. Зависимости приведенной термоэдс $\tilde{\alpha}_{drag} = \alpha_{drag}/D$ (кривые 3a, 3b, 3c), а также вкладов $\tilde{\alpha}_{drag}^L/D$ (кривые 1a, 1b, 1c) и $\tilde{\alpha}_{drag}^{t2}/D$ (кривые 2a, 2b, 2c), обусловленных продольными и квазиперечными фононами, от параметра k_0 для симметричных направлений: сплошные линии (1a, 2a, 3a) — для направлений [001], штриховые линии (1b, 2b, 3b) — для направлений [111], пунктирные линии (1c, 2c, 3c) — для направлений [011]

речной моды t_2 в кристаллах и изотропных средах, позволило сделать оценки средних значений плотностей состояний в кристаллах HgSe:Fe для областей фокусировки и дефокусировки фононов с волновыми векторами в плоскости грани куба (см. рис. 2 и 6 (кривая 1)). Как видно на рис. 6, для медленной квазиперечной моды угловые зависимости термоэдс увлечения качественно согласуются поведением плотности фоновых состояний. Следует отметить, что угловые зависимости длин свободного пробега фононов для моды t_2 также коррелируют с поведением термоэдс увлечения и плотности состояний (см. рис. 6). Все величины достигают максимальных значений в областях фокусировки фононов, а минимальных значений — в областях дефокусировки (см. рис. 6). Таким образом, отмеченные выше особенности термоэдс увлечения, плотности фоновых состояний и длин свободного пробега фононов в режиме кнудсенского течения фононного газа обусловлены влиянием анизотропии упругой энергии на пространство и граничное рассеяние фононов.

Хотя анизотропия вкладов в термоэдс увлечения от продольных и квазиперечной моды велика, максимум вклада моды t_2 достигается в направлениях [001], соответствующих минимуму вклада продольных фононов (см. рис. 4). Поскольку величины

этих вкладов близки, угловые зависимости полной термоэдс α_{drag} принимают более сложный вид: при этом ее максимальные и минимальные значения отклоняются от симметричных направлений. Первые достигаются в направлениях $\theta_{max}^{t2\{100\}} = \theta_2^{t2\{100\}} = \pm 0.31 + n\pi/2$, вторые — при $\theta_{min}^{t2\{100\}} = \pm 0.58 + n\pi/2$, а результирующая анизотропия уменьшается до 20%. Отношение значений термоэдс в симметричных направлениях дает значительно меньшую анизотропию $\alpha_{drag}^{[100]} : \alpha_{drag}^{[111]} : \alpha_{drag}^{[110]} = 1.13 : 1.05 : 1$.

Выражения (35) и (37)–(39) позволяют проанализировать зависимости термоэдс увлечения, а также вкладов продольных и квазиперечных фононов от геометрических параметров. Из формул (37), (38) для скорости релаксации фононов на границах следует, что приведенная термоэдс $\tilde{\alpha}_{drag} = \alpha_{drag}/D$ и вклады $\tilde{\alpha}_{drag}^L$ и $\tilde{\alpha}_{drag}^{t2}$ для образцов с квадратным сечением зависят только от одного геометрического параметра $k_0 = L/2D$. Как видно на рис. 7, область интенсивного роста $\tilde{\alpha}_{drag}(k_0)$ и вкладов $\tilde{\alpha}_{drag}^L(k_0)$ и $\tilde{\alpha}_{drag}^{t2}(k_0)$ ограничена значениями $k_0 < 5$, а при значениях $k_0 > 100$ эти зависимости выходят на насыщение. Следует отметить интересную особенность: для направлений [001] при $k_0 < 1$ вклад квазиперечной моды в направлении фокусировки $\tilde{\alpha}_{drag}^{t2[001]}$ оказывается почти в четыре раза меньше значений $\tilde{\alpha}_{drag}^{L[001]}$ в направлении дефокусировки продольных фононов. Однако с увеличением длины образца (параметра k_0) при $k_0 \approx 5$ ($L = 10D$) вклады обеих мод сравниваются, а при дальнейшем увеличении длины образца ($L > 10D$) вклад квазиперечной моды t_2 в направлении [001] становится доминирующим. Для продольных фононов при всех длинах образцов максимальные значения термоэдс реализуются для направления градиента температуры [111], а минимальные — для направления [001]. Для медленной квазиперечной моды максимум термоэдс при всех длинах образцов достигается для направления [001], а минимум — для направления градиента температуры [111]. Полная термоэдс $\tilde{\alpha}_{drag}(k_0)$ имеет максимальные значения во всем интервале параметров k_0 для направления [001].

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследовано влияние анизотропии упругой энергии на электрон-фононное увлечение и термоэлектрические эффекты в бесщелевых полупроводниках с вырожденной статистикой носителей тока. Проанализировано влияние фокусировки фононов на зависимости термоэлектродвижущей силы в моно-

кристаллах HgSe:Fe с квадратным сечением от геометрических параметров и направлений теплового потока относительно осей кристалла. Основные результаты, полученные в работе, можно сформулировать следующим образом.

1. Изучена роль квазипродольных и квазипоперечных фононов в термоэдс увлечения для кристаллов HgSe:Fe. Показано, что вклад быстрой поперечной моды в термоэдс увлечения мал из-за малости продольной компоненты этой моды. Однако вклад медленной квазипоперечной моды в направлении фокусировки [001] может превышать вклад квазипродольных фононов и должен учитываться при анализе термоэдс в монокристаллах HgSe:Fe.

2. Особенности угловых зависимостей вклада медленной квазипоперечной моды в термоэдс увлечения во многом определяются влиянием анизотропии упругой энергии на кнудсеновское течение фоновых газа в кристаллах HgSe:Fe. Для теплового потока в плоскости грани куба они качественно согласуются с поведением плотности фоновых состояний и длин свободного пробега фононов. Все величины достигают максимальных значений в областях фокусировки фононов, а минимальных значений — в областях дефокусировки. Анизотропия термоэдс увлечения для моды t_2 в два раза больше, чем для продольных фононов. Отношение вкладов моды t_2 для симметричных направлений равно $\alpha_{drag}^{t_2[100]} : \alpha_{drag}^{t_2[110]} : \alpha_{drag}^{t_2[111]} = 3.01 : 1.19 : 1$.

3. Вклад продольных фононов в термоэдс увлечения, как и их длина свободного пробега, имеют максимумы в направлении фокусировки [111], а минимумы — в направлении дефокусировки [001]. Отношения вкладов $\alpha_{drag}^{L[I]}$ для симметричных направлений равно $\alpha_{drag}^{L[111]} : \alpha_{drag}^{L[110]} : \alpha_{drag}^{L[100]} = 1.54 : 1.37 : 1$. В направлении [111] доминирует вклад продольных фононов в термоэдс. Он превышает вклад медленной квазипоперечной моды в 4.6 раза, тогда как в направлении [001] их вклады сравниваются.

4. Максимум термоэдс увлечения для моды t_2 совпадает с минимумом вклада продольных фононов, поэтому угловые зависимости полной термоэдс принимают более сложный вид: максимальные и минимальные значения отклоняются от симметричных направлений, а результирующая анизотропия существенно уменьшается.

5. Анализ влияния фокусировки фононов на зависимости термоэдс в образцах HgSe:Fe с квадратным сечением от геометрических параметров показал, что область интенсивного роста термоэдс и вкладов в нее от L - и t_2 -фононов с увеличением

длины образца ограничена значениями $L < 10D$. При значениях $L > 100D$ их зависимости выходят на насыщение.

Работа выполнена при финансовой поддержке РАН в рамках темы «Спин» и программы ОФН РАН (грант № 12-Т-2-1018), гранта № 14.Z50.31.0025 согласно постановлению Правительства РФ № 220, а также гранта ведущей научной школы (НШ-7539.2016.2).

ЛИТЕРАТУРА

1. B. Taylor, H. J. Maris, and C. Elbaum, *Phys. Rev. Lett.* **23**, 416 (1969).
2. H. J. Maris, *J. Acoust. Soc. Amer.* **50**, 812 (1971).
3. J. P. Wolfe, *Imaging Phonons Acoustic Wave Propagation in Solids*, Cambridge University Press, New York (1998).
4. A. K. McCurdy, H. J. Maris, and C. Erlbaum, *Phys. Rev. B* **2**, 4077 (1970).
5. И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев, С. М. Бахарев, А. В. Инюшкин, *ФТТ* **55**, 24 (2013).
6. I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev, S. M. Bakharev, and A. V. Inyushkin, *Physica B* **416**, 81 (2013).
7. H. B. G. Casimir, *Physica (Amsterdam)* **5**, 595 (1938).
8. I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev, S. M. Bakharev, and A. V. Inyushkin, *Phys. Stat. Sol. (b)* **251**, 991 (2014).
9. Дж. Займан, *Электроны и фононы*, Изд-во иностр. лит., Москва (1962).
10. И. М. Цидильковский, *Термомагнитные явления в полупроводниках*, Наука, Москва (1960).
11. А. И. Ансельм, *Введение в теорию полупроводников*, Наука, Москва (1978).
12. В. М. Аскеров, *Электронные явления переноса в полупроводниках*, Наука, Москва (1985).
13. Л. Э. Гуревич, *ЖЭТФ* **16**, 196 (1946); **16**, 416 (1946).
14. С. Херринг, *Phys. Rev.* **96**, 1163 (1954).
15. Л. Э. Гуревич, И. Я. Коренблит, *ФТТ* **6**, 856 (1964).
16. И. Г. Ланг, С. Т. Павлов, *ЖЭТФ* **63**, 1495 (1972).

17. И. Г. Кулеев, ФТТ **42**, 649 (2000); И. Г. Кулеев, ФТТ **44**, 215 (2002).
18. И. Г. Кулеев и др., ЖЭТФ **123**, 1227 (2003).
19. И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, ФТТ **49**, 422 (2007).
20. B. Tieke, R. Fletcher, J. C. Maan, W. Dobrowolski, A. Mucielski, and A. Wittlin, Phys. Rev. B **54**, 10565 (1996).
21. K. Ikeda, R. Fletcher, J. C. Maan, and J. Kossut, Phys. Rev. B **65**, 035201 (2001).
22. Ф. И. Федоров, *Теория упругих волн в кристаллах*, Наука, Москва (1965).
23. B. Truel, C. Elbaum, and B. B. Chick, *Ultrasonic Methods in Solid State Physics*, Academic Press, New York and London (1969).
24. J. Callaway, Phys. Rev. **113**, 1046 (1959).
25. J. A. Krumhansl, Proc. Phys. Soc. **85**, 921 (1965).
26. Р. Берман, *Теплопроводность твердых тел*, Мир, Москва (1979).
27. В. Л. Гуревич, *Кинетика фононных систем*, Наука, Москва (1980).
28. И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, С. М. Бахарев, ЖЭТФ **145**, 292 (2014).
29. A. Lenoczky, D. A. Nelson, and C. W. Whitsett, Phys. Rev. **188**, 1069 (1969).
30. C. W. Whitsett, D. A. Nelson, J. G. Broerman, and E. C. Paxhia, Phys. Rev. B **7**, 4625 (1973).
31. И. И. Кулеев, И. Г. Кулеев, С. М. Бахарев, ЖЭТФ **146**, 525 (2014).
32. I. I. Kuleyev, I. G. Kuleyev, and S. M. Bakharev, Phys. Stat. Sol. B **252**, 323 (2015).
33. L. Landau and J. Rumer, Sov. Phys. **11**, 18 (1937).
34. C. Herring, Phys. Rev. **95**, 954 (1954).