



Горський П.В

## ВПЛИВ ЗАРЯДОВОГО ВПОРЯДКУВАННЯ НА ТЕРМОЕРС ШАРУВАТИХ КРИСТАЛІВ У КВАНТУЮЧОМУ МАГНІТНОМУ ПОЛІ

Горський П.В

(Інститут термоелектрики, вул. Науки, 1,  
Чернівці, 58029, Україна)

- 
- У статті розглянуто вплив міжшарового зарядового впорядкування на термоЕРС шаруватих кристалів у квантуючому магнітному полі за гелієвих температур для випадку, коли градієнт температури та квантуюче магнітне поле паралельні одне до одного і перпендикулярні до шарів. Розрахунки виконано на основі кінетичного рівняння Больцмана в наближенні сталого часу релаксації. Показано, що у квазікласичній області магнітних полів зарядове впорядкування призводить до багатократної інверсії знака, появи нових частот осциляцій термоЕРС та зростання їх амплітуди при вибраних параметрах задачі в 5.9–13.5 рази в порівнянні з невпорядкованим станом, що зумовлено зміною топології поверхні Фермі (ПФ) кристала за фазового переходу, пов'язаному із зарядовим впорядкуванням, із замкненої чи перехідної у відкриту. У сильних магнітних полях зарядове впорядкування призводить до багатократного перемикання полярності термоЕРС зі зміною магнітного поля. За вибраних параметрів задачі максимум величини термоЕРС зростає в 7.6–18.4 рази порівнянно з невпорядкованим станом. Однак в ультраквантовій границі величина термоЕРС різко знижується за законом  $\alpha \propto T^{-1}B^{-2}$ , що обумовлено стискуванням ПФ кристала внаслідок конденсації носіїв заряду на дні єдиної заповненої підзони Ландау з номером  $n = 0$ .

### Вступ

Сьогодні ведеться як радикальне удосконалення традиційних, так і інтенсивний пошук нових термоелектричних матеріалів. Такому традиційному термоелектричному матеріалу, як  $Bi_2Te_3$  та іншим матеріалам на його основі, а також різним аспектам використання їх у термоелектричних генераторах, охолоджувачах та вимірювальних приладах присвячено ґрунтовні монографії [1, 2]. Окрім цих матеріалів об'єктами досліджень є метали, сплави, напівпровідники [3, 4], фулерени [5], композити [6], у тому числі біоморфні [7], та ін. Перспективним термоелектричним матеріалом є графен [8]. Саме своєрідний фототермоелектричний ефект у ньому, котрий раніше вважався суто фотовольтаїчним, робить можливим розглядати графен як матеріал для сонячних елементів з високим коефіцієнтом корисної дії.

Широко розробляється теорія термоелектричних властивостей матеріалів, у тому числі наносистем [9, 10]. Наприклад, одну з перших праць, присвячену в тому числі теорії поперечних термоелектричних коефіцієнтів металів у квантуючому магнітному полі, було опубліковано А.М. Косевичем та В.В. Андрєєвим [11].

Велике число досліджуваних матеріалів, наприклад, напівпровідникові системи класу  $A^{III}B^{VI}C^{VII}$ , інтеркальовані сполуки графіту, синтетичні метали на основі органічних сполук, графен та ін. за своєю кристалічною структурою належать до шаруватих. У той же час у переважній більшості теоретичних робіт, присвячених поведінці таких шаруватих систем у квантуючих магнітних полях, вивчаються в основному поперечні гальваноманітні ефекти. Теплопровідність графену за наявності магнітного поля, в тому числі в квантуючому

магнітному полі, його провідність за сталого та змінного струмах, квантовий ефект Хола в ньому розглядались у працях [12,13]. При цьому його поверхня Фермі вважалася відкритою, тобто такою, котра займає всю одновимірну зону Брилюена і з періодичним продовженням виявляється зв'язною, тобто являє собою суцільний гофрований циліндр. В основному ці праці присвячені дослідженню поведінки носіїв заряду в площині шарів. Тому для опису зонної структури графену ефективною виявилась концепція «безмасового нейтрино» з лінійною залежністю енергії від квазіімпульсу в площині шарів. У цьому випадку рівні енергії в квантуючому магнітному полі визначались методом ефективного гамільтоніану.

У багатьох випадках у шаруватих кристалах спостерігається міжшарове зарядове впорядкування. До таких кристалів належать фулерити [14], діхалькогеніди перехідних металів [15], синтетичні метали на основі органічних сполук тощо. В той же час термоелектричні властивості таких матеріалів, у тому числі в зарядово-впорядкованому стані, поки що детально не вивчались. У зв'язку з цим метою пропонованої роботи – теоретичне дослідження впливу зарядового впорядкування на термоЕРС шаруватих кристалів у квантуючому магнітному полі за низьких температур для випадку, коли градієнт температури і квантуюче магнітне поле паралельні одне одному і перпендикулярні до площини шарів.

### Визначення залежностей хімічного потенціалу електронного газу і параметру зарядового впорядкування від магнітного поля

Для розрахунку залежності термоЕРС від квантуючого магнітного поля необхідно знати польові залежності хімічного потенціалу електронного газу і параметру впорядкування від квантуючого магнітного поля. Зазначимо, що в цій статті ми розглядаємо міжшарове зарядове впорядкування як чергування шарів з різною електронною густиною. Тому поверхнева густина електронів на  $i$ -му шарі визначається формулою

$$n_i = n_0 a \left[ 1 + (-1)^i \delta \right]. \quad (1)$$

У цій формулі  $n_0$  – середня об'ємна концентрація носіїв струму,  $a$  – віддаль між трансляційно еквівалентними шарами,  $\delta$  – параметр порядку, який описує нерівномірність розподілу електронів по шарах, причому  $\delta = 0$  відповідає відсутності впорядкування, а  $\delta = 1$  – повному впорядкуванню.

Енергетичний спектр носіїв заряду в квантуючому магнітному полі, перпендикулярному до шарів, визначається так [16]:

$$\varepsilon(n, x) = \mu^* B (2n + 1) \pm \sqrt{W_0^2 \delta^2 + \Delta^2 \cos^2 x}. \quad (2)$$

У цій формулі  $n$  – номер рівня Ландау,  $\mu^* = \mu_B m_0 / m^*$ ,  $\mu_B$  – магнетон Бора,  $m^*$  – ефективна маса електрона в площині шарів,  $B$  – індукція магнітного поля,  $\Delta$  – початкова напівширина міні-зони, яка описує рух носіїв заряду перпендикулярно до шарів,  $W_0$  – ефективне притягання між електронами, що призводить до зарядового впорядкування і зумовлене конкуренцією електрон-фононної взаємодії і кулонівського відштовхування,  $x = ak_z$ ,  $k_z$  – складова квазіімпульсу в напрямку, перпендикулярному до шарів.

З урахуванням енергетичного спектру (2) хімічний потенціал системи носіїв заряду  $\zeta$  і параметр впорядкування  $\delta$  за низьких температур визначаються з такої системи рівнянь [16]:

$$\frac{1}{2\pi\zeta_0} \left[ \int_{\zeta+R \geq 0} (\zeta+R) dx + \int_{\zeta-R \geq 0} (\zeta-R) dx \right] + \frac{kT}{\zeta_0} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l}{\text{sh}(\pi^2 l k T / \mu^* B)} \times$$

$$\times \left[ \int_{\zeta+R \geq 0} \sin\left(\pi l \frac{\zeta+R}{\mu^* B}\right) dx + \int_{\zeta-R \geq 0} \sin\left(\pi l \frac{\zeta-R}{\mu^* B}\right) dx \right] = 1, \quad (3)$$

$$\frac{\delta W_0}{2\pi\zeta_0} \left[ \int_{\zeta+R \geq 0} (\zeta+R) R^{-1} dx - \int_{\zeta-R \geq 0} (\zeta-R) R^{-1} dx \right] + \frac{\delta k T W_0}{\zeta_0} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l}{\text{sh}(\pi^2 l k T / \mu^* B)} \times$$

$$\times \left[ \int_{\zeta+R \geq 0} R^{-1} \sin\left(\pi l \frac{\zeta+R}{\mu^* B}\right) dx - \int_{\zeta-R \geq 0} R^{-1} \sin\left(\pi l \frac{\zeta-R}{\mu^* B}\right) dx \right] = \delta. \quad (4)$$

У цих рівняннях  $R = \sqrt{W_0 \delta^2 + \Delta^2 \cos^2 x}$ ,  $\zeta_0 = n_0 a h^2 / 4\pi m^*$  – енергія Фермі ідеального двовимірного Фермі-газу за абсолютного нуля температури.

З рівняння (4) випливає, що завжди є тривіальний розв'язок  $\delta \equiv 0$ , який відповідає відсутності впорядкування. Однак за  $W_0 / \zeta_0 > 1$  є також нетривіальний розв'язок  $\delta > 0$ , котрий відповідає впорядкованому стану. Умова  $W_0 / \zeta_0 > 1$  означає, що для наявності впорядкованого стану електрон-фононна взаємодія має не просто переважати кулонівську, але ця перевага повинна бути більшою за максимальну кінетичну енергію носіїв заряду в площині шарів за заданою їх концентрацією. Причина цього полягає у збільшенні кінетичної енергії електронів у площині шарів з переходом у впорядкований стан.

Результати розв'язання системи рівнянь (3) і (4) зображено на рис. 1 і 2.

З рисунка 1 видно, що зарядове впорядкування знижує хімічний потенціал системи носіїв заряду і, отже, є енергетично вигідним. Зауважимо, що хімічний потенціал відраховується від середини псевдо-щілини між міні-зонами у впорядкованому стані, чому відповідає середина вихідної міні-зони у невпорядкованому стані.

Перехід у зарядово-впорядкований стан є фазовим переходом другого роду і у випадку, коли поверхня Фермі (ПФ) кристалу в невпорядкованому стані є замкненою або перехідною, тобто коли при  $B = 0$  виконується умова  $-1 < \zeta / \Delta \leq 1$ , виявляє себе як топологічний перехід від замкненої поверхні до відкритої. Топологічний перехід – це перехід, за якого ПФ змінює зв'язність, перетворюючись із замкненої на відкриту або навпаки. Нагадаємо, що відкрита поверхня – це така поверхня, що займає всю одновимірну (по  $k_z$ ) зону Брілюена (ОЗБ), виявляючись зв'язною за періодичного продовження. Замкнена поверхня – це така поверхня, що займає лише частину ОЗБ і з періодичним продовженням виявляється складеною з окремих частин. З рисунка також видно, що спочатку хімічний потенціал в усіх випадках є осцилюючою функцією магнітного поля. В той же час після останнього осциляційного максимуму у впорядкованому стані хімічний потенціал змінюється майже стрибком. Щоправда, цей стрибок дещо «розмазується» через фактор Дінгла, зумовленого розсіюванням носіїв струму на домішках та дефектах кристалічної ґратки [17], але ми будемо вважати цей фактор близьким до одиниці. Це можна робити, якщо відношення  $l/a \gg 1$ , де  $l$  – довжина вільного пробігу з розсіюванням носіїв заряду на іонізованих домішках. Згаданий стрибок свідчить про обернений топологічний перехід від відкритої ПФ до замкненої. Слід, однак, зазначити, що в строгому розумінні слова ПФ кристала за  $B \neq 0$  не визначена, тому про неї говорять умовно, уявляючи її як сукупність порожнистих коаксіальних циліндрів, так званих магнітних трубок або «трубок Ландау», вісі котрих паралельні до напрямку магнітного поля. В цьому випадку ПФ вважається

відкритою, якщо знайдеться бодай одна магнітна трубка, довжина якої дорівнює довжині ОЗБ і замкненою в протилежному випадку. Після останнього осциляційного мінімуму в усіх випадках залежність хімічного потенціалу від магнітного поля стає практично лінійною. Ця залежність зумовлена тим, що за сильних магнітних полів хімічний потенціал залежить від магнітного поля так [16]:

$$\zeta = \mu^* B - \sqrt{W_0^2 \delta^2 + \Delta^2 \cos^2 \frac{\pi \zeta_0}{4 \mu^* B}}. \quad (5)$$

При виведенні формули (5) враховано, що ПФ в ультраквантовій границі, тобто в умовах конденсації носіїв заряду на дні єдиної найнижчої підзони Ландау, складається з трьох частин. Одна з них являє собою суцільну магнітну трубку з площиною симетрії  $k_z = 0$ , яка звужується в обидва боки від цієї площини. Дві інші частини є половинами цієї трубки і, починаючи від площин  $k_z = \pm \pi/a$ , поступово звужуються всередину ОЗБ. Таким чином, ми справді маємо справу з оберненим переходом від відкритої ПФ до замкненої в сильному магнітному полі. Як впливає з формули (5), на лінійній ділянці польової залежності хімічного потенціалу частини ПФ, що відповідає єдиній заповненій підзоні Ландау з номером  $n = 0$ , поступово стискаються в напрямку магнітного поля і цей стиск обов'язково повинен враховуватись у процесі розрахунку термоЕРС.

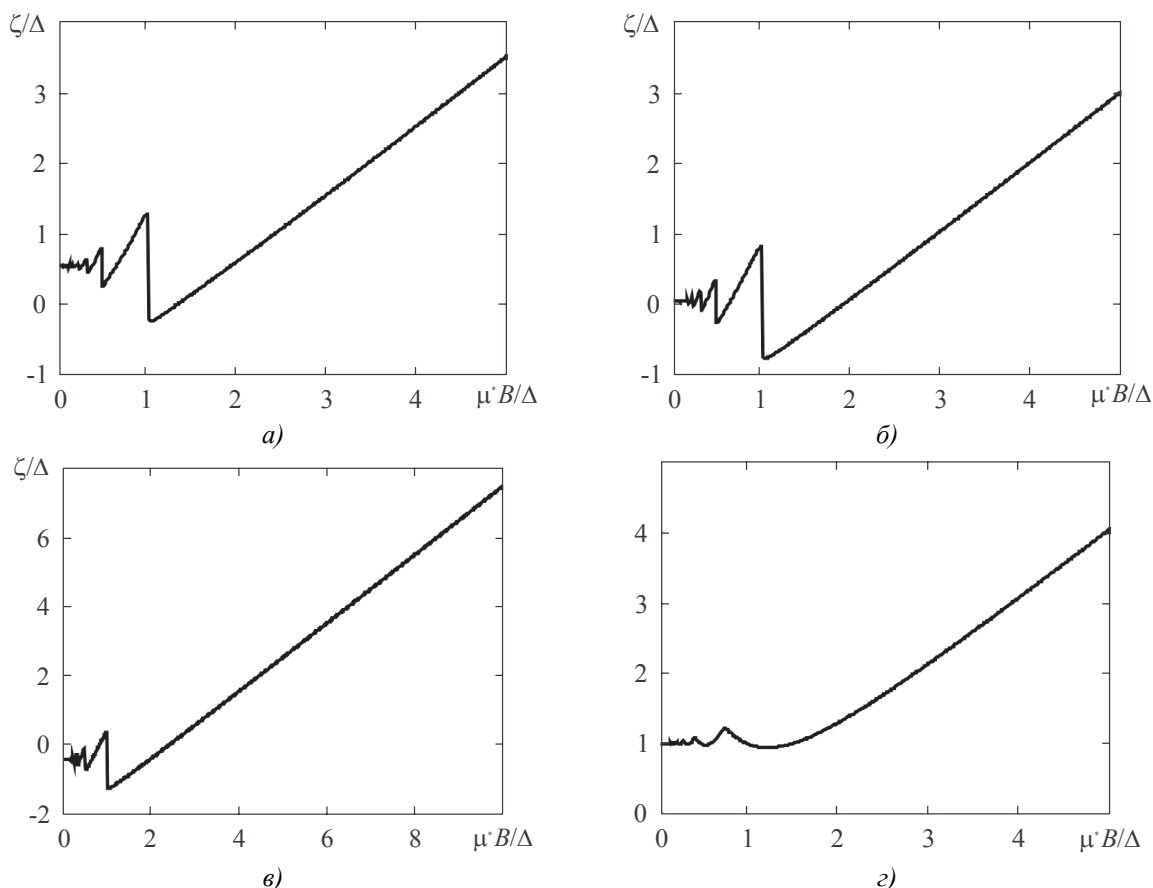


Рис. 1. Польова залежність хімічного потенціалу газу носіїв заряду за  $\zeta_0/\Delta = 1$ ,  $kT/\Delta = 0.03$  та:  $W_0/\zeta_0 = 1.5$  (а), 2 (б), 2.5 (в) та  $\delta \equiv 0$  (г).

З рисунка 2 видно, що параметр порядку також є осцилюючою функцією магнітного поля і його величина в цілому є тим більшою, чим більша величина ефективного притягання  $W_0$ . В точці топологічного переходу параметр порядку має локальний осциляційний максимум. Після

точки топологічного переходу зарядове впорядкування руйнується, хоча й дуже повільно. Це руйнування можна пояснити тим, що кінетична енергія носіїв заряду в площині шарів за наявності рівнів Ландау більша, ніж за відсутності цих рівнів. Останнє, якщо виходити з термодинамічних міркувань, повинно протидіяти зарядовому впорядкуванню. Але навіть за  $B=0$  зарядове впорядкування не є повним, тобто  $\delta < 1$ . Це має місце тому, що за  $\Delta \neq 0$  міжшаровий рух носіїв заряду намагається згладити нерівномірність їх розподілу по шарах.

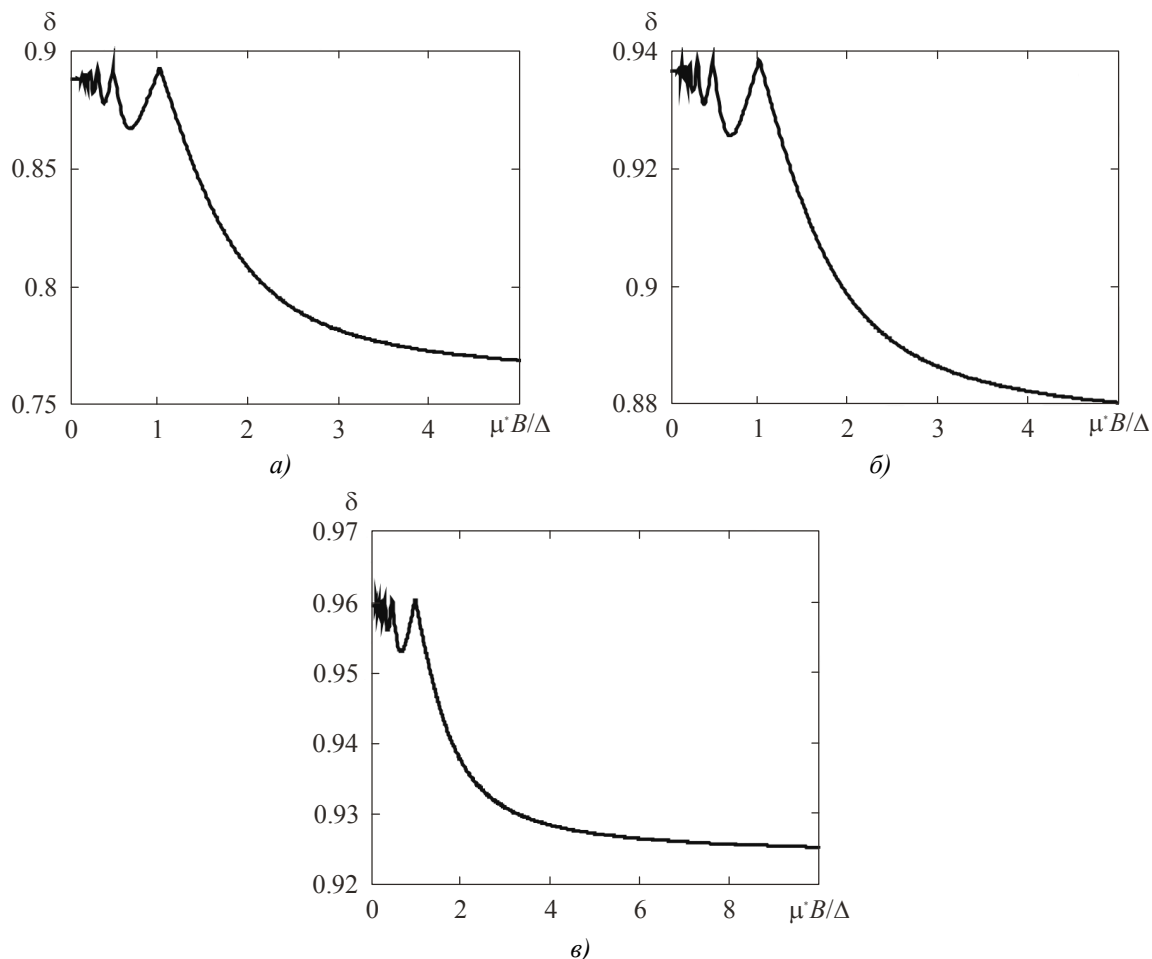


Рис. 2. Польова залежність параметра впорядкування за  $\zeta_0/\Delta = 1$ ,  $kT/\Delta = 0.03$  та:  $W_0/\zeta_0 = 1.5$  (а), 2 (б), 2.5 (в).

### Розрахунок польової залежності термоЕРС і обговорення результатів

У розрахунку термоЕРС будемо виходити з кінетичного рівняння Больцмана. Його застосування веде до такої загальної формули для поздовжньої компоненти термоЕРС:

$$\alpha_{zz} \equiv \alpha = \frac{\sum_{\beta} \tau_{\beta} v_{z\beta}^2 \frac{\partial f^0(\epsilon_{\beta})}{\partial T}}{e \sum_{\beta} \tau_{\beta} v_{z\beta}^2 \frac{\partial f^0(\epsilon_{\beta})}{\partial \zeta}} \quad (6)$$

У цій формулі  $e$  – модуль заряду електрона,  $\beta \equiv (n, x)$ ,  $\tau_{\beta}$  – час релаксації,  $v_{z\beta}$  – поздовжня швидкість носіїв заряду,  $f^0(\epsilon_{\beta})$  – функція розподілу Фермі-Дірака. Підсумовування за номерами рівнів Ландау в цій формулі можна виконати до кінця в тому випадку, коли час релаксації

залежить лише від  $x$ . Слід зауважити, що більш точні результати в цій ситуації дає застосування формалізму Кубо [18], але в разі виконання умови  $\omega_c \tau \gg 1$  підхід, який ґрунтується на формалізмі Кубо, еквівалентний підходові, який ґрунтується на рівнянні Больцмана. Така еквівалентність зумовлена тим, що за  $\omega_c \tau \gg 1$  уширення рівнів Ландау можна прямо пов'язати з часом релаксації, а обумовленим розсіюванням зсувом енергетичних рівнів знехтувати. Окрім того, ми будемо вважати, що  $l/a \gg 1$  і  $h/\tau\Delta \gg 1$ , що відповідає чистому і досконалому шаруватому кристалу.

Для простоти ми будемо вважати час релаксації сталим. Враховуючи, що за низьких (гелієвих) температур домінуючим механізмом розсіювання носіїв заряду є розсіювання на потенціалі хаотично розташованих заряджених домішок, таке наближення є коректним для відкритої ПФ, хоча і дещо грубим для замкненої ПФ.

Обчислення термоЕРС за формулою (6) з урахуванням закону дисперсії (2) дає такий вираз для неї:

$$\alpha = \frac{\pi\alpha_0 A}{B + C}. \quad (7)$$

У цій формулі  $\alpha_0 = k/e$ , а безрозмірні коефіцієнти  $A$ ,  $B$ ,  $C$  визначаються так:

$$A = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l f_l^{th} \int_{-(\gamma-b)}^{\sqrt{w^2\delta^2+1}} |y^{-1}| \sqrt{(1+w^2\delta^2-y^2)(y^2-w^2\delta^2)} \sin[\pi l b^{-1}(\gamma-y)] dy, \quad (8)$$

$$B = 0.5 \int_{-(\gamma-b)}^{\sqrt{w^2\delta^2+1}} |y^{-1}| \sqrt{(1+w^2\delta^2-y^2)(y^2-w^2\delta^2)} dy, \quad (9)$$

$$C = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l f_l^{\sigma} \int_{-(\gamma-b)}^{\sqrt{w^2\delta^2+1}} |y^{-1}| \sqrt{(1+w^2\delta^2-y^2)(y^2-w^2\delta^2)} \cos[\pi l b^{-1}(\gamma-y)] dy. \quad (10)$$

У цих формулах  $\gamma = \zeta/\Delta$ ,  $b = \mu^* B/\Delta$ ,  $w = W_0/\Delta$ . Окрім того,

$$f_l^{th} = \left[ \text{sh}\left(\frac{\pi^2 l k T}{\mu^* B}\right) \right]^{-1} \left[ 1 - \left(\frac{\pi^2 l k T}{\mu^* B}\right) \text{cth}\left(\frac{\pi^2 l k T}{\mu^* B}\right) \right], \quad (11)$$

$$f_l^{\sigma} = \frac{\pi^2 l k T / \mu^* B}{\text{sh}\left(\frac{\pi^2 l k T}{\mu^* B}\right)}. \quad (12)$$

Якщо  $\gamma - b \geq -w\delta$ , то нижня границя інтегрування у формулах (8)–(10) повинна бути замінена на  $w\delta$ . Зауважимо також, що причиною віднімання  $b$  від  $\gamma$  є фізичні обставини, зазначені у розділі 2.

Результати розрахунку термоЕРС у слабких квантуючих магнітних полях наведено на рис. 3.

Перш за все з рисунка 3 видно, що у впорядкованому стані осциляції термоелектричного коефіцієнта є біперіодичними, в той час як у невпорядкованому стані вони є моноперіодичними. Причина цієї відмінності полягає в тому, що у невпорядкованому стані ПФ зарядово-впорядкованого шаруватого кристалу в межах ОЗБ має п'ять екстримальних перерізів площинами, перпендикулярними до напрямку магнітного поля: три однакових максимальних площинами  $k_z = 0$  та  $k_z = \pm\pi/a$  і два мінімальних площинами  $k_z = \pm\pi/2a$ . Частоти, що відповідають цим перерізам, відповідно дорівнюють

$$F_l = \frac{\pi l (\zeta + \sqrt{W_0^2 \delta^2 + \Delta^2})}{\mu^*}, \quad (13)$$

$$F'_l = \frac{\pi l (\zeta + W_0 \delta)}{\mu^*}. \quad (14)$$

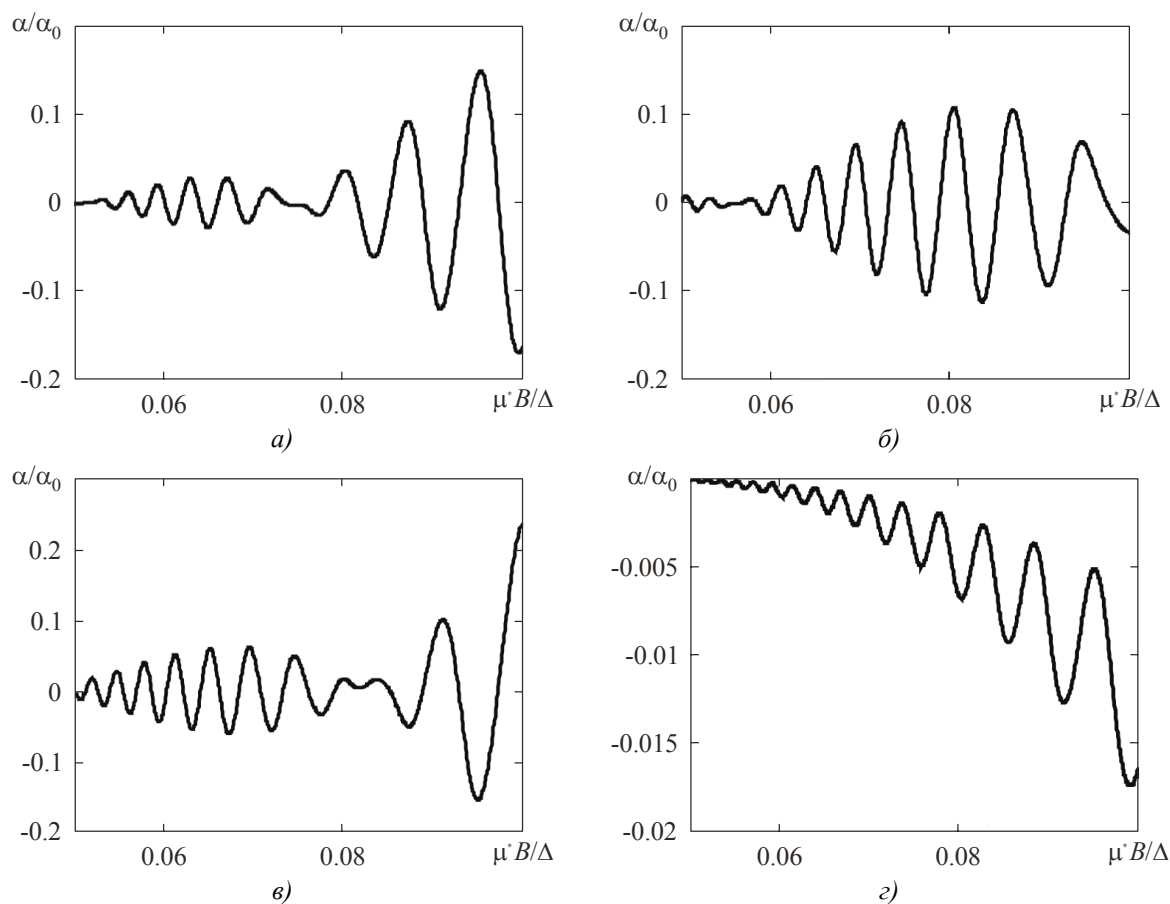


Рис. 3. Польова залежність термоЕРС в інтервалі магнітних полів  $0.04 \leq \mu^* B/\Delta \leq 0.1$  за  $\zeta_0/\Delta = 1$ ,  $kT/\Delta = 0.03$  та  $W_0/\zeta_0 = 1.5$  (а), 2 (б), 2.5 (в) у невпорядкованому стані (з).

У зарядово-впорядкованому шаруватому кристалі ці частоти близькі між собою, тому «несучі» високі частоти визначаються за формулою

$$F_{lc} = \frac{\pi l (\zeta + W_0 \delta)}{\mu^*}, \quad (15)$$

а низькі частоти биття за формулою

$$F_{lb} = \frac{\pi l \Delta^*}{\mu^*}, \quad (16)$$

де  $\Delta^* = 0.5 \left( \sqrt{W_0^2 \delta^2 + \Delta^2} - W_0 \delta \right)$ . За  $\Delta = 0.01$  еВ та  $m^* = 0.01 m_0$  та інших параметрах, зазначених на рис. 3, основні високі «несучі» частоти на рис. 3 а, б, в відповідно дорівнюють 10.168, 10.154 та 10.547 Тл. Низькі частоти биття відповідно дорівнюють 0.905, 0.678 та 0.542 Тл. У невпорядкованому стані за вибраних параметрів задачі ПФ має лише один екстремальний, а саме максимальний переріз площиною  $k_z = 0$ , тому основна висока частота дорівнює 10.837 Тл і

модульована лише гладкою компонентою, яка не може бути врахована в рамках традиційних підходів, для яких у квазікласичному наближенні конкретна форма ПФ і її протяжність вздовж напрямку магнітного поля неістотні.

З рисунка 3 також видно, що зарядове впорядкування веде до зростання термоЕРС. Максимальні значення величини термоелектричного коефіцієнта на рис. 3 *а, б, в* дорівнюють 12.9, 8.63 та 19.8 мкВ/К відповідно. В той же час у невпорядкованому стані (рис. 3 *г*) максимальна величина термоЕРС не перевищує 1.47 мкВ/К. Таким чином, у квазікласичному інтервалі магнітних полів за вибраних параметрів задачі перехід у зарядово-впорядкований стан підвищує термоЕРС у 5.9 – 13.5 рази. Окрім того, у зарядово-впорядкованому стані у квазікласичному інтервалі магнітних полів наявне перемикання полярності термоЕРС, тоді як у невпорядкованому стані осциляції відбуваються без перемикання полярності і термоЕРС залишається чисто від'ємною, тобто «електронною». В рамках прийнятої моделі часу релаксації це перемикання можна пояснити лише переходом від замкненої ПФ до відкритої за зарядового впорядкування.

Результати розрахунку термоЕРС в широкому інтервалі магнітних полів наведено на рис. 4.

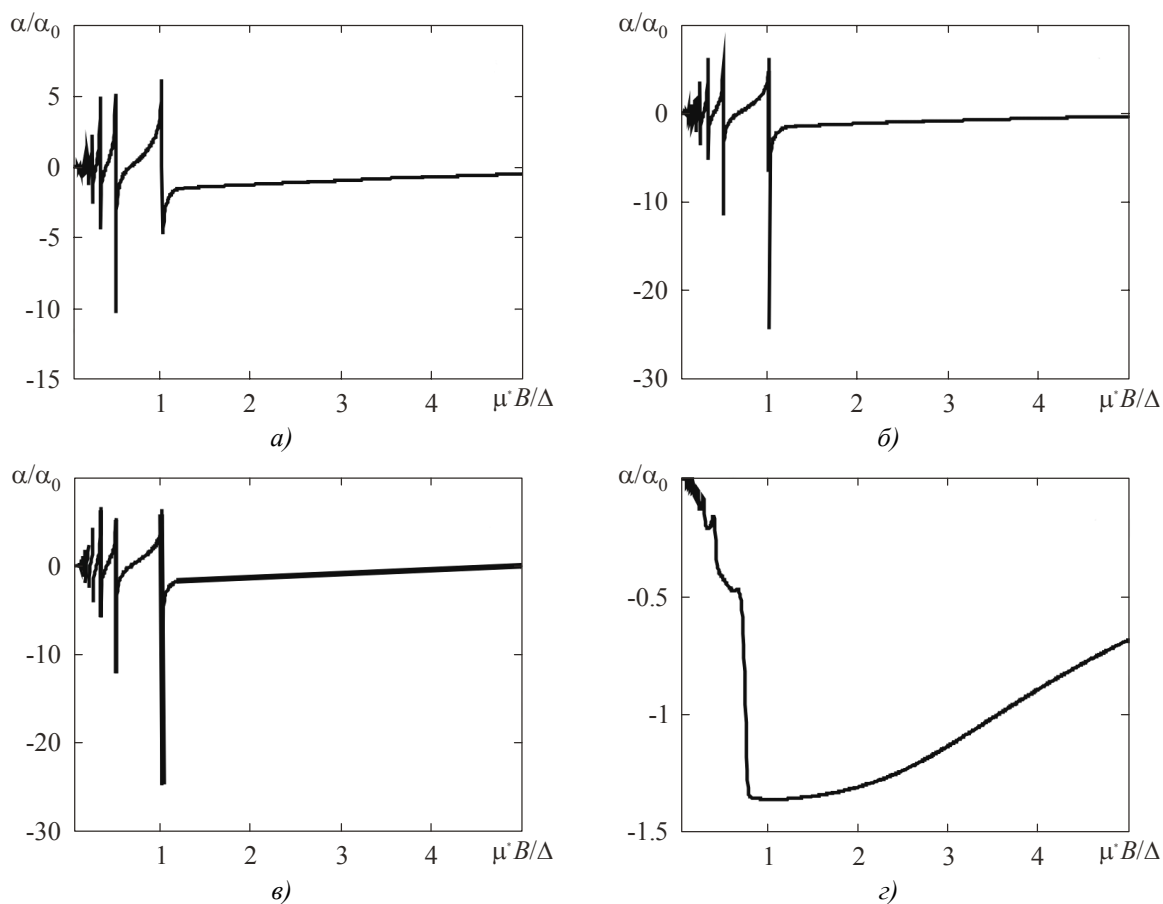


Рис. 4. Польова залежність термоЕРС в інтервалі магнітних полів  $0.04 \leq \mu^* B/\Delta \leq 5$  за  $\zeta_0/\Delta = 1$ ,  $kT/\Delta = 0.03$  та  $W_0/\zeta_0 = 1.5$  (*а*), 2 (*б*), 2.5 (*в*), у невпорядкованому стані (*з*).

З рисунка 4 видно, що в упорядкованому стані плавні осциляції термоЕРС поступово змінюються послідовними перемиканнями полярності (рис. 4 *а, б, в*). Ці перемикання синхронізовані зі змінами хімічного потенціалу до області конденсації носіїв заряду на дні підзони Ландау з номером  $n = 0$ . При цьому кожне різке перемикання з додатної полярності на від'ємну відповідає різкому стрибку хімічного потенціалу, а більш плавна зміна з від'ємної



полярності на додатну – ділянці плавної зміни хімічного потенціалу. В точці топологічного переходу відбувається останнє перемикавання полярності і термоЕРС досягає максимуму своєї величини. Максимуми величини термоЕРС на рис. 4 а, б, в дорівнюють відповідно 890 мкВ/К, 2093 мкВ/К та 2147 мкВ/К. В той же час у неупорядкованому стані (рис. 4 г) термоЕРС майже всюди залишається від'ємною і в точці останнього осциляційного максимуму хімічного потенціалу досягає максимуму величини, який дорівнює 117 мкВ/К, тобто у 7.6–18.4 раза меншого, ніж у зарядово-впорядкованому стані. Існування максимуму величини термоЕРС у квантуючому магнітному полі можна пояснити такими фізичними міркуваннями. З одного боку зрозуміло, що при низьких температурах в слабкому магнітному полі термоЕРС повинна прямувати до нуля у відповідності з загальними термодинамічними співвідношеннями. З іншого боку, вона повинна прямувати до нуля і в ультраквантовій границі внаслідок стискання ПФ. Але тотожно дорівнювати нулеві вона не може. Отже, повинно існувати значення індукції квантуючого магнітного поля, при якому величина термоЕРС досягає максимуму. В наших умовах це індукція від 0.86 до 1.73 Тл. Однак у міру дальшого зростання магнітного поля величина термоЕРС починає спадати до нуля різко у впорядкованому стані і більш плавно у неупорядкованому стані. Більш різкий спад величини термоЕРС у впорядкованому стані пояснюється звуженням міні-зони провідності, яка описує міжшаровий рух носіїв заряду.

Отже встановимо асимптотичний закон, у відповідності з яким відбувається зниження термоЕРС до нуля в ультраквантовій границі. Для цього за  $\zeta_0/\mu^*B \ll 1$  запишемо співвідношення (5) в такому вигляді:

$$\gamma = b - \sqrt{w^2\delta^2 + 1} + \frac{\pi^2\zeta_0^2}{32(\mu^*B)^2\sqrt{w^2\delta^2 + 1}}. \quad (17)$$

При обчисленні коефіцієнтів  $A$ ,  $B$ ,  $C$  в інтегралах по  $y$  зробимо заміну змінних  $y = y_1 - \sqrt{w^2\delta^2 + 1}$ . При цьому врахуємо, що після підстановки (17) у вирази (8) – (10) в тригонометричних множниках  $(-1)^l$  скомпенсується, після чого косинуси можна замінити на одиниці, а синуси – на їх аргументи. Величину  $f_i^{th}$  за  $kT/\mu^*B \ll 1$  подамо так:

$$f_i^{th} = \frac{(\pi^2 l k T / \mu^* B)^2}{2sh(\pi^2 l k T / \mu^* B)}, \quad (18)$$

Окрім того, врахуємо, що за малих  $\eta$ , як показує чисельний аналіз, справедливі такі співвідношення:

$$\sum_{l=1}^{\infty} \frac{\eta l}{sh(\eta l)} = \frac{2.467}{\eta}, \quad (20)$$

$$\sum_{l=1}^{\infty} \frac{\eta l^3}{sh(\eta l)} = \frac{12.176}{\eta^3}. \quad (21)$$

Підінтегральні вирази у формулах (8) – (10) розкладемо в ряди по малому параметру  $y_1$  і виконаємо інтегрування по ньому в межах від 0 до  $\frac{\pi^2\zeta_0^2}{32(\mu^*B)^2\sqrt{w^2\delta^2 + 1}}$ .

Після виконання всіх операцій і об'єднання числових множників в один отримаємо такий остаточний вираз для термоЕРС зарядово-впорядкованого шаруватого кристала в ультраквантовій границі:

$$|\alpha| = 0.305\alpha_0 \frac{\zeta_0^2 \Delta^2}{kT (\mu^* B)^2 \sqrt{W_0^2 \delta^2 + \Delta^2}}. \quad (22)$$

Такий закон на перший погляд важко зрозуміти, оскільки у відповідності з ним термоЕРС не прямує до нуля за  $T = 0$ . Однак за реальних низьких температур до некоректних фізичних наслідків цей закон не веде. Справді, наприклад, за  $B = 60$  Тл і раніше обумовлених параметрах задачі, враховуючи залежність порядку від магнітного поля для значень  $W_0/\zeta_0$  рівних 1.5, 2 та 2.5 відповідно, отримаємо значення термоЕРС, рівні 0.475, 0.358 та 0.287 мкВ/К відповідно, що на три порядки менше від максимальних значень термоЕРС. У неупорядкованому стані за  $B = 60$  Тл термоЕРС становить 0.725 мкВ/К, що у 162 рази менше від максимального значення.

Варто зауважити, що з використанням для обчислення термоЕРС в ультраквантовій границі того ж підходу, що і в статті [19] для обчислення провідності вийде, що вона повинна тотожно дорівнювати нулю, оскільки залежність функції розподілу від температури в даному підході нехтується, що фактично відповідає випадку  $T = 0$ . Таким чином, цей підхід все одно вимагає обчислення термоЕРС в наступних наближеннях за малими параметрами  $kT/\Delta$ ,  $kT/\zeta_0$  та  $kT/\mu^*B$ .

## Висновки

1. Показано, що зарядове впорядкування призводить до появи біперіодичної структури осциляцій, зростання амплітуди осциляцій та перемикавання полярності термоЕРС в слабких квантуючих магнітних полях, що зумовлено зміною топології ПФ від замкненої до відкритої і звуженням міні-зони провідності, що описує міжшаровий рух носіїв заряду, з переходом у зарядово-впорядкований стан.
2. У сильних квантуючих магнітних полях зарядове впорядкування призводить до різкого багатократного перемикавання полярності термоЕРС і різкого зростання її максимальної величини порівнянно з термоЕРС у неупорядкованому стані.
3. Після досягнення максимуму термоЕРС її величина в обох випадках різко знижується за законом  $\alpha \propto T^{-1}B^{-2}$ , що пояснюється стисканням ПФ кристалу в напрямку магнітного поля в ультраквантовій границі. У зарядово-впорядкованому стані термоЕРС знижується більш стрімко, що пояснюється звуженням міні-зони, яка описує міжшаровий рух носіїв заряду, із зарядовим впорядкуванням і повільним руйнуванням зарядового впорядкування у магнітному полі.

Зрозуміло, що всі отримані в статті результати потребують експериментальної перевірки, але поки що всі відомі її авторів експерименти стосуються виключно досліджень ефекту Шубнікова-де-Гааза в шаруватих кристалах з сильно відкритими ПФ в області застосовності квазікласичного наближення.

Автор також усвідомлює, що після прочитання цієї статті у читача може виникнути питання: а яке практичне застосування, тим паче в термоелектриці, можуть мати отримані результати? Ніякого, якщо говорити про термоелектричні генератори чи охолоджувачі. Але дуже істотне, якщо говорити про термоелектричні явища як вимірювальний засіб для дослідження інших характеристик матеріалів. Традиційно зовсім донедавна зонна структура матеріалів та механізми розсіювання носіїв заряду в них вивчались виключно за допомогою ефектів Ван-Альфена-де-Гааза та Шубнікова-де-Гааза. Однак виділити осциляції Ван-Альфена-де-Гааза та Шубнікова-де-Гааза із загальної магнітної сприйнятливості і, тим паче, провідності важко. В той же час осциляції термоЕРС спостерігаються безпосередньо. Отже їх дослідження при низьких температурах можна розглядати як додатковий засіб вивчення зонної структури матеріалів, в тому числі термоелектричних, та механізмів розсіювання носіїв заряду в них.

## Література

1. Anatyshuk L.I. Thermoelectricity. Vol. 1. Physics of Thermoelectricity. – Kyiv-Chernivtsi, ITE, 1998, 376 p.
2. Anatyshuk L.I. Thermoelectricity. Vol. 2. Thermoelectric Energy Converters. – Kyiv-Chernivtsi, ITE, 2005, 398 p.
3. Гаджиалиев М.М. Температурная зависимость термоЭДС диска Корбино из антимонида индия в квантующем магнитном поле / М.М. Гаджиалиев, З.Ш. Пирмагомедов // ФТП. – 2009. – 43. – 1032 с.
4. Алиев Ф.Ф. Электрические и термоэлектрические свойства  $p$ - $Ag_2Te$  в  $\beta$ -фазе / Ф.Ф. Алиев // ФТП. – 2003. – 37. – 1082 с.
5. Термоэлектрические свойства нанокмозитов теллурида висмута с фуллеренами / В.А. Кульбачинский, В.Г. Кытин, В.Д. Бланк [и др.] // ФТП. – 2011. – 45. – 1241 с.
6. Гальваномагнитные и термоэлектрические свойства твердых растворов  $p$ - $Bi_{2-x}Sb_xTe_{3-y}Se_y$  / Л.Н. Лукьянова, В.А. Кутасов, В.В. Попов [и др.] // ФТТ. – 2004. – 46. – 1366 с.
7. A.I. Shelykh, V.I. Smirnov, T.S. Orlova, I.A. Smirnov, A.R. de Arellano-Lopez, J. Martinez-Fernandes and F.M. Varela-Feria, Electric and Thermoelectric Properties of Biomorphic  $SiC/Si$  Composite at High Temperatures, *Fizika Tverdogo Tela* 48, 214 (2006).
8. Gabor N.M., Song J.C.W., Ma Q., Nair N.L., Taychatanapat T., Watanabe K., Taniguchi T., Levitov L.S., Jarilo-Herrero P. Hot carrier-assisted intrinsic photoresponse in graphene. *Science*, 334 (6056), 2011, 648 (DOI:10.1126/science.1211384).
9. Пшеная-Северин Д.А. Влияние особенностей зонной структуры на термоэлектрические свойства полупроводника / Д.А. Пшеная-Северин, М.И. Федоров // ФТТ. – 2007. – 49. – 1559 с.
10. Liu Y.S., Hong X.K., Feng J.F., Yang X.F. Fano-Rashba effect in thermoelectricity of a double quantum dot molecular junction/ *Nanoscale Res. Let.*, 6: 618, 2011, 1.
11. Косевич А.М. О квантовом аналоге интеграла столкновений в электрическом и магнитном полях / А.М. Косевич, В.В. Андреев // ЖЭТФ. – 1960. – 38. – 882 с.
12. Gusynin V.P., Shaparov S.G. Magnetic oscillations in planar systems with the Dirac-like spectrum of quasiparticle excitations. II. Transport properties. *Phys. Rev.B* 71, 125124 (2005).
13. M. Müller, L. Frits and S. Sachdev, Quantum Critical Relativistic Magnetotransport in Graphene, *ArXiv: 0805. 1413v2 [cond-mat.str-el]* (2008).
14. Onn D.G., Foley G.M.T, Fisher J.E. Resistivity anomalies and phase transitions in alkali metal-graphite intercalation compounds. *Mat. Sci. Eng.* 31, 1977, 271.
15. Williams P.M., Scruby C.B., Totlock G.J. Charge density waves in  $2H-NbSe_2$ . *Sol.St.Comm.* 17, 1975, 1197.
16. Горский П.В. Продольная электропроводность слоистых зарядово-упорядоченных кристаллов в сильном квантующем магнитном поле / П.В. Горский // ФТП. – 2011. – 45. – 928 с.
17. Шенберг Д. Магнитные осцилляции в металлах / Д. Шенберг. – Москва: Мир, 1986. – 680 с.
18. Grigoriev P.D. Theory of Shubnikov-de-Haas effect in quasi-two-dimensional metals.
19. Laikhtman B, Menashe D. Resistance magneto-oscillations of superlattices. *Phys. Rev. B* 52, 1994, 8974.

Надійшла до редакції 22.10.2012.