

П.В. ГОРСЬКИЙ

Чернівецький національний університет ім. Ю. Федьковича
(Вул. Коцюбинського, 2, Чернівці 58012; e-mail: gena.grim@gmail.com)**ФАКТОР ПОТУЖНОСТІ
ШАРУВАТОГО ТЕРМОЕЛЕКТРИЧНОГО
МАТЕРІАЛУ ІЗ ЗАМКНЕНОЮ ПОВЕРХНЕЮ
ФЕРМІ В КВАНТУЮЧОМУ МАГНІТНОМУ ПОЛІ**

УДК 538.9

Досліджено залежність фактора потужності шаруватого термоелектричного матеріалу із замкненою поверхнею Фермі в квантуючому магнітному полі при гелієвих температурах для випадку, коли магнітне поле та градієнт температури спрямовані перпендикулярно до шарів. Розрахунки проведено в наближенні сталого часу релаксації. У слабких магнітних полях ефекти шаруватості виражаються у відставанні осциляцій фактора потужності за фазою, збільшенні їх відносного внеску і у деякому зменшенні величини фактора потужності в цілому. В області сильних магнітних полів існує оптимальний діапазон, в якому фактор потужності різко зростає і досягає максимуму, абсолютна величина котрого при вибраних параметрах задачі в наближенні ефективної маси на 12% більша, ніж для реального шаруватого кристала. Попри низькі температури, при цих параметрах максимум фактора потужності в магнітному полі з індукцією близько 1 Тл досягає значення, характерного для перспективних купратних термоелектричних матеріалів при температурі понад 1000 К. Для цього необхідно, щоб відношення довжини вільного пробігу носіїв заряду до відстані між сусідніми шарами становило 30000 або більше. Однак в ультраквантових магнітних полях фактор потужності різко знижується за законом $P \propto T^{-3}B^{-6}$. Основною причиною такого зниження є тиск поверхні Фермі в напрямку магнітного поля в ультраквантовій границі внаслідок конденсації носіїв заряду на дні єдиної заповненої підзони Ландау з номером $n = 0$.

Ключові слова: фактор потужності, термоелектричний коефіцієнт, квантуюче магнітне поле, підзона Ландау, замкнена поверхня Фермі.

1. Вступ

Сьогодні інтенсивно досліджуються термоелектричні властивості багатьох матеріалів. Об'єктами досліджень є метали, сплави, напівпровідники [1, 2], фулерени [3], композити [4], у тому числі біоморфні [5], та ін. Перспективним термоелектричним матеріалом є графен [6]. Саме своєрідний фототермоелектричний ефект в ньому, котрий раніше вважався суто фотовольтаїчним, дозволяє розглядати графен як матеріал для сонячних елементів з високим коефіцієнтом корисної дії.

Широко розробляється теорія термоелектричних властивостей матеріалів, у тому числі наносистем [7, 8]. Так, одну з перших робіт з теорії поперечних термоелектричних коефіцієнтів металів

у квантуючому магнітному полі було опубліковано А.М. Косевичем та В.В. Андреевим [9].

Велика кількість 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. В той самий час у переважній більшості теоретичних робіт, присвячених поведінці таких шаруватих систем у квантуючих магнітних полях, вивчаються в основному поперечні гальваномагнітні ефекти. Теплопровідність графену за наявності магнітного поля, в тому числі в квантуючому магнітному полі, його провідність при сталому та змінному струмі, квантовий ефект Хола в ньому розглядалися в роботах [10, 11]. При цьому його поверхня Фермі вважалась відкритою, тобто такою, котра займає

© П.В. ГОРСЬКИЙ, 2013

всю одновимірну зону Бріллюена і при періодичному продовженні виявляється зв'язною, тобто являє собою суцільний гофрований циліндр. В основному ці роботи було присвячено 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 гамільтоніана.

З іншого боку, в попередніх роботах автор показав, що ефекти шаруватості при дослідженні поведінки носіїв заряду в напрямку, перпендикулярному до шарів, можуть бути добре вираженими і при замкнених поверхнях Фермі (ПФ) [12], або ж при топологічному переході від відкритих ПФ до замкнених [13].

Слід зауважити, що фактор потужності, який являє собою добуток квадрата термоелектричного коефіцієнта на провідність, є доволі показовою інтегральною характеристикою системи вільних носіїв заряду в матеріалі [14], важливою для оцінки його термоелектричних властивостей і перспектив застосування. Внаслідок цього метою даної статті є розрахунок і дослідження залежності фактора потужності шаруватого термоелектричного матеріалу із замкненою ПФ від індукції квантуючого магнітного поля.

2. Розрахунок фактора потужності шаруватого кристала та обговорення отриманих результатів

Під час розрахунку фактора потужності шаруватого кристала в квантуючому магнітному полі, перпендикулярному до площини шарів, будемо використовувати такий закон дисперсії носіїв заряду:

$$\varepsilon(n, x) = \mu^* B (2n + 1) + W(x), \quad (1)$$

де $\mu^* = \mu_B m_0 / m^*$, μ_B – магнетон Бора, m_0 – маса вільного електрона, m^* – ефективна маса електрона у площині шарів, B – індукція магнітного поля, n – номер рівня Ландау, $W(x)$ – закон дисперсії носіїв заряду вздовж осі надґратки, причому $x = ak_z$, де k_z – компонента квазіімпульсу вздовж осі надґратки, a – відстань між трансляційно еквівалентними шарами.

З метою вивчення впливу ефектів шаруватості на фактор потужності його розрахунок проведемо для двох випадків, а саме випадку закону сильного зв'язку:

$$W(x) = \Delta (1 - \cos x), \quad (2)$$

де Δ – півширина міні-зони, яка визначає рух електронів між шарами, і для випадку, коли у формулі (2) збережено лише квадратичний член по x , що відповідає наближенню ефективної маси. При цьому для обох випадків врахуємо залежність хімічного потенціалу електронного газу від індукції магнітного поля. Для спрощення розрахунків час релаксації носіїв заряду будемо вважати сталим. З цієї ж метою не будемо детально розглядати вплив фактора Дінгла на осциляції поздовжньої провідності (осциляції Шубнікова–де Гааза), та осциляції поздовжнього термоелектричного коефіцієнта α_{zz} , який (з точністю до знака) визначається як коефіцієнт пропорційності між градієнтом електрохімічного потенціалу системи носіїв заряду і градієнтом температури за умови рівності струму нулеві. Слід однак зазначити, що при розсіюванні електронів на домішках і дефектах кристалічної ґратки вказаний фактор може бути істотним [15].

Якщо виходити з кінетичного рівняння Больцмана і діяти так само, як і при виведенні формули для поздовжньої електропровідності, можна отримати таку загальну формулу для термоелектричного коефіцієнта α_{zz} :

$$\alpha_{zz} = - \left[\frac{\partial}{\partial T} \sum_{\gamma} \tau_{\gamma} g_{\gamma} v_{z\gamma}^2 f^0(\varepsilon_{\gamma}) \right] \times \left[e \frac{\partial}{\partial \zeta} \sum_{\gamma} \tau_{\gamma} g_{\gamma} v_{z\gamma}^2 f^0(\varepsilon_{\gamma}) \right]^{-1}. \quad (3)$$

У цій формулі: T – абсолютна температура, e – модуль елементарного заряду, ζ – хімічний потенціал системи носіїв заряду, які ми вважаємо електронами, $\gamma \equiv (n, x)$ – набір квантових чисел, що характеризують енергію електрона, τ_{γ} – час релаксації носіїв заряду, $v_{z\gamma}$ – поздовжня швидкість електрона, g_{γ} – статистична вага рівня Ландау в розрахунок на одиницю об'єму кристала, $f^0(\varepsilon_{\gamma})$ – функція розподілу Фермі–Дірака. Для закону дисперсії (1) за умови, що $\tau_{\gamma} \equiv \tau(x)$ формула (3) набуває

вигляду

$$\alpha_{zz} = \frac{\pi k}{e} \frac{A}{B+C}. \quad (4)$$

У ній величини A, B, C мають такі значення:

$$A = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l-1} f_l^{\text{th}} \int_{W(x) \leq \zeta} \tau(x) W'(x)^2 \times \sin \left[\pi l \frac{\zeta - W(x)}{\mu^* B} \right] dx, \quad (5)$$

$$B = 0,5 \int_{W(x) \leq \zeta} \tau(x) W'(x)^2 dx, \quad (6)$$

$$C = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l f_l^{\sigma} \int_{W(x) \leq \zeta} \tau(x) W'(x)^2 \times \cos \left[\pi l \frac{\zeta - W(x)}{\mu^* B} \right] dx. \quad (7)$$

При цьому

$$f_l^{\text{th}} = [\text{sh}(\pi^2 lkT/\mu^* B)]^{-1} \times [1 - (\pi^2 lkT/\mu^* B) \text{cth}(\pi^2 lkT/\mu^* B)], \quad (8)$$

$$f_l^{\sigma} = (\pi^2 lkT/\mu^* B) [\text{sh}(\pi^2 lkT/\mu^* B)]^{-1}. \quad (9)$$

У цих формулах $\text{sh}(x)$ та $\text{cth}(x)$ – гіперболічні синус та котангенс відповідно. У відповідності з результатами роботи [12] повну поздовжню електропровідність шаруватого кристала можна записати у вигляді

$$\sigma_{zz} = \frac{32\pi^2 e^2 m^* a}{h^4} (B+C). \quad (10)$$

Отже, фактор потужності шаруватого кристала дорівнює:

$$P = \frac{32\pi^4 k^2 m^* a A^2}{h^4 (B+C)}. \quad (11)$$

У конкретному випадку закону дисперсії (2) для випадку $\tau(x) \equiv \tau_0$ легко перейти до безрозмірної форми коефіцієнтів A, B, C і записати фактор потужності у вигляді

$$P = \frac{16\pi^4 k^2 m^* a \Delta^2 \tau_0 A^2}{h^4 (B+C)}. \quad (12)$$

Тепер коефіцієнти A, B, C мають такі значення:

$$A = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l-1} f_l^{\text{th}} \left\{ \sin \left(\pi l \frac{\zeta - \Delta}{\mu^* B} \right) \left[(C_0 - C_2) \times J_0 \left(\frac{\pi l \Delta}{\mu^* B} \right) + \sum_{r=1}^{\infty} (-1)^r (2C_{2r} - C_{2r+2} - C_{2r-2}) \times J_{2r} \left(\frac{\pi l \Delta}{\mu^* B} \right) \right] + \cos \left(\pi l \frac{\zeta - \Delta}{\mu^* B} \right) \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r \times (2C_{2r+1} - C_{2r+3} - C_{|2r-1|}) J_{2r+1} \left(\frac{\pi l \Delta}{\mu^* B} \right) \right\}, \quad (13)$$

$$B = 0,5 (C_0 - C_2). \quad (14)$$

$$C = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l f_l^{\sigma} \left\{ \cos \left(\pi l \frac{\zeta - \Delta}{\mu^* B} \right) \left[(C_0 - C_2) \times J_0 \left(\frac{\pi l \Delta}{\mu^* B} \right) + \sum_{r=1}^{\infty} (-1)^r (2C_{2r} - C_{2r+2} - C_{2r-2}) \times J_{2r} \left(\frac{\pi l \Delta}{\mu^* B} \right) \right] - \sin \left(\pi l \frac{\zeta - \Delta}{\mu^* B} \right) \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r \times (2C_{2r+1} - C_{2r+3} - C_{|2r-1|}) J_{2r+1} \left(\frac{\pi l \Delta}{\mu^* B} \right) \right\}. \quad (15)$$

У формулах (13)–(15) $J_n(x)$ – функції Беселя першого роду дійсного аргументу.

Модулюючі коефіцієнти C_m визначаються так:

$$C_0 = \arccos \left(1 - \frac{\zeta - \mu^* B}{\Delta} \right), \quad (16)$$

$$C_m = \frac{\sin m C_0}{m} \quad \text{при } m \neq 0. \quad (17)$$

Формули (12)–(17) у наближенні, що розглядається, повністю визначають температурну і польову залежність фактора потужності шаруватого кристала. При цьому в формулах (16) і (17) хімічний потенціал газу носіїв заряду вважається залежним від магнітного поля. Причиною віднімання від нього величини $\mu^* B$, тобто мінімальної енергії електрона є стиск ПФ кристала у квантуючому магнітному полі.

У наближенні ефективної маси безрозмірні коефіцієнти A, B, C відповідно дорівнюють:

$$A = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l-1} f_l^{\text{th}} \left\{ \frac{\mu^* B}{\pi l \Delta} \sqrt{\frac{2(\zeta - \mu^* B)}{\Delta}} - \right.$$

$$-\frac{1}{\pi} \left(\frac{\mu^* B}{l\Delta}\right)^{3/2} \left[\cos\left(\frac{\pi l \zeta}{\mu^* B}\right) C\left(\sqrt{2l\left(\frac{\zeta}{\mu^* B}-1\right)}\right) + \right. \\ \left. + \sin\left(\frac{\pi l \zeta}{\mu^* B}\right) S\left(\sqrt{2l\left(\frac{\zeta}{\mu^* B}-1\right)}\right) \right] \Bigg\}, \quad (18)$$

$$B = \frac{1}{6} \left[2 \left(\frac{\zeta - \mu^* B}{\Delta}\right) \right]^{3/2}, \quad (19)$$

$$C = \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l f_l^\sigma \frac{1}{\pi} \left(\frac{\mu^* B}{l\Delta}\right)^{3/2} \left[\sin\left(\frac{\pi l \zeta}{\mu^* B}\right) \times \right. \\ \times C\left(\sqrt{2l\left(\frac{\zeta}{\mu^* B}-1\right)}\right) - \cos\left(\frac{\pi l \zeta}{\mu^* B}\right) \times \\ \times S\left(\sqrt{2l\left(\frac{\zeta}{\mu^* B}-1\right)}\right) \Bigg]. \quad (20)$$

У цих формулах $C(x)$ та $S(x)$ – косинус та синус-інтеграли Френеля відповідно.

Для подальших обчислень нам знадобиться залежність хімічного потенціалу ζ газу носіїв заряду від квантуючого магнітного поля. У роботі [12] ця залежність вже наводилась, але в даному випадку корисно нагадати її. Рівняння, яке визначає хімічний потенціал електронного газу в квантуючому магнітному полі при низьких температурах, має такий загальний вигляд:

$$n_0 = \frac{4m^*}{ah^2} \int_{W(x) \leq \zeta} [\zeta - W(x)] dx + \frac{8\pi m^* kT}{ah^2} \times \\ \times \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l}{\text{sh}(\pi^2 l kT / \mu^* B)} \int_{W(x) \leq \zeta} \sin\left(\pi l \frac{\zeta - W(x)}{\mu^* B}\right) dx, \quad (21)$$

де n_0 – об'ємна концентрація носіїв заряду в кристалі.

Рівняння (21) для закону дисперсії (2) у випадку замкнених ПФ набуває вигляду

$$n_0 = \frac{4m^* \Delta}{ah^2} \left[(\gamma - 1) C_0 + \sqrt{2\gamma - \gamma^2} \right] + \\ + \frac{8m^* \pi kT}{ah^2} \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l}{\text{sh}(\pi^2 l kT / \mu^* B)} \left\{ \sin\left(\pi l \frac{\zeta - \Delta}{\mu^* B}\right) \times \right. \\ \times \left[C_0 J_0\left(\frac{\pi l \Delta}{\mu^* B}\right) + 2 \sum_{r=1}^{\infty} (-1)^r C_{2r} J_{2r}\left(\frac{\pi l \Delta}{\mu^* B}\right) \right] +$$

$$\left. + 2 \cos\left(\pi l \frac{\zeta - \Delta}{\mu^* B}\right) \sum_{r=0}^{\infty} (-1)^r C_{2r+1} J_{2r+1}\left(\frac{\pi l \Delta}{\mu^* B}\right) \right\}. \quad (22)$$

У цьому рівнянні модулюючі коефіцієнти C_m слід брати при $B = 0$, при цьому $\gamma = \zeta / \Delta$.

У випадку відкритих поверхонь, тобто при $\gamma - \mu^* B / \Delta \geq 2$ у формулах (13)–(17) та (22) слід покласти $C_0 = \pi$ і, окрім того, радикал у формулі (22) вважати рівним нулеві.

При переході у рівнянні (22) до наближення ефективної маси воно набуде вигляду

$$n_0 = \frac{8m^* \zeta}{3ah^2} \sqrt{\frac{2\zeta}{\Delta}} + \frac{8\pi m^* kT}{ah^2} \sqrt{\frac{\mu^* B}{\Delta}} \times \\ \times \sum_{l=1}^{\infty} \frac{(-1)^l}{l^{1/2} \text{sh}(\pi^2 l kT / \mu^* B)} \left[\sin\left(\frac{\pi l \zeta}{\mu^* B}\right) C\left(\sqrt{\frac{2l\zeta}{\mu^* B}}\right) + \right. \\ \left. + \cos\left(\frac{\pi l \zeta}{\mu^* B}\right) S\left(\sqrt{\frac{2l\zeta}{\mu^* B}}\right) \right]. \quad (23)$$

Концентрацію носіїв заряду для обох досліджуваних випадків будемо вважати однаковою і визначати за формулою

$$n_0 = \frac{4m^* \Delta}{ah^2} \left[(\gamma_0 - 1) \arccos(1 - \gamma_0) + \sqrt{2\gamma_0 - \gamma_0^2} \right], \quad (24)$$

де $\gamma_0 = \zeta_0 / \Delta$, причому ζ_0 – енергія Фермі електронного газу в кристалі з законом дисперсії (2) при абсолютному нулі температури і за відсутності магнітного поля.

Рівняння (22) та (23) можуть бути розв'язані чисельно і результати цього розв'язання для шаруватого кристала із замкненою ПФ в діапазоні наведено на рис. 1.

При зростанні магнітного поля обидві криві зближуються, оскільки рівняння (22) у випадку замкнених ПФ у сильному квантуючому магнітному полі має такий асимптотичний розв'язок [12]:

$$\zeta(B) = \mu^* B + \Delta \left[1 - \cos\left(\frac{f(\gamma_0) \Delta}{2\mu^* B}\right) \right], \quad (25)$$

причому у випадку замкнених поверхонь

$$f(\gamma_0) = (\gamma_0 - 1) \arccos(1 - \gamma_0) + \sqrt{2\gamma_0 - \gamma_0^2}, \quad (26)$$

звідки видно, що в ультраквантовій границі єдина заповнена підзона Ландау звужується і це звуження обов'язково слід враховувати при розрахунку фактора потужності.

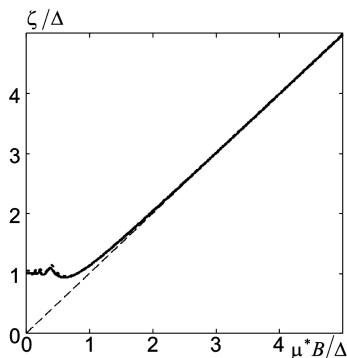


Рис. 1. Польова залежність хімічного потенціалу при $\gamma_0 = 1$ і $kT/\Delta = 0,03$ для шаруватого кристала (суцільна крива) і в наближенні ефективної маси (пунктирна крива). Тонка пунктирна лінія – граничний випадок $\zeta = \mu^*B$

У наближенні ефективної маси формула (25) набуває вигляду

$$\zeta(B) = \mu^*B + \frac{\Delta^3 f^2(\gamma_0)}{8(\mu^*B)^2}. \quad (27)$$

Зауважимо, що усі наведені вище формули для поздовжнього термоелектричного коефіцієнта та фактора потужності отримано також за умови малості уширення енергетичних рівнів за рахунок взаємодії порівняно з відстанню між рівнями Ландау. Лише в цьому випадку можна прямо пов'язати уширення енергетичних рівнів з часом релаксації, а зумовленим розсіюванням зсувом енергетичних рівнів знехтувати. Тоді підхід, що ґрунтується на рівнянні Больцмана, повністю еквівалентний підходові, заснованому на формалізмі Кубо.

Для обчислення фактора потужності нам ще знадобиться вираз для часу релаксації τ_0 . Цей час для довільного γ_0 ми будемо визначати так само, як і в роботах [12, 13], а саме, за формулою

$$\tau_0 = \frac{lm_{es}^*}{hk_0}, \quad (28)$$

де l – довжина вільного пробігу носіїв заряду, зумовлена розсіюванням на домішках, k_0 – радіус еквівалентної сфери, якою замінюється реальна ПФ для того, щоб розсіювання можна було розглядати як ізотропне, m_{es}^* – еквівалентна маса носіїв заряду на цій сфері. Останні два параметри визначаються так, щоб концентрація носіїв заряду і енергія Фермі збігалися з цими параметрами, визначеними або для реального шаруватого криста-

ла, або в наближенні ефективної маси. Тому для обох випадків

$$k_0 = \sqrt[3]{\frac{12\pi^2 m^* \Delta f(\gamma_0)}{ah^2}}. \quad (29)$$

А параметр m_{es}^* для реального шаруватого кристала визначається за формулою

$$m_{es}^* = \frac{h^2 k_0^2}{8\pi^2 \gamma_0 \Delta}, \quad (30)$$

а в наближенні ефективної маси – за формулою

$$m_{es}^* = \frac{h^2 k_0^2}{8\pi^2 \gamma_{0em} \Delta}. \quad (31)$$

Тому остаточно отримуємо такий вираз для фактора потужності кристала:

$$P = P_0 \frac{A^2}{B + C}, \quad (32)$$

причому для реального шаруватого кристала P_0 визначається за формулою:

$$P_0 = \frac{2\pi^3 k^2 m^* a^2 \Delta}{h^3 \gamma_0} \sqrt[3]{\frac{12\pi^2 m^* \Delta f(\gamma_0)}{ah^2}} N, \quad (33)$$

а в наближенні ефективної маси за формулою:

$$P_0 = \frac{2\pi^3 k^2 m^* a^2 \Delta}{h^3 \gamma_{0em}} \sqrt[3]{\frac{12\pi^2 m^* \Delta f(\gamma_0)}{ah^2}} N. \quad (34)$$

Коефіцієнти A, B, C у формулі (32) визначаються відповідно за формулами (13)–(15) для реального шаруватого кристала та (18)–(20) – у наближенні ефективної маси. Крім того, $N \equiv l/a$.

Результати розрахунку польової залежності фактора потужності шаруватого кристала в різних діапазонах індукції квантуючого магнітного поля наведено на рис. 2, 3.

З рис. 2 видно, що осциляції фактора потужності у випадку реального шаруватого кристала виражені сильніше, а абсолютна величина фактора потужності менша, ніж у наближенні ефективної маси. Як і у випадку з поздовжньою провідністю, це пояснюється тим, що, з одного боку, всяке обмеження вільного руху носіїв заряду зменшує провідність, а, з іншого боку – більш слабкою залежністю перерізу ПФ площиною, перпендикулярною до напрямку магнітного поля від поздовжнього квазіімпульсу. Крім того, у випадку реального

шаруватого кристала має місце деяке відставання осциляцій за фазою внаслідок того, що при одній і тій самій концентрації носіїв заряду енергія Фермі для реального шаруватого кристала дещо менша, ніж в наближенні ефективної маси. Цей же фактор також дає внесок у збільшення відносного внеску осциляцій фактора потужності.

Зауважимо, що в традиційному квазікласичному наближенні фактор потужності дорівнює:

$$P = P_0 \frac{3(\mu^* B)^3}{2^{3/2} \pi^2 \Delta^{3/2} \zeta^{3/2}} \times \left[\sum_{l=1}^{\infty} (-1)^{l-1} l^{-3/2} f_l^{\text{th}} \cos\left(\frac{\pi l \zeta}{\mu^* B} - \frac{\pi}{4}\right) \right]^2 \quad (35)$$

З цієї формули знову зрозуміло, що при сталій енергії Фермі неможливо вирізнити вплив ефектів шаруватості на фактор потужності. Але, оскільки при сталій концентрації носіїв заряду енергія Фермі для реального шаруватого кристала дещо менша, ніж у наближенні ефективної маси, осциляції фактора потужності у шаруватому кристалі повинні бути виражені різкіше, ніж у наближенні ефективної маси, що справді має місце. У той самий час рис. 2 свідчить про те, що фактор потужності в наближенні ефективної маси є дещо більшим, ніж у випадку реального шаруватого кристала, хоча з формули (35) при врахуванні формул (33) і (34) впливає обернена ситуація. Така уявна суперечність має місце, оскільки на значення фактора потужності впливає також монотонна складова термоелектричного коефіцієнта, яка не може бути врахована у рамках традиційного підходу, для якого конкретна форма і розміри ПФ неістотні.

З рис. 3 видно, що і в сильних квантуючих магнітних полях осциляції фактора потужності у випадку реального шаруватого кристала виражені сильніше, ніж у наближенні ефективної маси. Однак після останнього осциляційного мінімуму фактор потужності починає різко зростати і досягає максимуму приблизно в точці останнього осциляційного піка хімічного потенціалу. Наявність цього максимуму можна пояснити такими фізичними міркуваннями. З одного боку, зрозуміло, що у відповідності із загальними термодинамічними співвідношеннями, яким цілком відповідає формула (35), так само, як і формули (13) і (18) та рис. 2 і 3,

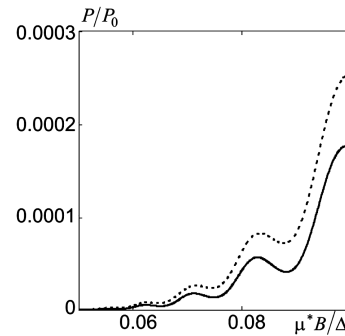


Рис. 2. Польова залежність фактора потужності при $\gamma_0 = 1$, $0,05 \leq \mu^* B / \Delta \leq 0,1$, $kT / \Delta = 0,03$ для реального шаруватого кристала (суцільна крива) і в наближенні ефективної маси (пунктирна крива)

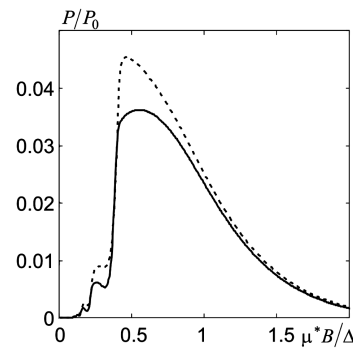


Рис. 3. Польова залежність фактора потужності при $\gamma_0 = 1$, $0 \leq \mu^* B / \Delta \leq 2kT / \Delta = 0,03$ для реального шаруватого кристала (суцільна крива) і в наближенні ефективної маси (пунктирна крива)

при достатньо слабких магнітних полях і низьких температурах фактор потужності повинен прямувати до нуля і в ультраквантовій границі внаслідок стискання ПФ вздовж напрямку магнітного поля. Але тотожно дорівнювати нулеві цей фактор не може. Отже, при деякій індукції магнітного поля він повинен мати максимум. Крім того, з рисунка видно, що в наближенні ефективної маси максимум фактора потужності є більшим і виражений різкіше, ніж для реального шаруватого кристала. Це пояснюється більшою щільністю електронних станів і більш різкою залежністю її від енергії у випадку реального шаруватого кристала. Однак з тієї ж причини фактор потужності після максимуму у випадку реального шаруватого кристала спадає повільніше, ніж у наближенні ефективної маси.

Чисельні розрахунки свідчать про те, що, наприклад, при $\Delta = 0,01$ еВ, $m^* = 0,01m_0$, $kT/\Delta = 0,03$, $a = 1$ нм, $\gamma_0 = 1$ максимальний фактор потужності для реального шаруватого кристала дорівнює $3,350 \cdot 10^{-9}$ Вт/(м·К²), а в наближенні ефективної маси – $3,758 \cdot 10^{-9}$ Вт/(м·К²). З іншого боку, перспективними термоелектричними матеріалами вважаються такі, для яких фактор потужності (щоправда, при 1000 К) становить, наприклад, $1,04 \cdot 10^{-4}$ Вт/(м·К²) [14]. Такому значенню фактора потужності в наших умовах відповідає значення $N = (2,767-3,104) \cdot 10^4$, тобто довжина вільного пробігу носіїв заряду $l = 28-31$ мкм. За такого відношення довжини вільного пробігу до відстані між сусідніми шарами прирівнювання фактора Дінгла до одиниці в усьому діапазоні досліджуваних магнітних полів є цілком законним. Ці показники можна розглядати як своєрідний варіант “технічних вимог” до термоелектричного матеріалу. При цих самих параметрах задачі індукція магнітного поля, в якому досягається максимум фактора потужності, становить приблизно 1,018 Тл.

Насамкінець встановимо асимптотичний закон спаду фактора потужності в ультраквантовій границі. Для цього замість ζ у вирази для коефіцієнтів A, B, C (5)–(7) підставимо вираз (27), після чого за рахунок тригонометричних множників $(-1)^l$ скомпенсується. Замінімо косинуси на одиниці, а синуси – на їх аргументи, а вираз f_l^{th} при $\mu^*B/kT \gg 1$ представимо у вигляді

$$f_l^{\text{th}} = \frac{(\pi^2 l k T / \mu^* B)^2}{2 \text{sh}(\pi^2 l k T / \mu^* B)}. \quad (36)$$

При підсумовуванні рядів по l врахуємо, що чисельний аналіз показує справедливість таких співвідношень (для малих δ):

$$\sum_{l=1}^{\infty} \frac{\delta l}{\text{sinh}(\delta l)} = \frac{2,467}{\delta}, \quad (37)$$

$$\sum_{l=1}^{\infty} \frac{\delta l^3}{\text{sinh}(\delta l)} = \frac{12,176}{\delta^3}. \quad (38)$$

Підінтегральні вирази у формулах (5)–(7) розкладемо в ряди по x з точністю до головних членів і виконаємо інтегрування у межах від 0 до $\frac{f(\gamma_0)\Delta}{2\mu^*B}$. Після всіх перетворень і об'єднання числових множників в один отримаємо такий асимптотичний

вираз для фактора потужності реального шаруватого кристала поблизу ультраквантової границі:

$$P = 1,929 \cdot 10^{-2} k^2 f^7(\gamma_0) \frac{m^* a^2 \Delta^{10}}{h^3 (\mu^* B)^6 (kT)^3 \gamma_0} \times \sqrt[3]{\frac{m^* \Delta f(\gamma_0)}{a h^2}} N. \quad (39)$$

У наближенні ефективної маси фактор потужності кристала дорівнює:

$$P = 1,929 \cdot 10^{-2} k^2 f^7(\gamma_0) \frac{m^* a^2 \Delta^{10}}{h^3 (\mu^* B)^6 (kT)^3 \gamma_{0em}} \times \sqrt[3]{\frac{m^* \Delta f(\gamma_0)}{a h^2}} N. \quad (40)$$

Отже, при зумовлених вище параметрах задачі і $B = 60$ Тл отримуємо $P = 3,780 \cdot 10^{-11}$ Вт/(м·К²) для реального шаруватого кристала і $P = 3,635 \times 10^{-11}$ Вт/(м·К²) у наближенні ефективної маси. Таким чином, ми отримуємо зниження фактора потужності на 6 порядків порівняно з максимальним значенням. Отже, хоча отриманий асимптотичний закон $P \propto B^{-6} T^{-3}$ дещо важко зрозуміти, оскільки фактор потужності не прямує до нуля при $T = 0$, що на перший погляд суперечить загальним термодинамічним принципам, за реальних низьких температур до некоректних фізичних наслідків такий закон не приводить.

Зауважимо, що якщо при обчисленні фактора потужності при низьких температурах поблизу ультраквантової границі ми будемо використовувати той же підхід, що і при обчисленні поздовжньої провідності в роботах [12, 16], то вийде, що термоелектричний коефіцієнт, а разом з ним і фактор потужності, тотожно дорівнюють нулеві, оскільки сума під знаком похідної в чисельнику формули (3) в рамках цього підходу не залежить від температури. Таким чином, цей підхід все одно вимагає розрахунку термоелектричного коефіцієнта в наступному наближенні за малими параметрами kT/ζ_0 , kT/Δ та kT/μ^*B , що не є предметом даної статті.

3. Висновки

Таким чином, в статті показано, що ефекти шаруватості при замкнених поверхнях Фермі у слабких квантуючих магнітних полях можуть виражатись у відставанні осциляцій фактора потужності

за фазою, збільшенні відносного внеску осциляцій і одночасному зменшенні величини фактора потужності. Однак при більш сильних магнітних полях, а саме в точці останнього осциляційного максимуму хімічного потенціалу системи носіїв заряду, фактор потужності досягає максимуму. Ефекти шаруватості в сильних магнітних полях поблизу ультраквантової границі виражаються у більш різкій вираженості осциляцій, зменшенні максимальної величини фактора потужності, розмитті піка залежності фактора потужності від магнітного поля і більш повільному спаді фактора потужності після максимуму.

У слабких квантуючих магнітних полях фактор потужності прямує до нуля у відповідності із законом $P \propto B^3$. У сильних же магнітних полях поблизу ультраквантової границі він прямує до нуля у відповідності із законом $P \propto T^{-3} B^{-6}$. Величина ж максимуму фактора потужності в достатньо досконалих зразках з відношенням $l/a \geq 30000$ може бути порівнянною з параметрами найкращих купратних термоелектричних матеріалів при 1000 К.

Зрозуміло, що всі результати даної статті потребують експериментальної перевірки, але поки що усі відомі її авторів експерименти стосуються гальваномагнітних ефектів у шаруватих кристалах з сильно відкритими ПФ в області застосовності квазікласичного наближення. Одним з небагатьох винятків є давня робота, яка стосувалась ефекту Шубнікова–де-Гааза у графіті, інтеркальованому бромом, і в якій якраз розглядався топологічний перехід від відкритої ПФ до замкненої при збільшенні концентрації бромової [17].

Попри те, що авторів доволі важко судити про безпосереднє практичне застосування результатів даного теоретичного дослідження, він сподівається, що це дослідження стимулюватиме постановку нових експериментів по вивченню термоелектричних та термомагнітних явищ у шаруватих кристалах, в тому числі із замкненими ПФ. Останнє, на думку автора, може бути важливим при розробці нових термоелектричних матеріалів.

1. М.М. Гаджиалиев, З.Ш. Пирмагомедов, ФТП **43**, 1032 (2009).
2. Ф.Ф. Алиев, ФТП **37**, 1082 (2003).
3. В.А. Кульбачинский, В.Г. Кытин, В.Д. Бланк, С.Г. Буга, М.Ю. Попов, ФТП **45**, 1241 (2011).
4. Л.Н. Лукьянова, В.А. Кутасов, В.В. Попов, П.П. Константинов, ФТТ **46**, 1366 (2004).

5. А.И. Шельх, Б.И. Смирнов, Т.С. Орлова, И.А. Смирнов, A.R. de Arellano-Lopez, J. Martinez-Fernandes, F.M. Varela-Feria, ФТТ **48**, 214 (2006).
6. N.M. Gabor, J.C.W. Song, Q. Ma, N.L. Nair, T. Taychatanapat, K. Watanabe, T. Taniguchi, L.S. Levitov, and P. Jarilo-Herrero, Science **334**, 648 (2011).
7. Д.А. Пшенай-Северин, М.И. Федоров, ФТТ **49**, 1559 (2007).
8. Y.S. Liu, X.K. Hong, J.F. Feng, and X.F. Yang, Nanoscale Res. Lett. **6**, 618 (2011).
9. А.М. Косевич, В.В. Андреев, ЖЭТФ **38**, 882 (1960).
10. V.P. Gusynin and S.G. Sharapov, Phys. Rev. B **71**, 125124 (2005).
11. M. Müller, L. Frits, and S. Sachdev, arXiv: 0805. 1413v2 [cond-mat.str-el] (2008).
12. П.В. Горський, УФЖ **55**, 1297 (2010).
13. П.В. Горський, ФТП **45**, 928 (2011).
14. В.Л. Матухин, И.Х. Хабибуллин, Д.А. Шульгин, С.В. Шмидт, Е.И. Теруков, ФТП **46**, 1126 (2012).
15. Д. Шенберг, *Магнитные осцилляции в металлах* (Мир, Москва, 1986).
16. B. Laikhtman and D. Menashe, Phys. Rev. B **52**, 8974 (1994).
17. A.S. Bender and D.A. Young, Phys. Status. Solidi B **47**, K95 (1974).

Одержано 03.06.12

П.В. Горський

ФАКТОР МОЩНОСТИ
СЛОИСТОГО ТЕРМОЭЛЕКТРИЧЕСКОГО
МАТЕРИАЛА С ЗАМКНУТОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ
ФЕРМИ В КВАНТУЮЩЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Резюме

В статье исследована полевая зависимость фактора мощности слоистого термоэлектрического материала с замкнутой поверхностью Ферми в квантующем магнитном поле при гелиевых температурах для случая, когда магнитное поле и градиент температуры перпендикулярны слоям. Расчеты проведены в приближении постоянного времени релаксации. В слабых магнитных полях эффекты слоистости выражаются в отставании осцилляций фактора мощности по фазе, увеличении их относительного вклада и в уменьшении значения фактора мощности в целом. В области сильных магнитных полей существует оптимальный диапазон, в котором фактор мощности резко возрастает и достигает максимума, абсолютная величина которого при выбранных параметрах задачи в приближении эффективной массы на 12% больше, чем для реального слоистого кристалла. Невзирая на низкие температуры, при этих параметрах максимум фактора мощности достигает значений, характерных для купратных термоэлектрических материалов при 1000 К. Это происходит в полях порядка 1 Тл при условии, что отношение длины свободного пробега носителей заряда к расстоянию между слоями равно 30000 и более. Однако в ультраквантовых полях фактор мощности резко снижается.

ется по закону $P \propto T^{-3}B^{-6}$. Основной причиной такого снижения является сжатие ПФ в направлении магнитного поля в ультраквантовом пределе вследствие конденсации носителей заряда на дне единственной заполненной подзоны Ландау.

P. V. Gorskyi

POWER FACTOR FOR LAYERED
THERMOELECTRIC MATERIALS WITH A CLOSED
FERMI SURFACE IN A QUANTIZING MAGNETIC FIELD

S u m m a r y

The field dependence of the power factor for a layered thermoelectric material with a closed Fermi surface in a quantizing magnetic field and at helium temperatures has been studied in the geometry where the temperature gradient and the magnetic field are perpendicular to the material layers. The calculations are carried out in the constant relaxation time approximation. In weak magnetic fields, the layered-structure effects are shown

to manifest themselves in a phase retardation of power factor oscillations, increase of their relative contribution, and certain reduction of the power factor in whole. In high magnetic fields, there exists an optimal range, where the power factor reaches its maximum, with the corresponding value calculated for the chosen parameters of the problem in the effective mass approximation being by 12% higher than that for real layered crystals. Despite low temperatures, the power factor maximum obtained with those parameters in a magnetic field of 1 T has a value characteristic of cuprate thermoelectric materials at 1000 K. For this phenomenon to take place, it is necessary that the ratio between the free path of charge carriers and the interlayer distance should be equal to or larger than 30,000. However, in ultraquantum magnetic fields, the power factor drastically decreases following the dependence $P \propto T^{-3}B^{-6}$. The main reason for this reduction is a squeeze of the Fermi surface along the magnetic field in the ultraquantum limit owing to the condensation of charge carriers on the bottom of a single filled Landau subband.