



Горский П.В.

ВЛИЯНИЕ ЗАРЯДОВОГО УПОРЯДОЧЕНИЯ НА ТЕРМОЭДС СЛОИСТЫХ КРИСТАЛЛОВ В КВАНТУЮЩЕМ МАГНИТНОМ ПОЛЕ

Горский П.В.

(Институт термоэлектричества, ул. Науки, 1,
Черновцы, 58029, Украина)

-
- Рассмотрено влияние межслоевого зарядового упорядочения на термоЭДС слоистых кристаллов в квантующем магнитном поле при гелиевых температурах для случая, когда градиент температуры и квантующее магнитное поле параллельны друг другу и перпендикулярны к слоям. Расчеты выполнены на основе кинетического уравнения Больцмана в приближении постоянного времени релаксации. Показано, что в квазиклассической области магнитных полей зарядовое упорядочение ведет к многократной инверсии знака, появления новых частот осцилляции термоЭДС и росту их амплитуды при выбранных параметрах задачи в 5.9–13.5 раза по сравнению с неупорядоченными по состоянию, что обусловлено преобразованием поверхности Ферми (ПФ) кристалла при фазовом переходе из замкнутой или переходной в открытую, связанном с зарядовым упорядочением. В сильных магнитных полях зарядовое упорядочение ведет к многократному переключению полярности термоЭДС при изменении магнитного поля. При выбранных параметрах задачи максимум величины термоЭДС возрастает в 7.6–18.4 раза по сравнению с неупорядоченными по состоянию. Однако в ультраквантовой границе величина термоЭДС резко снижается по закону $\alpha \propto T^{-1}B^{-2}$, что обусловлено сжатием ПФ кристалла вследствие конденсации носителей заряда на дне единственной заполненной подзоны Ландау с номером $n = 0$.

Введение

Сегодня ведется как радикальное усовершенствование традиционных, так и интенсивный поиск новых термоэлектрических материалов. Такому традиционному термоэлектрическому материалу, как Bi_2Te_3 и другим материалам на его основе, а также разным аспектам использования их в термоэлектрических генераторах, охладителях и измерительных приборах посвящены основательные монографии [1, 2]. Кроме этих материалов объектами исследований являются металлы, сплавы, полупроводники [3, 4], фуллерены [5], композиты [6], в том числе биоморфные [7], и др. Перспективным термоэлектрическим материалом, является графен [8]. Свообразный фототермоэлектрический эффект наблюдаемый в нем, который раньше считался сугубо фотовольтаическим, позволяет рассматривать графен как материал для солнечных элементов с высоким коэффициентом полезного действия. Широко разрабатывается теория термоэлектрических свойств наносистем [9, 10]. Так, одну из первых работ, посвященную, в том числе, теории поперечных термоэлектрических коэффициентов металлов в квантующем магнитном поле, было опубликовано А.М. Косевичем и В.В. Андреевым [11].

Большое число исследуемых материалов, например полупроводниковые системы класса $A^{III}B^{VI}C^{VII}$, интеркалированные соединения графита, синтетические металлы на основе органических соединений, графен и др. по своей кристаллической структуре принадлежат к слоистым. В то же время в подавляющем большинстве теоретических работ, посвященных поведению таких слоистых систем в квантующих магнитных полях, изучаются в основном

поперечные гальваномагнитные эффекты. Теплопроводность графена при наличии магнитного поля, в том числе и квантующего, его проводимость при постоянном и переменном токе, квантовый эффект Холла в нем рассматривались в работах [12, 13]. При этом поверхность Ферми считалась открытой, которая занимает всю одномерную зону Бриллюэна и при периодическом продолжении окажется связанной, то есть представляет собой сплошной гофрированный цилиндр. В основном эти работы были посвящены исследованию поведения носителей заряда в плоскости слоев. Поэтому для описания зонной структуры графена эффективной оказалась концепция «безмассового нейтрино» с линейной зависимостью энергии от квазиимпульса в плоскости слоев. В этом случае уровни энергии в квантующем магнитном поле определялись методом эффективного гамильтониана.

Во многих случаях в слоистых кристаллах наблюдается межслоевое зарядовое упорядочение. К таким кристаллам принадлежат фуллерены [14], диалкогениды переходных металлов [15], синтетические металлы на основе органических соединений, и т.п. В то же время термоэлектрические свойства таких материалов, в том числе в зарядово-упорядоченном состоянии, до сих пор детально не изучались. В связи с этим целью данной работы является теоретическое исследование влияния зарядового упорядочения на термоЭДС слоистых кристаллов в квантующем магнитном поле при низких температурах для случая, когда градиент температуры и квантующее магнитное поле параллельны между собой и перпендикулярны к плоскости слоев.

Определение зависимостей химического потенциала электронного газа и параметра зарядового упорядочения от магнитного поля

Для расчетов зависимости термоЭДС от квантующего магнитного поля необходимо знать полевые зависимости химического потенциала электронного газа и параметра упорядочения от квантующего магнитного поля. Заметим, что в данной статье мы рассматриваем межслоевое зарядовое упорядочение как чередование слоев с разной электрической плотностью. Поэтому поверхностная плотность электронов на i -ом слое определяется формулой:

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

В этой формуле n_0 – средняя объемная концентрация носителей тока, a – расстояние между трансляционно эквивалентными слоями, δ – параметр порядка, который описывает неравномерность распределения электронов по слоям, причем $\delta = 0$ соответствует отсутствию упорядочения, а $\delta = 1$ – полному упорядочению.

Энергетический спектр носителей заряда в квантующем магнитном поле, перпендикулярном к слоям, определяется следующим образом [16]:

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

В этой формуле n – номер уровня Ландау, $\mu^* = \mu_{Bm0}/m^*$, μ_B – магнетон Бора, m^* – эффективная масса электрона в плоскости слоев, B – индукция магнитного поля, Δ – начальная полуширина мини-зоны, которая описывает движение носителей заряда перпендикулярно к слоям, W_0 – эффективное притяжение между электронами, которое приводит к зарядовому упорядочению и обусловлено конкуренцией электрон-фононного взаимодействия и кулоновского отталкивания, $x = ak_z$, k_z – составляющая квазиимпульса в направлении, перпендикулярном к слоям.

При учете энергетического спектра (2) химический потенциал системы носителей заряда и параметр упорядочения при низких температурах определяются из такой системы уравнений [16]:

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

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

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

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

В этих уравнениях $R = \sqrt{W_0 \delta^2 + \Delta^2 \cos^2 x}$, $\zeta_0 = n_0 a h^2 / 4\pi m^*$ – энергия Ферми идеального двумерного Ферми-газа при абсолютном нуле температуры.

Из уравнения (4) следует, что всегда существует тривиальное решение $\delta \equiv 0$, которое соответствует отсутствию упорядочения. Однако при $W_0 / \zeta_0 > 1$ существует также нетривиальное решение $\delta > 0$, которое соответствует упорядоченному состоянию. Условие $W_0 / \zeta_0 > 1$ означает, что для существования упорядоченного состояния электрон-фононное взаимодействие должно не просто преобладать над кулоновским, но должно быть больше, чем максимальная кинетическая энергия носителей заряда в плоскости слоев при заданной их концентрации. Причина этого заключается в увеличении кинетической энергии электронов в плоскости слоев при переходе в упорядоченное состояние.

Результаты решения системы уравнений (4) и (5) изображены на рис. 1 и 2.

Из рисунка 1 видно, что зарядовое упорядочение снижает химический потенциал системы носителей заряда и является энергетически выгодным. Заметим, что химический потенциал отсчитывается от середины псевдо-щели между мини-зонами в упорядоченном состоянии, которому соответствует середина исходной мини-зоны в неупорядоченном состоянии.

Переход в зарядово-упорядоченное состояние является фазовым переходом второго рода и в случае, когда поверхность Ферми (ПФ) кристалла в неупорядоченном состоянии является запертой, или переходной, то есть когда при $B = 0$ выполняется условие $-1 < \zeta / \Delta \leq 1$, проявляет себя как топологический переход от замкнутой поверхности к открытой. Топологический переход – это переход, при котором ПФ из меняет связанность, превращаясь из замкнутой в открытую или наоборот. Напомним, что открытая поверхность – это такая поверхность, которая занимает всю одномерную (по k_z) зону Бриллюэна (ОЗБ), проявляясь связной при периодическом продолжении. Замкнутая поверхность – это такая поверхность, которая занимает лишь часть ОЗБ и при периодическом продолжении окажется состоящей из отдельных частей. Из рисунка также видно, что сначала химический потенциал во всех случаях является осциллирующей функцией магнитного поля. В то же время, после последнего осцилляционного максимума в упорядоченном состоянии химический потенциал изменяется почти прыжком. На самом деле, правда, этот прыжок незначительно «размазывается» из-за фактора Дингла, обусловленного рассеянием носителей тока на примесях и дефектах кристаллической решетки [17], но мы будем считать этот фактор близким к единице. Это можно делать, если $l/a \gg 1$, где l – длина свободного пробега при рассеянии носителей заряда на ионизированных примесях. Упомянутый прыжок свидетельствует об обратном топологическом переходе от открытой ПФ к замкнутой. Нужно, однако, заметить, что в

строгом понимании слова ПФ кристалла при $B \neq 0$ неопределенная, поэтому о ней говорят условно, представляя ее как совокупность полых соосных цилиндров, так называемых магнитных трубок, или «трубок Ландау», оси которых параллельны к направлению магнитного поля. В этом случае ПФ считается открытой, если найдется хотя бы одна магнитная трубка, длина которой равняется длине ОЗБ и замкнутой в противном случае. После последнего осцилляционного минимума во всех случаях зависимость химического потенциала от магнитного поля становится практически линейной. Эта зависимость обусловлена тем, что при сильных магнитных полях химический потенциал зависит от магнитного поля так [16]:

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

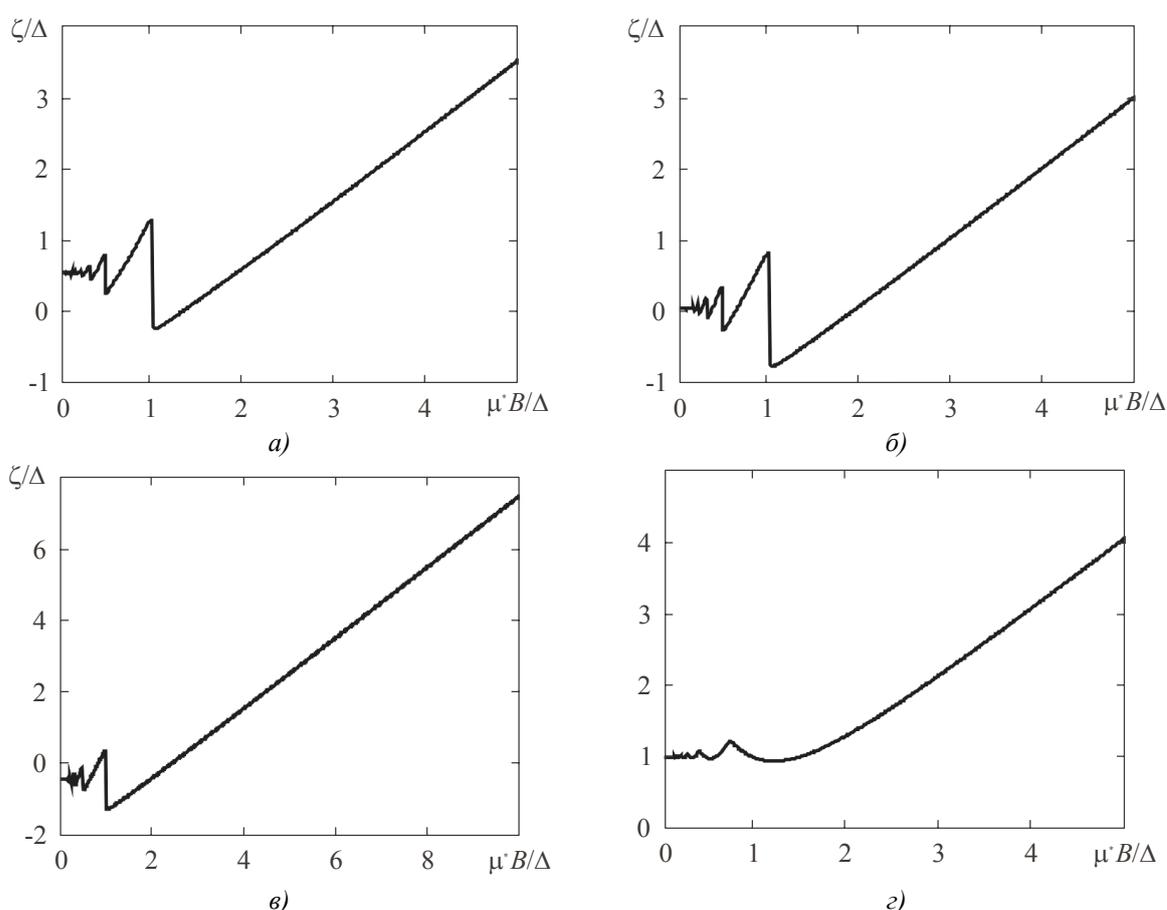


Рис. 1. Полевая зависимость химического потенциала газа носителей заряда при $\zeta_0/\Delta = 1$, $kT/\Delta = 0.03$ и: $W_0/\zeta_0 = 1.5$ (а), 2 (б), 2.5 (в) и $\delta \equiv 0$ (г).

При выводе формулы (5) учтено, что ПФ в ультраквантовой границе, то есть в условиях конденсации носителей заряда на дне единой наиболее низкой подзоны Ландау, состоит из трех частей. Одна из них представляет собой сплошную магнитную трубку с плоскостью симметрии $k_z = 0$, которая суживается в обе стороны от этой плоскости. Две другие части являются половинами этой трубки и начинаясь от плоскостей $k_z = \pm\pi/a$ постепенно суживаются вглубь ОЗБ. Таким образом, мы в действительности имеем дело с обратным переходом от открытой ПФ к замкнутой в сильном магнитном поле. Как следует из формулы (5), на линейном участке полевой зависимости химического потенциала части ПФ, которая соответствует единой заполненной

подзоны Ландау с номером $n = 0$, постепенно сжимаются в направлении магнитного поля и это сжатие обязательно должно учитываться в процессе расчетов термоЭДС.

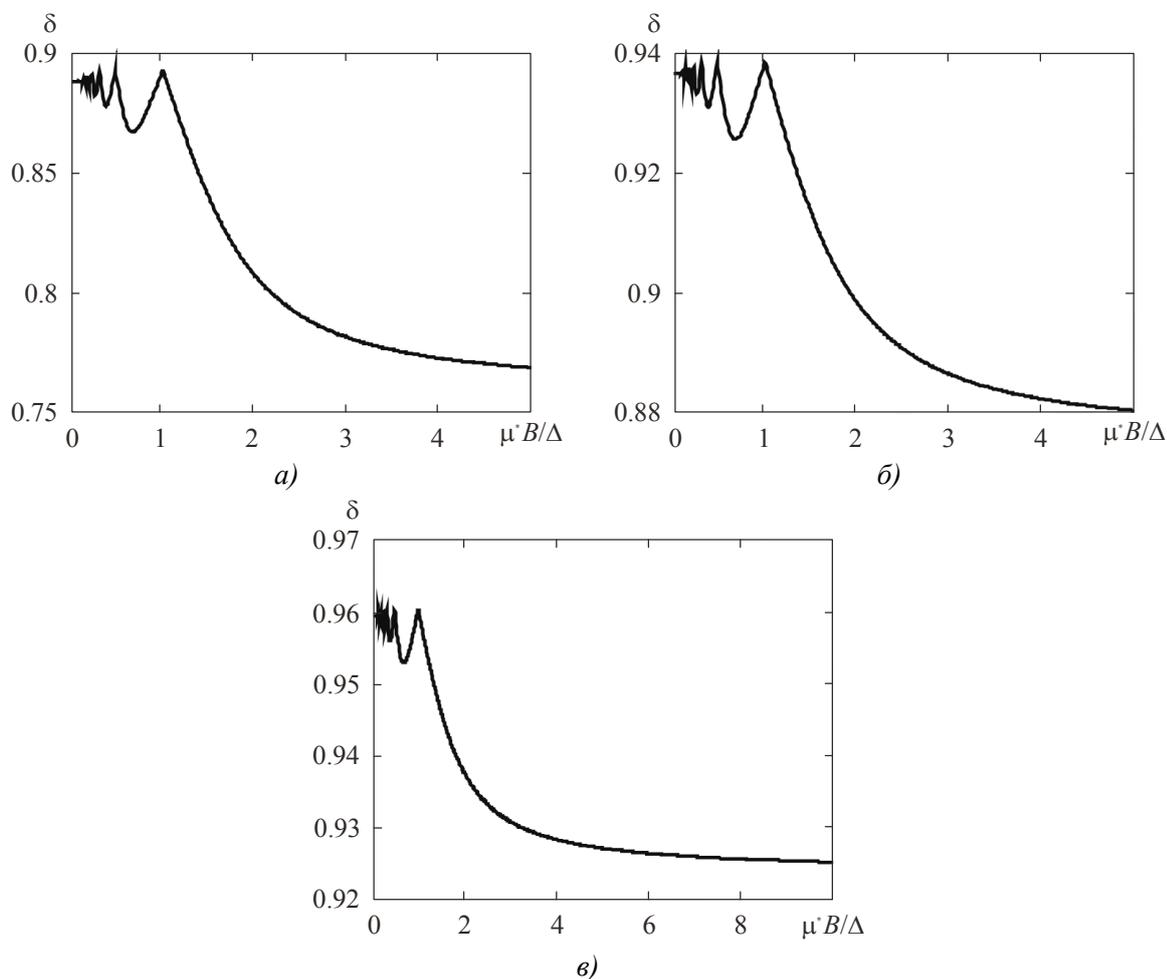


Рис. 2. Полевая зависимость параметра упорядочения при $\zeta_0/\Delta = 1$, $kT/\Delta = 0.03$ и: $W_0/\zeta_0 = 1.5$ (а), 2 (б), 2.5 (в).

Из рис. 2 видно, что параметр порядка также является осциллирующей функцией магнитного поля, и его величина в целом является тем больше, чем больше величина эффективного притяжения W_0 . В точке топологического перехода параметр порядка имеет локальный осцилляционный максимум. После точки топологического перехода зарядовое упорядочение разрушается, хотя и очень медленно. Это разрушение можно объяснить тем, что кинетическая энергия носителей заряда в плоскости слоев при наличии уровней Ландау больше, чем при отсутствии этих уровней. Последнее, если исходить из термодинамических соображений, должно противодействовать зарядовому упорядочению. Но даже при $B = 0$ зарядовое упорядочение не является полным, то есть $\delta < 1$. Это происходит потому, что при $\Delta \neq 0$ междуслоевое движение носителей заряда пытается сгладить неравномерность их распределения по слоям.

Расчеты полевой зависимости термоЭДС и обсуждение результатов

При расчете термоЭДС будем исходить из кинетического уравнения Больцмана. Его применение ведет к такой общей формуле для продольной компоненты термоЭДС:

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

В этой формуле e – модуль заряда электрона, $\beta \equiv (n, x)$, τ_{β} – время релаксации, $v_{z\beta}$ – продольная скорость носителей заряда, $f^0(\varepsilon_{\beta})$ – функция распределения Ферми-Дирака. Суммирование по номерам уровней Ландау в этой формуле можно выполнить до конца в том случае, когда время релаксации зависит лишь от x . Следует заметить, что более точные результаты в этой ситуации дает применение формализма Куба [18], но в случае выполнения условия $\omega_c \tau \gg 1$ подход, который базируется на формализме Куба, эквивалентный подходу, который базируется на уравнении Больцмана. Такая эквивалентность обусловлена тем, что при $\omega_c \tau \gg 1$ расширение уровней Ландау можно прямо связать со временем релаксации, а обусловленным рассеянием сдвигом энергетических уровней пренебречь. Кроме того, будем считать $l/a \gg 1$ и $h/\tau\Delta \gg 1$, что соответствует чистому и совершенному слоистому кристаллу.

Для простоты мы будем считать время релаксации постоянным. Учитывая, что при низких (гелиевых) температур доминирующим механизмом рассеяние носителей заряда является рассеяния на потенциале хаотически расположенных заряженных примесей, такое приближение является корректным для открытой ПФ, хотя и немного грубым для замкнутой ПФ.

Вычисление термоЭДС по формуле (6) при учете закона дисперсии (2) дает следующее выражение:

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

В этой формуле $\alpha_0 = k/e$, а безразмерные коэффициенты A, B, C определяются так:

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

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

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

В этих формулах $\gamma = \zeta/\Delta$, $b = \mu^* B/\Delta$, $w = W_0/\Delta$. Кроме того:

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

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

Если $\gamma - b \geq -w\delta$, то нижняя граница интегрирования в формулах (8) – (10) должны быть заменены на $w\delta$. Заметим также, что причиной вычитания b из γ являются физические

обстоятельства, указанные в разделе 2.

Результаты расчетов термоЭДС в слабых квантующих магнитных полях приведены на рис. 3.

Прежде всего, из рисунка 3 видно, что в упорядоченном состоянии осцилляции термоэлектрического коэффициента являются бипериодическими, в то время, как в неупорядоченных состояниях они являются монопериодическими. Причина этого отличия заключается в том, что в неупорядоченном состоянии ПФ зарядово-упорядоченного слоистого кристалла в пределах ОЗБ имеет пять экстремальных сечений плоскостями, перпендикулярными к направлению магнитного поля: три одинаковых максимальных плоскостей $k_z = 0$ и $k_z = \pm\pi/a$ и два минимальных плоскостями $k_z = \pm\pi/2a$. Частоты, которые соответствуют этим сечениям, соответственно равны:

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

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

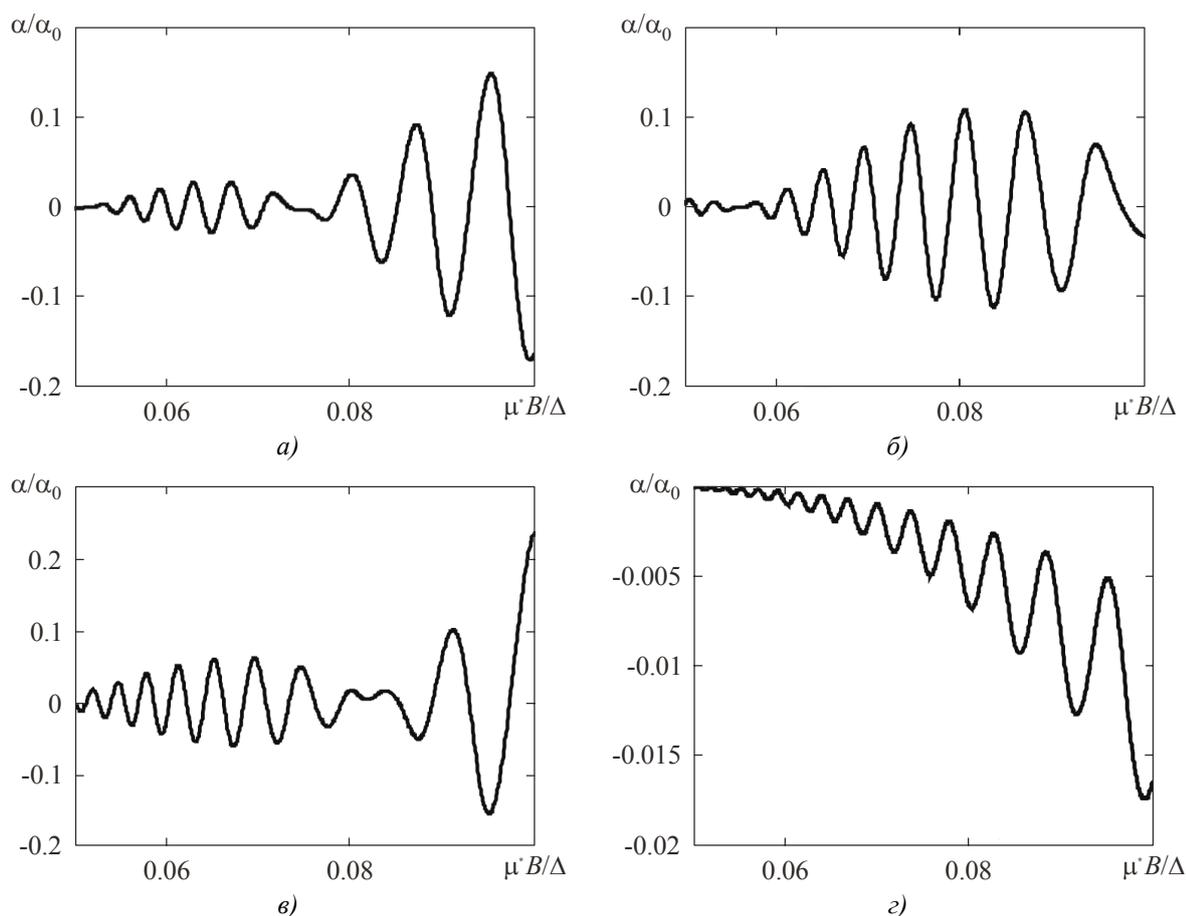


Рис. 3. Полевая зависимость термоЭДС в интервале магнитных полей $0.04 \leq \mu^* B / \Delta \leq 0.1$ при $\zeta_0 / \Delta = 1$, $kT / \Delta = 0.03$ и: $W_0 / \zeta_0 = 1.5$ (а), 2 (б), 2.5 (в), в неупорядоченном состоянии (з).

В зарядово-упорядоченном слоистом кристалле эти частоты близкие между собой, поэтому «несущие» высокие частоты определяются по формуле:

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

а низкие частоты биений по формуле:

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

где $\Delta^* = 0.5 \left(\sqrt{W_0^2 \delta^2 + \Delta^2} - W_0 \delta \right)$. При $\Delta = 0.01$ эВ и $m^* = 0.01 m_0$ и других параметрах, указанных на рис. 3, основные высокие «несущие» частоты на рис. 3 *а, б, в* соответственно равняются 10.168, 10.154 и 10.547 Тл. Низкие частоты биений равняются соответственно 0.905, 0.678 и 0.542 Тл. В неупорядоченном состоянии при выбранных параметрах задачи ПФ имеет лишь один экстремальный, а именно максимальный сечение плоскостью $k_z = 0$, поэтому основная высокая частота равна 10.837 Тл и модулирована лишь гладкой компонентой, которая не может быть учтена в рамках традиционных подходов, для которых в квазиклассическом приближении конкретная форма ПФ и ее протяженность вдоль направления магнитного поля не существенна.

Из рисунка 3 также видно, что зарядовое упорядочение ведет к росту термоЭДС. Максимальные значения величины термоэлектрического коэффициента на рис. 3 *а, б, в* равны 12.9, 8.63 и 19.8 мкВ/К соответственно. В то же время в неупорядоченном состоянии (рис. 3 *з*) максимальная величина термоЭДС не превышает 1.47 мкВ/К. Таким образом, в квазиклассическом интервале магнитных полей при выбранных параметрах задачи переход в зарядово-упорядоченное состояние повышает термоЭДС в 5.9 – 13.5 разы. Кроме того в зарядово-упорядоченном состоянии в квазиклассическом интервале магнитных полей имеет место переключения полярности термоЭДС, в то время, как в неупорядоченном состоянии осцилляции происходят без переключения полярности и термоЭДС остается чисто отрицательной, то есть «электронной». В рамках принятой модели времени релаксации это переключения можно объяснить лишь переходом от запертой ПФ к открытой при зарядовом упорядочении.

Результаты расчетов термоЭДС в широком интервале магнитных полей приведены на рис. 4.

Из рисунка 4 видно, что в упорядоченном состоянии плавные осцилляции термоЭДС постепенно сменяются последовательными переключениями полярности (рис. 4 *а, б, в*). Эти переключения синхронизированные с изменениями химического потенциала к области конденсации носителей заряда на дне подзоны Ландау с номером $n = 0$. При этом каждое резкое переключение из положительной полярности на отрицательную соответствует резкому скачку химического потенциала, а более плавное изменение из отрицательной полярности на положительную – участку плавного изменения химического потенциала. В точке топологического перехода происходит последнее переключение полярности и термоЭДС достигает максимума своей величины. Максимумы величины термоЭДС на рис. 4 *а, б, в* равны соответственно 890 мкВ/К, 2093 мкВ/К и 2147 мкВ/К. В то же время, в неупорядоченном состоянии (рис. 4 *з*) термоЭДС почти всюду остается отрицательной и в точке последнего осцилляционного максимума химического потенциала достигает максимальной величины, которая равняется 117 мкВ/К, то есть в 7.6 – 18.4 раза меньшего, чем в зарядово-упорядоченном состоянии.

Существование максимума величины термоЭДС в квантующем магнитном поле можно объяснить такими физическими соображениями. С одной стороны понятно, что при низких температурах в слабом магнитном поле термоЭДС должна стремиться к нулю в соответствии с

общими термодинамическими соотношениями. С другой стороны, она должна стремиться к нулю и в ультраквантовой границе вследствие сжимания ПФ. Но тождественно равняться нулю она не может. Итак, должно существовать значение индукции квантующего магнитного поля, при котором величина термоЭДС достигает максимума. В наших условиях это индукция находится в пределах от 0.86 до 1.73 Тл. Однако по мере дальнейшего возрастания магнитного поля величина термоЭДС начинает спадать к нулю резко в упорядоченном состоянии и более плавно в неупорядоченном состоянии. Более резкое уменьшение величины термоЭДС в упорядоченном состоянии объясняется сужением мини-зоны проводимости, которая описывает межслоевым движением носителей заряда.

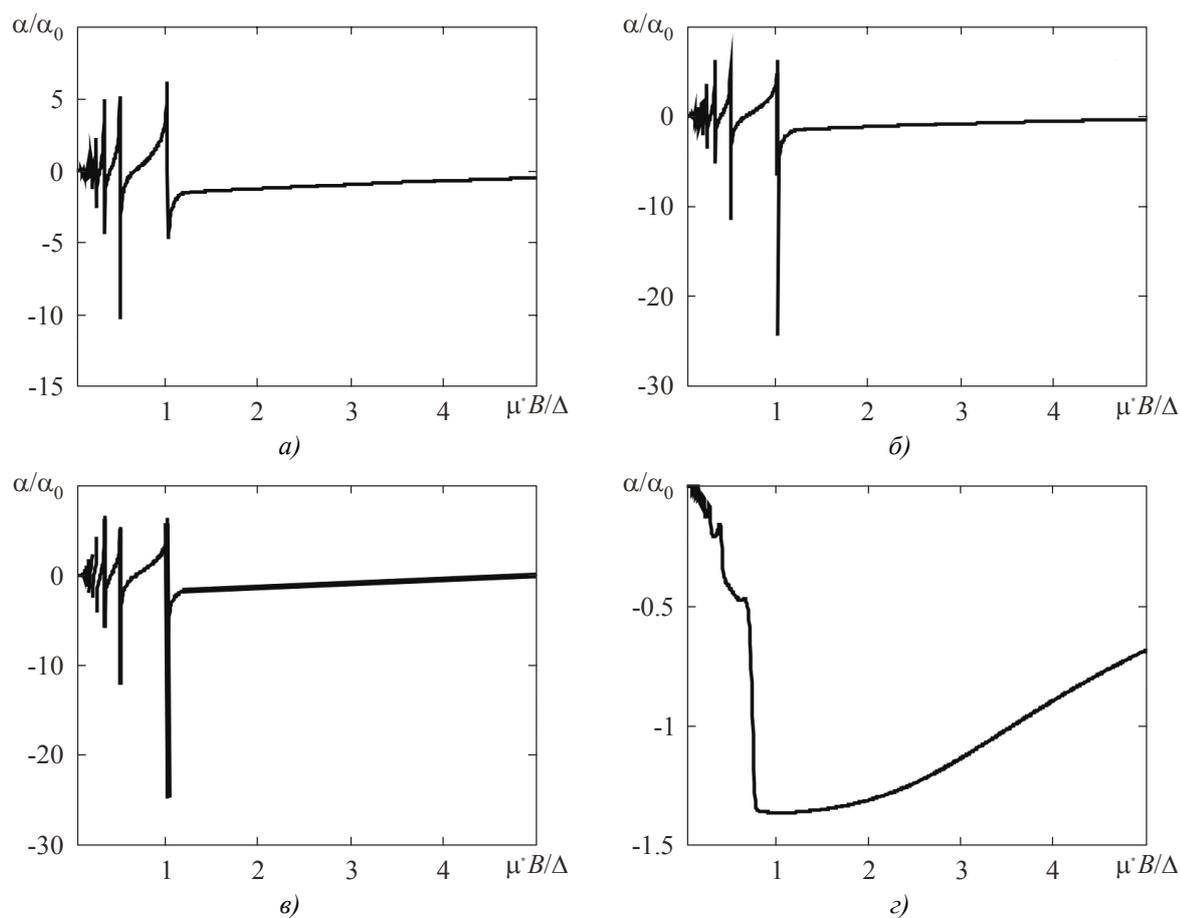


Рис. 4. Полевая зависимость термоЭДС в интервале магнитных полей $0.04 \leq \mu^*B/\Delta \leq 5$ при $\zeta_0/\Delta = 1$, $kT/\Delta = 0.03$ и: $W_0/\zeta_0 = 1.5$ (а), 2 (б), 2.5 (в), в неупорядоченном состоянии (г).

Напоследок установим асимптотический закон, в соответствии с которым происходит снижения термоЭДС к нулю в ультраквантовой границе. Для этого при $\zeta_0/\mu^*B \ll 1$ запишем соотношение (5) в таком виде:

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

При вычислении коэффициентов A, B, C в интегралах по y сделаем замену переменных $y = y_1 - \sqrt{w^2\delta^2 + 1}$. При этом учтем, что после подстановки (17) в выражения (8) – (10) в тригонометрических множителях $(-1)^l$ скомпенсируется, после чего косинусы можно заменить

единицами, а синусы – их аргументами. Величину f_i^{th} при $kT/\mu^*B \ll 1$ представим так:

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

Кроме того, учтем, что при малых η , как показывает численный анализ, справедливы такие соотношения:

$$\sum_{l=1}^{\infty} \frac{\eta l}{\operatorname{sh}(\eta l)} = \frac{2.467}{\eta}, \quad (19)$$

$$\sum_{l=1}^{\infty} \frac{\eta l^3}{\operatorname{sh}(\eta l)} = \frac{12.176}{\eta^3}. \quad (20)$$

Подинтегральные выражения в формулах (8)–(10) разложим в ряды по малому параметру v_1 и выполним интегрирование по нему в пределах от 0 до $\frac{\pi^2 \zeta_0^2}{32(\mu^* B)^2 \sqrt{w^2 \delta^2 + 1}}$.

После выполнения всех операций и объединения числовых множителей в один получим такое окончательное выражение для термоЭДС зарядово-упорядоченного слоистого кристалла в ультраквантовой границе:

$$|\alpha| = 0.305 \alpha_0 \frac{\zeta_0^2 \Delta^2}{kT (\mu^* B)^2 \sqrt{W_0^2 \delta^2 + \Delta^2}}. \quad (21)$$

Такой закон на первый взгляд тяжело понять, поскольку в соответствии с ним термоЭДС не устремляется к нулю при $T = 0$. Однако при реально низких температурах к некорректным физическим результатам этот закон не ведет. На самом деле, например при $B = 60$ Тл и прежде обусловленных параметрах задачи, учитывая зависимость порядка от магнитного поля для значений W_0/ζ_0 равных 1.5, 2 и 2.5 соответственно, получим значение термоЭДС, на уровне 0.475, 0.358 и 0.287 мкВ/К соответственно, что на три порядка меньше максимальных значений термоЭДС. В неупорядоченном состоянии при $B = 60$ Тл термоЭДС составляет 0.725 мкВ/К, что в 162 раза меньше от максимального значения.

Следует заметить, что при использовании для вычисления термоЭДС в ультраквантовой границе того же подхода, что и в статье [19] для вычисления проводимости, получится, что она должна тождественно равняться нулю, поскольку зависимостью функции распределения от температуры в данном подходе пренебрегается, что фактически соответствует случаю $T = 0$. Таким образом, этот подход все равно требует вычисления термоЭДС в последующих приближениях по малым параметрам kT/Δ , kT/ζ_0 и kT/μ^*B .

Выводы

1. Показано, что зарядовое упорядочение ведет к появления бипериодической структуры осцилляций, возрастание амплитуды осцилляций и переключения полярности термоЭДС в слабых квантующих магнитных полях, что обусловлено переходом от замкнутой или переходной ПФ к открытой и сужением мини-зоны проводимости, которая описывает межслоевое движение носителей заряда при переходе в зарядово-упорядоченное состояние.
2. В сильных квантующих магнитных полях зарядовое упорядочение ведет к резкому

многократному переключению полярности термоЭДС и резкому увеличению ее максимальной величины по сравнению с термоЭДС в неупорядоченном состоянии.

3. После достижения максимума термоЭДС ее величина в обоих случаях резко снижается по закону $\alpha \propto T^{-1}B^{-2}$, что объясняется сжиманием ПФ кристалла в направлении магнитного поля в ультраквантовой границе. В зарядово-упорядоченном состоянии термоЭДС снижается более стремительно, что объясняется сужением мини-зоны, которая описывает межслоевое движение носителей заряда при зарядовом упорядочении и медленным разрушением зарядового упорядочения в магнитном поле.

Понятно, что все полученные в статье результаты нуждаются в экспериментальной проверке, но пока что все известные ее автору эксперименты касаются исключительно исследований эффекта Шубникова-де-Гааза в слоистых кристаллах с сильно открытыми ПФ в области применимости квазиклассического приближения.

Автор также осознает, что после прочтения данной статьи у читателя может возникнуть вопрос: какое практическое применение, тем более в термоэлектричестве, могут иметь полученные результаты? Никакого, если говорить о термоэлектрических генераторах или охладителях, но очень существенное, если говорить о термоэлектрических явлениях как измерительных средствах для исследования других характеристик материалов. Традиционно совсем до недавнего времени зонная структура материалов и механизмы рассеяния носителей заряда в них изучались исключительно с помощью эффектов Альфена-де-Гааза и Шубникова-де-Гааза. Однако выделить осцилляции Альфена-де-Гааза и Шубникова-де-Гааза из общей магнитной восприимчивости и, тем более, проводимости, сложно. В то же время осцилляции термоЭДС наблюдаются непосредственно. Итак, их исследование при низких температурах можно рассматривать как дополнительное средство изучения зонной структуры материалов, в том числе термоэлектрических, и механизмов рассеяния носителей заряда в них.

Литература

1. Anatyshuk L.I. Thermoelectricity. Vol.1. Physics of Thermoelectricity. – Kyiv-Chernivtsi, ITE, 1998, 376p.
2. Anatyshuk L.I. Thermoelectricity. Vol.2. Thermoelectric Energy Converters. – Kyiv-Chernivtsi, ITE, 2005, 398p.
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. – 1032с.
4. Алиев Ф.Ф. Электрические и термоэлектрические свойства $p\text{-Ag}_2\text{Te}$ в β -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 $p\text{-Bi}_{2-x}\text{Sb}_x\text{Te}_{3-y}\text{Se}_y$ / Л.Н. Лукьянова, В.А. Кутасов, В.В. Попов [и др.] // ФТТ. – 2004. – 46. – 1366 с.
7. Шельх А.И., Смирнов Б.И., Орлова Т.С., Смирнов И.А., de Arellano-Lopez A.R., Martinez-Fernandes J., Varela-Feria F.M. Электрические и термоэлектрические свойства биоморфного композита SiC/Si при высоких температурах. ФТТ, 48, 2006, 214.
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. Пшенай-Северин Д.А. Влияние особенностей зонной структуры на термоэлектрические свойства полупроводника / Д.А. Пшенай-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, S. Sachdev. Quantum critical relativistic magnetotransport in graphene. arXiv: 0805. 1413v2 [cond-mat.str-e1] (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.Commun.*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 металах / 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.

Поступила в редакцию 22.10.2012.