

Дифференциальная термоэдс сверхрешетки в сильном электрическом поле

© А.С. Булыгин, Г.М. Шмелев, И.И. Маглеванный

Волгоградский государственный педагогический университет,
400013 Волгоград, Россия

(Поступила в Редакцию 20 августа 1998 г.)

В рамках квазиклассического приближения исследовано влияние электрического поля на дифференциальную термоэдс одномерной сверхрешетки $\alpha(E)$. Установлена немонотонная зависимость $\alpha(0)$ от температуры для вырожденного электронного газа. Показана принципиальная возможность управления термоэлектрическими свойствами сверхрешеток электрическим полем.

Расчету термоэдс электронного газа с косинусоидальным законом дисперсии посвящено немало публикаций, среди которых отметим работы [1–4] (см. также [5] и приведенную там литературу). Обратим внимание и на недавнюю экспериментальную работу [6], содержащую в том числе обзор исследований термоэдс в низкоразмерных структурах. В [1–4,6] и других работах термоэдс изучалась в режиме слабого электрического поля \mathbf{E} , когда α не зависит от \mathbf{E} . С практической точки зрения могут представить интерес и свойства указанных структур в сильных полях, в которых проявляются нелинейные эффекты и соответственно возникает возможность с помощью полей управлять добротностью материала. В [5] исследовано влияние переменного и постоянного электрических полей на термоэдс одномерной сверхрешетки (СР). Результаты [5] справедливы для невырожденного электронного газа и не слишком сильных полей, когда параметр $eEd\tau/\hbar T \leq 1$, здесь d — период СР, 2Δ — ширина минизоны, τ — время релаксации, T — температура в энергетических единицах. В данной работе используется метод расчета α , свободный от указанных ограничений.

В одноминзонном приближении энергия электрона в одномерной СР имеет вид

$$\varepsilon(\mathbf{p}) = \frac{p_{\perp}^2}{2m} + \Delta \left(1 - \cos \frac{p_x d}{\hbar} \right), \quad (1)$$

где p_{\perp} и p_x — перпендикулярная и параллельная оси СР компоненты квазиимпульса p соответственно, m — масса носителя в плоскости слоев СР. Предполагаем, что \mathbf{E} и ∇T ($T = T(x)$ — локальная температура) направлены вдоль оси СР (Ox). В рамках квазиклассического приближения ($2\Delta \gg \hbar/\tau$, eEd , $d\nabla_x T$) функция распределения электронов $f(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ находится из кинетического уравнения Больцмана. Интеграл столкновений выбираем в τ -приближении, причем считаем, что $\tau = \text{const}$. Наиболее убедительным аргументом в пользу этого условия являются результаты работы [7], в которой экспериментально установлено, что в СР GaAs/AlAs выше температуры 40 К время релаксации $\tau = \text{const}$ и не зависит от температуры.

Запишем кинетическое уравнение в виде

$$\hat{L}_p f + \text{div}(\mathbf{v}f) = \frac{f_0(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\tau}, \quad (2)$$

здесь оператор

$$\hat{L}_p = \left(\frac{d\mathbf{p}}{dt}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right) + \frac{1}{\tau}, \quad (3)$$

$f_0(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ — функция распределения Ферми с изменяющимися в пространстве температурой и химическим потенциалом μ , $\mathbf{v}(\mathbf{p}) = \partial \varepsilon(\mathbf{p}) / \partial \mathbf{p}$ — скорость электрона.

Решение уравнения (2) должно удовлетворять условию

$$\sum_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = n(\mathbf{r}), \quad (4)$$

где $n(\mathbf{r})$ — концентрация электронов. Плотность тока вычисляется по формуле

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = e \sum_{\mathbf{p}} \mathbf{v}(\mathbf{p}) f(\mathbf{p}, \mathbf{r}), \quad (5)$$

причем в стационарном режиме должно быть

$$\text{div} \mathbf{j}(\mathbf{r}) = 0. \quad (6)$$

Второе слагаемое в левой части (2) считаем малым, тогда в нулевом приближении решение уравнения (2) имеет вид

$$f^{(0)}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \hat{L}_p^{-1} \left(\frac{f_0(\mathbf{p}, \mathbf{r})}{\tau} \right), \quad (7)$$

где обратный оператор \hat{L}_p^{-1} определяется равенством

$$\hat{L}_{\pm \mathbf{p}}^{-1} \psi(\mathbf{p}) = \int_0^{\infty} \psi(\mathbf{p} \mp \mathbf{p}(t)) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) dt, \quad (8)$$

здесь $\mathbf{p}(t)$ есть решение уравнения движения

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F} \quad (9)$$

с начальным условием $\mathbf{p}(0) = 0$, \mathbf{F} — действующая на частицу постоянная сила, далее $\mathbf{F} = e\mathbf{E}$.

Чтобы корректно (не нарушая условия (4)) проводить итерационную процедуру при отыскании $f(\mathbf{p}, \mathbf{r})$ в виде ряда по степеням $\nabla_x T(\mathbf{r})$ или $\nabla_x n(\mathbf{r})$, в правую часть (2) добавляем равное нулю слагаемое $f^{(0)}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \operatorname{div} \mathbf{j} / en$. Аналогичный прием использовался при теоретическом исследовании неравновесных флуктуаций в электронном газе с параболическим законом дисперсии (см., например, [8]). Таким образом, в первом приближении находим

$$\begin{aligned} f(\mathbf{p}, \mathbf{r}) &= f^{(0)}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) + \hat{L}_{\mathbf{p}}^{-1} \varphi(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \\ &\equiv f^{(0)}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) + \hat{L}_{\mathbf{p}}^{-1} \left\{ \frac{1}{en} f^{(0)}(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \operatorname{div} \mathbf{j}^{(0)}(\mathbf{r}) \right. \\ &\quad \left. - \operatorname{div}(\mathbf{v}(\mathbf{p}) f^{(0)}(\mathbf{p}, \mathbf{r})) \right\}, \end{aligned} \quad (10)$$

здесь $\mathbf{j}^{(0)}(\mathbf{r})$ — плотность тока, получающаяся из (5) с $f = f^{(0)}$. Соответственно (10) формула для плотности тока имеет вид

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = \mathbf{j}^{(0)}(\mathbf{r}) + e \sum_{\mathbf{p}} \varphi(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \hat{L}_{-\mathbf{p}}^{-1} \mathbf{v}(\mathbf{p}). \quad (11)$$

Используя (11), (10), (8) и (1), находим $j_x \equiv j$. Результат представим в безразмерной форме, переобозначая $Ee\tau d/\hbar \rightarrow E$, $j/(env_0) \rightarrow j$, $\mu/\Delta \rightarrow \mu$, $T/\Delta \rightarrow T$, $v_0\tau\nabla_x \rightarrow \nabla_x$ ($v_0 = \Delta d/\hbar$ — максимальная скорость электрона вдоль Ox).

В случае $T(\mathbf{r}) = \text{const}$ в линейном приближении по $\nabla_x n$ из (11) имеем

$$j = C_1 \frac{E}{1+E^2} - D \frac{\nabla_x n}{n}, \quad (12)$$

где коэффициент диффузии (в единицах $v_0^2\tau$) равен

$$D(E) = \frac{1}{2(1+E^2)} \left[1 + C_2 \frac{2E^2 - 1}{4E^2 + 1} - 4C_1^2 \frac{E^2}{(E^2 + 1)^2} \right], \quad (13)$$

и обозначено

$$C_k = C_k(T) = \left\langle \cos \frac{kp_x d}{\hbar} \right\rangle, \quad (14)$$

а угловые скобки означают усреднение с помощью функции $f_0(\mathbf{p}, \mathbf{r})$.

Отметим, что формула (13) (для невырожденных носителей) была впервые получена в [9] иным методом: на основе уравнения Больцмана с интегралом столкновений Батнагара–Гросса–Крука.

В случае $n = \text{const}$ в линейном приближении по $\nabla_x T$ из (11) находим

$$j = \frac{C_1}{1+E^2} \left[(E - \nabla_x \mu) - \alpha \nabla_x T \right], \quad (15)$$

где дифференциальная термоэдс (в единицах k_B/e)

$$\alpha(E) = \frac{B_2}{2C_1} \left(\frac{2E^2 - 1}{1 + 4E^2} \right) - \frac{2B_1 E^2}{(1 + E^2)^2} - \frac{d\mu}{dT}, \quad (16)$$

здесь

$$B_k = \frac{dC_k}{dT}. \quad (17)$$

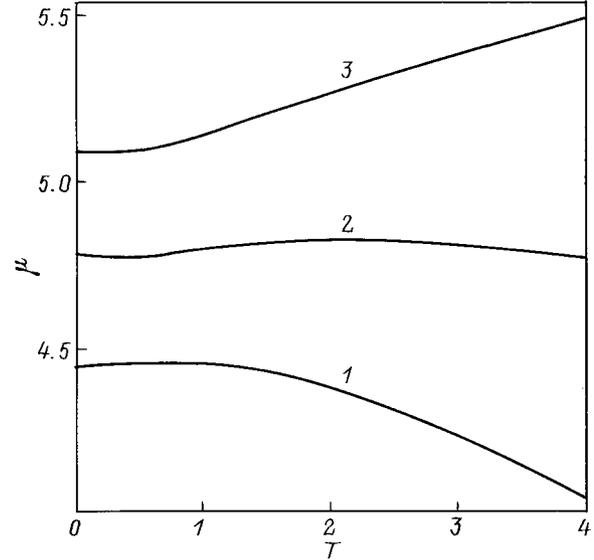


Рис. 1. Зависимость химического потенциала μ от температуры T (отн. ед.). Кривые соответствуют значениям параметра $N = \pi^3 \hbar^2 n d / m \Delta$: 1 — $N = 0.55$; 2 — $N = 0.6$; 3 — $N = 0.65$.

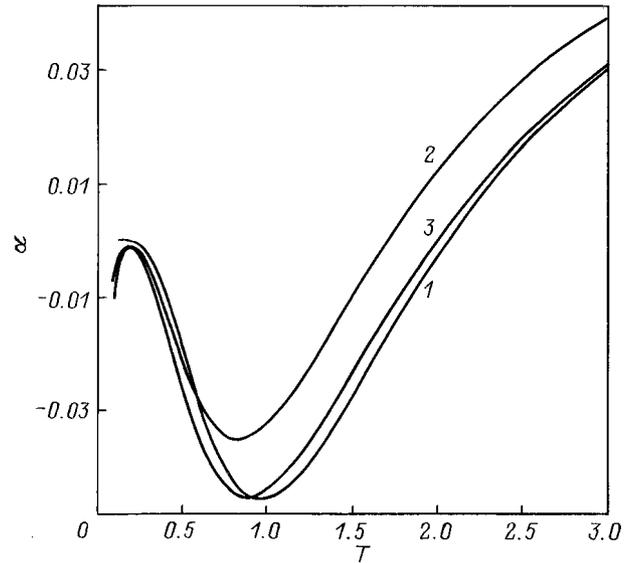


Рис. 2. Зависимость термоэдс α от температуры T при $N = 0.6$. Кривые соответствуют значениям параметров: 1 — $E = 0$; 2 — $E = 1$; 3 — $E = 10$.

Для невырожденного электронного газа, когда

$$\exp\left(\frac{\mu}{T}\right) = \frac{n}{n_0} \exp\left(\frac{1}{T}\right) I_0^{-1}\left(\frac{1}{T}\right) \ll 1, \quad (18)$$

($I_k(z)$ — модифицированная функция Бесселя, $n_0 = mT\Delta/2\pi\hbar^2 d$) и $f_0(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \approx \exp((\mu - \varepsilon(\mathbf{p}))/T)$, коэффициенты C_k и B_k вычисляются аналитически

$$C_k = I_k\left(\frac{1}{T}\right) / I_0\left(\frac{1}{T}\right),$$

$$2T^2 B_k = 2C_1 C_k - C_{k-1} - C_{k+1}. \quad (19)$$

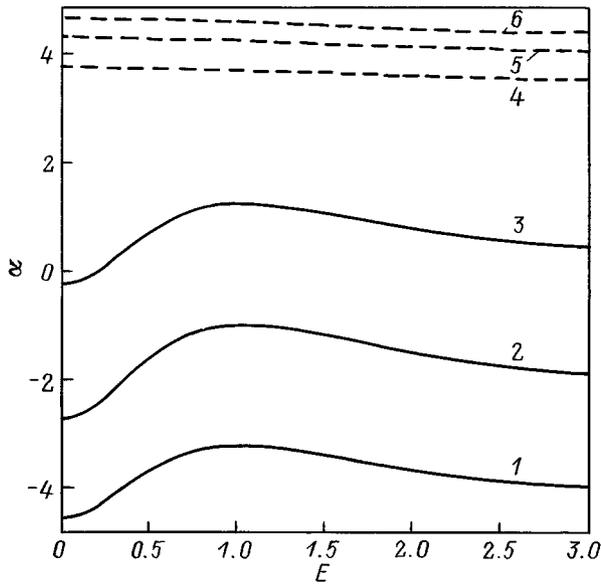


Рис. 3. Зависимость термоэдс от поля E . Сплошные кривые ($10^2\alpha$) соответствуют значению $N = 0.6$ и значениям температуры: 1 — $T = 0.5$; 2 — $T = 1$; 3 — $T = 1.5$. Штриховые кривые (α) соответствуют значению $N = 0.01$ и значениям температуры: 4 — $T = 0.5$; 5 — $T = 1$; 6 — $T = 1.5$.

При $E \ll 1$ из (16) получается

$$\alpha(0) = 3 + \frac{1}{T} \left(1 - \frac{1}{C_1} \right) - \frac{\mu}{T}. \quad (20)$$

Для широких зон и/или низких температур ($T \ll 1$) из (20) для α следует выражение $5/2 - \mu/T$, соответствующее стандартному закону дисперсии, что вполне естественно, поскольку в этом случае потолок зоны перестает играть роль. В противоположном предельном случае ($T \gg 1$) из (20) имеем

$$\alpha(0) = 1 - \frac{\mu}{T}. \quad (21)$$

Отметим, что при $T \gg 1$ и $E \gg 1$ зависимость $\alpha(E)$ также выражается формулой (21).

В случае произвольного вырождения электронного газа коэффициенты $C_k(T)$ находятся с помощью ферми-евской функции распределения, в которой зависимость химического потенциала $\mu = \mu(T)$ от температуры определяется из условия (4). На рис. 1 представлены результаты численных расчетов $\mu = \mu(T)$ для различных значений безразмерного параметра $N = \pi^3 \hbar^2 n d / m \Delta$. На рис. 2 изображена температурная зависимость термоэдс при различных значениях поля E . Отметим немонотонное поведение $\alpha(0)$ при низких температурах. Именно такой характер $\alpha(0)$ наблюдался в СР GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs [6]. На рис. 3 представлена зависимость от $\alpha(E)$ для различных температур.

Численные оценки полученных результатов (в том числе представленных на рисунках) сводятся к оценке использованной здесь единицы измерения напряженности

электрического поля ($E_0 = \hbar / e \tau d$). Для $d = 10^{-6}$ см, $\tau = 10^{-12}$ с величина $E_0 \approx 660$ В/см.

Авторы выражают благодарность Э.М. Эпштейну за полезное обсуждение работы.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 97-02-16 321).

Список литературы

- [1] А.Г. Самойлович, М.И. Клиnger. ЖТФ **25**, 12, 2050 (1955).
- [2] А.Я. Шик. ФТП **7**, 2, 261 (1973).
- [3] Б.М. Аскеров, Н.Ф. Гашимзаде, М.М. Панахов. ФТТ **29**, 3, 818 (1987).
- [4] S.S. Kubakaddi, P.N. Butcher, B.G. Mulimani. J. Phys.: Condens. Matter **3**, 5445 (1991).
- [5] Г.М. Шмелев, И.А. Чайковский, С.И. Менса. ФТП **23**, 4, 712 (1989).
- [6] R. Fletcher, P.T. Coleridge, Y. Feng. Phys. Rev. **B52**, 4, 2823 (1995).
- [7] H.T. Grahn, K. von Klitzing, K. Ploog, G.H. Döhler. Phys. Rev. **B43**, 14, 12 095 (1991).
- [8] И.М. Дыкман, П.М. Томчук. Явления переноса и флуктуации в полупроводниках. Наук. думка, Киев (1981). 320 с.
- [9] А.А. Игнатов, В.И. Шашкин. ФТП **18**, 4, 721 (1984).