

# НОРМАЛЬНЫЕ ПРОЦЕССЫ ФОНОН-ФОНОННОГО РАССЕЙЯНИЯ И ТЕРМОЭДС УВЛЕЧЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ ГЕРМАНИЯ С ИЗОТОПИЧЕСКИМ БЕСПОРЯДКОМ

*И. Г. Кулеев\*, И. И. Кулеев*

*Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук  
620219, Екатеринбург, Россия*

*А. Н. Талденков, А. В. Инюшкин, В. И. Ожогин*

*Институт молекулярной физики,  
Российский научный центр «Курчатовский институт»  
123182, Москва, Россия*

*К. Ито\*\**

*Университет Кейо  
223-8522, Йогогама, Япония*

*Ю. Халлер\*\*\**

*Калифорнийский университет в Беркли и Национальная лаборатория им. Лоуренса в Беркли  
Беркли, 94720 Калифорния, США*

Поступила в редакцию 10 декабря 2002 г.

Экспериментально обнаружена сильная зависимость термоэдс кристаллов германия от изотопного состава. Развита теория увлечения электронов фононами в полупроводниках с невырожденной статистикой носителей тока, учитывающая особенности релаксации импульса фононов в нормальных процессах фонон-фононного рассеяния. Проанализировано влияние дрейфового движения фононов на термоэдс увлечения в кристаллах германия с различным изотопным составом для двух вариантов релаксации импульса фононов в нормальных процессах рассеяния фононов. При расчете термоэдс использованы времена релаксации фононов, определенные из данных по теплопроводности германия. Проанализирована роль неупругости электрон-фононного рассеяния в термоэдс увлечения в полупроводниках. Дано качественное объяснение изотопического эффекта в термоэдс увлечения. Показано, что этот эффект связан с дрейфовым движением фононов, которое оказывается весьма чувствительным к изотопическому беспорядку в кристаллах германия.

PACS: 72.20.Pa, 72.80.Cw, 72.20.Dp

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Недавно были успешно выращены высококачественные монокристаллы германия с различным изотопным составом, включая уникально чистый

как химически, так и изотопически, кристалл с обогащением 99.99% по изотопу  $^{70}\text{Ge}$  [1], обозначаемый далее как  $^{70}\text{Ge}$  (99.99%). Экспериментальные исследования теплопроводности [2, 3] этих кристаллов показали, что для моноизотопных образцов  $^{70}\text{Ge}$  (99.99%) максимальные значения теплопроводности на порядок выше, чем для кристаллов с природным изотопным составом. Очевидно, что этот эффект связан с увеличением длины свободного пробега тепловых фононов из-за уменьшения рассея-

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

\*\*К. М. Itoh, Department of Applied Physics and Physico-Informatics, Keio University, Yokohama 223-8522, Japan

\*\*\*E. E. Haller, University of California and Lawrence Berkeley National Lab, Berkeley, California 94720

ния на «примесных» изотопах, причем в изотопически чистых кристаллах при температурах вблизи максимума теплопроводности важную роль играют нормальные фонон-фононные процессы рассеяния [3–5]. Изменение изотопного состава должно сказываться и на таком термоэлектрическом явлении как термоэдс фононного увлечения  $\alpha_{ph}(T)$ , которое явным образом зависит от времени жизни фононов. Поэтому уменьшение степени изотопического беспорядка должно приводить и к увеличению абсолютных значений термоэдс фононного увлечения. Однако теория Херринга [6] предсказывает очень слабую зависимость  $\alpha_{ph}(T)$  от концентрации примесей в случае достаточно чистого полупроводника (см. также [7–9]). В рамках стандартного однопараметрического приближения частота релаксации фононов в нормальных процессах ( $N$ -процессах) фонон-фононного рассеяния включалась в полную частоту релаксации фононов, которая являлась единственным параметром, определяющим неравновесную функцию распределения фононов. Такой подход является оправданным для «грязных» полупроводников, когда частота релаксации фононов в  $N$ -процессах,  $\nu_{phN}(q)$ , гораздо меньше частоты релаксации фононов в резистивных процессах рассеяния,  $\nu_{phR}(q)$ , обусловленной рассеянием фононов на фононах в процессах переброса, на дефектах и границах образца. В противоположном предельном случае достаточно чистых полупроводников необходимо учитывать дрейф фононной системы, обусловленный  $N$ -процессами фонон-фононного рассеяния [10, 11].

В невырожденных проводниках электроны взаимодействуют только с длинноволновыми фононами, волновой вектор которых существенно меньше волнового вектора тепловых фононов, дающих основной вклад в теплопроводность. Поскольку вероятность изотопического рассеяния фонона пропорциональна четвертой степени его волнового вектора  $q$ , термоэдс, рассчитанная в рамках однопараметрического приближения, оказывается нечувствительной к степени изотопического беспорядка. На аномалии термоэдс, возникающие в такой ситуации, обратили внимание Козлов и Нагаев еще 30 лет назад [12]. Они показали, что в случае очень совершенных кристаллов увлечение длинноволновых фононов тепловыми фононами может вызвать аномально высокие значения термоэдс. Эта термоэдс (термоэдс двухступенчатого увлечения), в отличие от херринговской термоэдс, обратно пропорциональна концентрации примесей [13] и тесно связана с механизмом релаксации длинноволновых фононов на тепловых в нор-

мальных процессах фонон-фононного рассеяния.

Впервые попытка обнаружить влияние изотопического рассеяния фононов на термоэдс была предпринята Оскотским и др. [14], которые исследовали теплопроводность и термоэдс кристаллов  $\text{Te}$  с двумя разными изотопными составами, один из которых был обогащен до 92 % по изотопу  $^{128}\text{Te}$ . Изотопическое обогащение приводило к трехкратному увеличению максимальных величин теплопроводности, однако авторы не обнаружили влияния изотопического беспорядка на термоэдс фононного увлечения при низких температурах. Этот негативный результат, возможно, обусловлен либо различной концентрацией заряженных примесей в исследованных образцах, либо сравнительно слабым вкладом  $N$ -процессов в суммарную частоту релаксации фононов.

В выполненных недавно измерениях термоэдс на кристаллах германия с разным изотопным составом мы обнаружили почти двукратное увеличение термоэдс при низких температурах в моноизотопном образце  $^{70}\text{Ge}$  (99.99 %) по сравнению с  $\text{Ge}$  природного изотопного состава [15]. Этот результат свидетельствует о важной роли  $N$ -процессов в релаксации фононной системы для изотопически обогащенных кристаллов германия. Роль этих процессов в решеточной теплопроводности без разделения вкладов продольных и поперечных фононов достаточно хорошо изучена [16–18]. В  $N$ -процессах рассеяния импульс фононов сохраняется. Эти процессы не дают непосредственного вклада в теплосопrotивление, а обеспечивают релаксацию фононной подсистемы к дрейфовому локально-равновесному распределению. Таким образом,  $N$ -процессы, перераспределяя энергию и импульс между различными фононными модами, формируют неравновесную функцию распределения фононов и препятствуют сильному отклонению от равновесного распределения каждой фононной моды. При этом изменяется относительный вклад различных резистивных процессов рассеяния (рассеяние на дефектах, границах образца и в процессах фонон-фононного переброса) в теплосопrotивление. Учет дрейфового движения фононов необходим в условиях, когда частота релаксации фононов в  $N$ -процессах  $\nu_{phN}(q)$  будет больше или сравнима с частотой релаксации в резистивных процессах рассеяния  $\nu_{phR}(q)$ . Очевидно, что в изотопически чистых образцах  $\text{Ge}$  при низких температурах, когда процессы фонон-фононного переброса в значительной степени выморожены, частота релаксации продольных фононов в  $N$ -процессах значительно превосходит резистивную частоту релаксации  $\nu_{phR}(q)$ , обусловленную главным образом изо-

топическим беспорядком. В настоящей работе мы покажем, что учет дрейфа фононов, обусловленного  $N$ -процессами, позволяет качественно объяснить существенное влияние изотопического беспорядка на термоэдс увлечения в кристаллах Ge.

В отличие от ранее выполненных исследований при описании термоэдс увлечения мы выделим вклады продольных и поперечных фононов и учтем перераспределение импульса фононов в  $N$ -процессах рассеяния как внутри каждой колебательной ветви (механизм Саймонса [19]), так и между различными колебательными ветвями фононов (механизм Херринга [20]). В этом приближении неравновесность фононной подсистемы описывается шестью параметрами: частотами релаксации фононов в резистивных и нормальных процессах рассеяния и средними скоростями дрейфа для каждой из ветвей фононного спектра. Такое описание неравновесности фононов позволяет выявить новые особенности релаксации импульса квазичастиц и их влияние на термоэдс и теплопроводность полупроводников. Как мы покажем ниже, дрейфовая скорость фононов (как и теплопроводность) определяется главным образом тепловыми фононами, для которых рассеяние на дефектах играет существенную роль. Поэтому термоэдс при учете дрейфа фононной системы становится чувствительной к степени изотопического беспорядка. Далее приводятся результаты измерений и количественный анализ изотопического эффекта в термоэдс увлечения.

## 2. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТА

В настоящей работе анализируются экспериментальные данные по термоэдс  $\alpha(T)$  монокристаллов германия с тремя различными изотопными составами — природным и обогащенными до 96.3% и 99.99% по изотопу  $^{70}\text{Ge}$ . Использовались кристаллы Ge  $n$ - и  $p$ -типа с концентрацией заряженных примесей  $|N_d - N_a| < 2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ . Отметим, что в работе [21] было установлено, что для высокочистых образцов Ge  $n$ - и  $p$ -типа термоэдс фононного увлечения очень слабо зависит от концентрации электрически активных примесей при уровне допирования менее  $10^{15} \text{ см}^{-3}$  и уменьшается по абсолютной величине при более высоких концентрациях. Наши образцы представляли собой параллелепипеды с квадратным сечением. Полная длина образцов была приблизительно 40 мм, а сторона квадрата в сече-

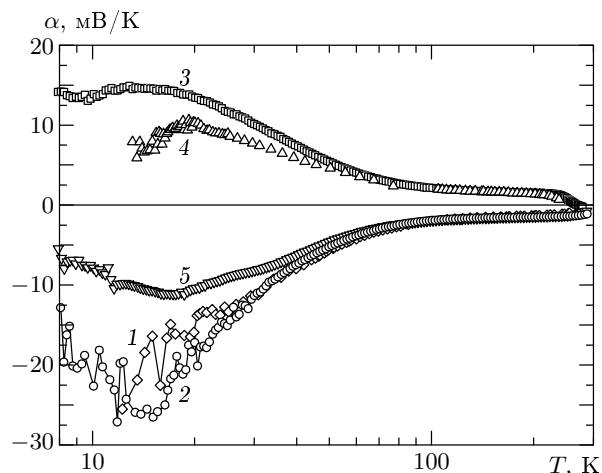


Рис. 1. Абсолютная величина дифференциальной термоэдс как функция температуры для образцов кристаллов германия с разным изотопным составом: 1 — образец номер G2, 2 — G7, 3 — G70, 4 — Gn21, 5 — S1

нии — примерно 2.5 мм. Измерения термоэдс были выполнены с использованием метода стационарного продольного теплового потока в вакууме в интервале температур от 8 до 300 К. Тепловой поток направлялся вдоль длинного ребра образца, при этом перепад температуры вдоль образца не превышал 1% от его средней температуры. Параметры пяти исследованных образцов приведены в таблице.

Экспериментальные данные по температурной зависимости термоэдс представлены на рис. 1. Из рисунка видно, что при температурах выше 70 К термоэдс практически не зависит от изотопного состава. В этой области температур преобладает диффузионная компонента термоэдс  $\alpha_e(T)$ , которая определяется степенью легирования и зонными параметрами полупроводника и не зависит от времени жизни фононов. При низких температурах, где доминирует термоэдс фононного увлечения  $\alpha_{ph}(T)$ ,  $\alpha(T)$  растет с уменьшением изотопического беспорядка, причем в максимуме для изотопически чистого  $^{70}\text{Ge}$  (99.99%) термоэдс примерно в два раза выше, чем для германия с природным изотопным составом ( $^{nat}\text{Ge}$ ). По сравнению с теплопроводностью термоэдс германия оказалась примерно в пять раз менее чувствительна к изменению степени изотопического беспорядка. Отметим, что для образцов с одним и тем же изотопным составом термоэдс в пределах погрешности эксперимента не зависит от степени допирования. Это согласуется с хорошо известным фактом — слабой чувствительностью величины

Параметры исследованных образцов кристаллов Ge

| Номер образца | Изотопный состав, % $^{70}\text{Ge}$ | $g, 10^{-5}$ | Ось   | $ N_d - N_a , 10^{12} \text{ см}^{-3}$ |
|---------------|--------------------------------------|--------------|-------|----------------------------------------|
| G2            | 99.99                                | 0.008        | [100] | 2.7                                    |
| G7            | 99.99                                | 0.008        | [111] | 20                                     |
| G70           | 96.6                                 | 7.75         | [100] | 2                                      |
| Gn21          | natural                              | 58.9         | [100] | 0.5                                    |
| S1            | natural                              | 58.9         | [111] | 4                                      |

Примечание.  $g = \sum_i f_i \left( \frac{M_i - \bar{M}}{\bar{M}} \right)^2$  — фактор, характеризующий изотопический беспорядок кристалла [3].

термоэдс увлечения от концентрации допантов в достаточно чистых кристаллах германия [6, 21]. Эти особенности термоэдс требуют детального теоретического рассмотрения.

Ниже приводится количественный анализ изотопического эффекта в термоэдс германия. Основное внимание уделено исследованию влияния дрейфового движения фононной системы, обусловленного нормальными процессами рассеяния фононов, и неупругости электрон-фононного рассеяния на термоэдс увлечения. Влияние нормальных процессов рассеяния фононов на взаимное увлечение электронов и фононов в металлах и в вырожденных полупроводниках рассмотрены в работах [10, 11]. В данной работе эта теория обобщена на случай полупроводников с невырожденной статистикой носителей тока. Рассмотрено перераспределение импульса продольных и поперечных фононов в  $N$ -процессах рассеяния как внутри каждой колебательной ветви, так и между различными колебательными ветвями. Ранее такой подход позволил успешно объяснить влияние изотопного состава на теплопроводность кристаллов германия и кремния [22, 23]. Здесь этот метод применен к исследованию влияния изотопического беспорядка на термоэдс увлечения. При расчете термоэдс использованы времена релаксации фононов, определенные из данных по теплопроводности для тех же образцов германия [3, 22]. Показано, что в достаточно чистых полупроводниках как термоэдс, так и решеточная теплопроводность [22] при разделении вклада продольных и поперечных фононов в значительной степени зависят от механизма релаксации импульса фононов в  $N$ -процессах рассеяния.

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

Рассмотрим для простоты полупроводник с изотропным законом дисперсии носителей тока. Вычислим поток заряда, обусловленный действием электрического поля  $\mathbf{E} = \{E_x, 0, 0\}$  и градиента температуры  $\nabla T = (\nabla_x T, 0, 0)$ . Система кинетических уравнений для неравновесных электронной  $f(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  и фононной  $N^\lambda(\mathbf{q}, \mathbf{r})$  функций распределения с учетом  $N$ -процессов рассеяния фононов имеет вид [11]

$$\begin{aligned} \frac{e}{\hbar} \mathbf{E}_0 \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} + (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \nabla_{\mathbf{r}}) f_{\mathbf{k}} &= I_{ei}(f_{\mathbf{k}}) + I_{eph}(\mathbf{f}_{\mathbf{k}}, N_q^\lambda), \\ \mathbf{v}_q^\lambda \cdot \nabla_{\mathbf{r}} N_q^\lambda &= - \left( N_q^\lambda - N_{q\lambda}^{(0)} \right) \nu_{ph}^{(1)\lambda} - \\ &- \left( N_q^\lambda - N(\mathbf{q}, \mathbf{u}_\lambda) \right) \nu_{phN}^\lambda + I_{phe}(N_q^\lambda, f_{\mathbf{k}}). \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь  $\mathbf{v}_q^\lambda = s_\lambda \mathbf{q}/q$  — групповая скорость акустических фононов с поляризацией  $\lambda$ ,  $N_{q\lambda}^0$  — функция Планка,  $\nu_{phN}^\lambda(q)$  — частота релаксации фононов в  $N$ -процессах рассеяния, частота

$$\nu_{ph}^{(1)\lambda}(q) = \nu_{phi}^\lambda(q) + \nu_{phB}^\lambda(q) + \nu_{phU}^\lambda(q)$$

включает все неэлектронные резистивные частоты релаксации фононов, обусловленные рассеянием фононов на фононах в процессах переброса,  $\nu_{phU}^\lambda(q)$ , дефектах и изотопическом беспорядке,  $\nu_{phi}^\lambda(q)$ , и границах образца,  $\nu_{phB}^\lambda(q)$ . Интегралы столкновений электронов с примесями,  $I_{ei}$ , фононами,  $I_{eph}$ , и фононов с электронами,  $I_{phe}$ , определены в работах [7–9, 24–27]. В уравнении (1) учтено, что

$N$ -процессы рассеяния приводят фононную подсистему к локально-равновесному распределению Планка с дрейфовой скоростью  $\mathbf{u}_\lambda$ , которая может быть различной для фононов различной поляризации [16–18]:

$$N(\mathbf{q}, \mathbf{u}_\lambda) = \left[ \exp \left( \frac{\hbar\omega_{q\lambda} - \hbar\mathbf{q} \cdot \mathbf{u}_\lambda}{k_B T} \right) - 1 \right]^{-1} \approx N_{q\lambda}^0 + \frac{\hbar\mathbf{q} \cdot \mathbf{u}_\lambda}{k_B T} N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1). \quad (2)$$

Представим функции распределения электронов и фононов в виде [3–5]

$$f_{\mathbf{k}} = f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}) + \delta f_{\mathbf{k}}, \quad \delta f_{\mathbf{k}} = -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \chi(\varepsilon), \quad (3)$$

$$N_{\mathbf{q}}^\lambda = N_{q\lambda}^0 + g_\lambda(\mathbf{q}),$$

где  $f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})$  — равновесная функция распределения электронов, а  $\delta f_{\mathbf{k}}$  и  $g_\lambda(\mathbf{q})$  — неравновесные добавки к функциям распределения, линейные по внешним воздействиям. Линеаризуем интегралы столкновений по этим добавкам. Интегралы столкновений  $I_{ie}(\delta f_{\mathbf{k}})$ ,  $I_{phe}(f_0, g_\lambda(\mathbf{q}))$ , а также  $I_{eph}(\delta f_{\mathbf{k}}, N_{q\lambda}^0)$  в приближении упругого рассеяния представим через частоты релаксации [27]. При расчете интеграла столкновений  $I_{phe}(f_0, g_\lambda(\mathbf{q}))$  учтем неупругость столкновений неравновесных фононов с равновесными электронами, не ограничиваясь линейным приближением по параметру неупругости [7–9, 24–28].

Подставим выражения (2) и (3) в (1) и, аналогично [11], получим выражение для фононной функции распределения  $g_\lambda(\mathbf{q})$ :

$$g_\lambda(\mathbf{q}) = -\frac{N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1)}{\nu_{ph}^\lambda(q)} \frac{\hbar\omega_{q\lambda}}{k_B T^2} \mathbf{v}_q^\lambda \cdot \nabla T + \frac{\hbar\mathbf{q} \cdot \mathbf{u}_\lambda}{k_B T} N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1) \frac{\nu_{phN}^\lambda(q)}{\nu_{ph}^\lambda(q)}. \quad (4)$$

Здесь

$$\nu_{ph}^\lambda(q) = \nu_{ph}^{(1)\lambda}(q) + \nu_{phe}^\lambda(q) + \nu_{phN}^\lambda(q) = \nu_{phN}^\lambda(q) + \nu_{phR}^\lambda(q)$$

— полная частота релаксации фононов с волновым вектором  $q$  и поляризацией  $\lambda$ , а  $\nu_{phe}^\lambda(q)$  — частота релаксации импульса фононов на электронах [24–27]. Первый член в выражении (4) определяется диффузионным движением фононов, а второй учитывает дрейфовое движение фононов и связан с нормальными процессами фонон-фононного рассеяния. Скорость дрейфа фононов  $\mathbf{u}_\lambda$  находится из уравнения

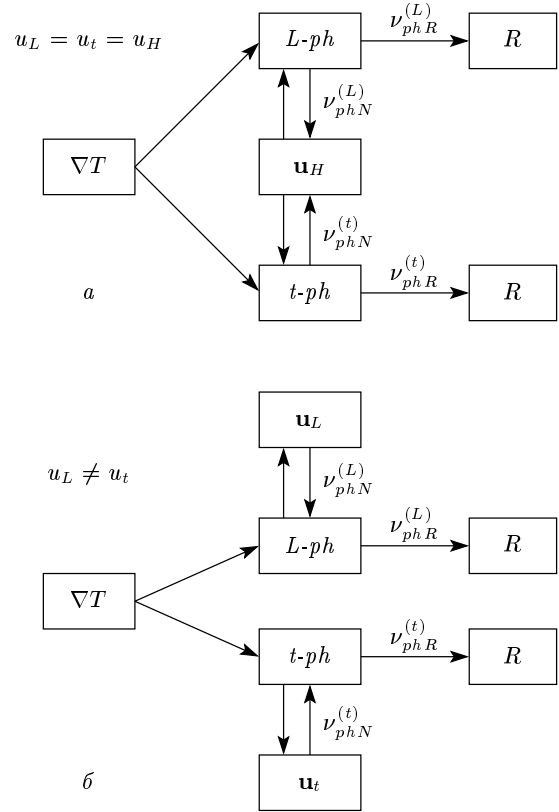


Рис. 2. Схема, иллюстрирующая релаксацию импульса в фононной системе для двух механизмов рассеяния фононов в нормальных процессах: *a* — для механизма Херринга, *b* — для механизма Саймонса

баланса импульса фононов, которое следует из закона сохранения импульса в нормальных процессах фонон-фононного рассеяния:

$$\frac{1}{V} \sum_{q,\lambda} \hbar\mathbf{q}\nu_{phN}^\lambda(q) (N_q^\lambda - N(\mathbf{q}, \mathbf{u}_\lambda)) = \frac{1}{V} \sum_{q,\lambda} \hbar\mathbf{q}\nu_{phN}^\lambda(q) \times \left[ g_\lambda(\mathbf{q}) - \frac{\hbar\mathbf{q} \cdot \mathbf{u}_\lambda}{k_B T} N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1) \right] = 0. \quad (5)$$

Схема, иллюстрирующая перераспределение и релаксацию импульса, полученного фононной системой от градиента температуры, приведена на рис. 2. Рассеяние фононов в резистивных процессах рассеяния ( $R$ ) (на изотопическом беспорядке, электронах, границах образца и фонон-фононное рассеяние в процессах переброса) приводит к релаксации импульса фононной системы.  $N$ -процессы пе-

пераспределяют импульс между различными фононными модами ( $L$ - $ph$  и  $t$ - $ph$ ) и приводят к дрейфу фононов со средней скоростью  $\mathbf{u}_\lambda$ . Как и в работах [10, 11, 16–18], мы предполагаем, что скорость дрейфа не зависит от волнового вектора фононов. Обычно рассматривают два механизма нормальных трехфононных процессов рассеяния: механизмы Херринга [20] и Саймонса [19]. В механизме  $N$ -процессов Херринга участвуют фононы различных поляризаций: частота релаксации поперечных фононов в механизме Херринга определяется процессами рассеяния ( $t + L \leftrightarrow L$ ), в которых участвует один поперечный и два продольных фонона; при этом основной вклад в частоту релаксации продольных фононов вносят либо процессы распада продольного фонона на два поперечных, принадлежащих различным ветвям, либо слияние двух поперечных с возникновением продольного фонона ( $L \leftrightarrow t_1 + t_2$ ). Этот механизм релаксации обеспечивает перераспределение дрейфового импульса между продольными и поперечными фононами (см. рис. 2) и стремится установить локально-равновесное распределение с дрейфовой скоростью, одинаковой для фононов обеих поляризаций  $u_L = u_t = u_H$ . В механизме релаксации Саймонса [19] участвуют фононы одной поляризации. Для этого механизма рассеяния закон сохранения импульса в  $N$ -процессах выполняется для каждой из ветвей фононного спектра и скорость дрейфа продольных и поперечных фононов различна. Поэтому ниже мы рассмотрим два варианта релаксации импульса фононов в  $N$ -процессах.

Из выражений (4) и уравнения баланса импульса фононов (5) найдем скорости дрейфа фононов  $\mathbf{u}_\lambda$  для механизмов релаксации Херринга ( $H$ ) и Саймонса ( $S$ ) аналогично [11]. После чего для фононной функции распределения  $g_\lambda(\mathbf{q})$  получим:

$$g_\lambda(\mathbf{q}) = -\frac{N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1)}{\tilde{\nu}_{ph}^\lambda(q)} \frac{\hbar\omega_{q\lambda}}{k_B T^2} \mathbf{v}_q^\lambda \cdot \nabla T, \quad (6)$$

$$\tilde{\nu}_{ph}^{\lambda(S,H)}(q) = \nu_{ph}^\lambda(q) (1 + \nu_{phN}^\lambda(q)\beta_{(S,H)})^{-1},$$

$$\beta_S = \frac{\Psi_N^\lambda}{\Psi_{NR}^\lambda}, \quad \beta_H = \left(\frac{s_L}{s_\lambda}\right)^2 \frac{\Psi_N^L + 2S_*^3 \Psi_N^t}{\Psi_{NR}^L + 2S_*^5 \Psi_{NR}^t}. \quad (7)$$

Здесь  $S_* = s_L/s_t$ , а остальные функции определяются выражениями

$$\begin{aligned} \Psi_N^\lambda &= \left\langle \frac{\nu_{phN}^\lambda(q)}{\nu_{ph}^\lambda(q)} \right\rangle_{z_{d\lambda}} \equiv \\ &\equiv \int_0^{z_{d\lambda}} dz_q^\lambda (z_q^\lambda)^4 \frac{\nu_{phN}^\lambda(q)}{\nu_{ph}^\lambda(q)} N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1), \quad (8) \\ \Psi_{NR}^\lambda &= \left\langle \frac{\nu_{phR}^\lambda(q)\nu_{phN}^\lambda(q)}{\nu_{ph}^\lambda(q)} \right\rangle_{z_{d\lambda}}, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} z_q^\lambda &= \frac{\hbar\omega_{q\lambda}}{k_B T} = \frac{q}{q_{T\lambda}}, \quad q_{T\lambda} = \frac{k_B T}{\hbar s_\lambda}, \\ z_{2k}^\lambda &= \frac{2k}{q_{T\lambda}}, \quad z_{d\lambda} = \frac{\hbar\omega_{d\lambda}}{k_B T} \end{aligned}$$

( $\omega_{d\lambda}$  — дебаевская частота фононов с поляризацией  $\lambda$ ). Из выражения (6) видно, что учет нормальных процессов фонон-фононного рассеяния сводится к перенормировке частоты релаксации импульса фононов. Дрейфовое движение фононов, обусловленное  $N$ -процессами, приводит к уменьшению эффективной частоты релаксации фононов, разному для механизмов релаксации Херринга [20] и Саймонса [19].

Рассмотрим теперь электронную подсистему. Рассеяние электронов на примесях  $\nu_{ei}$  приводит к релаксации импульса электронов, а механизмы электрон-фононной релаксации, характеризующиеся частотами  $\nu_{eph}$  и  $\nu_{phe}$ , приводят к перераспределению импульса внутри электрон-фононной системы, причем электроны взаимодействуют только с длинноволновыми фононами. Перенормировку термоэдс за счет взаимного увлечения электронов и фононов мы здесь не рассматриваем. Следует отметить, что такие эффекты, как термоэдс и теплопроводность находятся из условия равенства нулю полного тока через образец. В этом случае средняя скорость упорядоченного движения электронов в любом физически малом объеме образца равна нулю. Поэтому передача импульса упорядоченного движения электронов в фононную подсистему мала, и влиянием неравновесности электронов на электроны через подсистему фононов можно пренебречь [11]. С другой стороны, при наличии градиента температуры существует стационарный поток фононов от горячего конца образца к холодному, и передача импульса упорядоченного движения фононов электронам в значительной степени определяет величину термоэдс. Заметим, что при низких температурах, когда электрон-фононное увлечение вносит заметный вклад в величину термоэдс, для продольных фононов в кристаллах Ge частота релаксации  $\nu_{phN}(q) \gg \nu_{phR}(q)$  [22]. Из сказанного

выше следует, что релаксацию импульса фононов в неравновесной электрон-фононной системе необходимо учитывать более строго, чем это было сделано в однопараметрическом приближении [7–9, 24–28].

Целью данного теоретического анализа является исследование влияния дрейфа фононов, обусловленного  $N$ -процессами, на термоэдс увлечения. В этом случае, пренебрегая взаимным увлечением электронов и фононов, для функции  $\chi(\varepsilon)$ , аналогично тому, как это сделано в работе [27], можно получить решение

$$\chi(\varepsilon) = -e\tau(\varepsilon) \left[ \mathbf{E} + \frac{k_B}{e} \left( \tilde{A}_{ph}(\varepsilon) + \frac{\varepsilon - \zeta}{k_B T} \right) \nabla T \right], \quad (9)$$

$$\tilde{A}_{ph}(\varepsilon) = \sum_{\lambda} \frac{ms_{\lambda}^2}{k_B T} \int_0^{z_{2k}^{\lambda}} dz_q^{\lambda} \frac{\nu_{eph}^{\lambda}(k, q)}{\tilde{\nu}_{ph}^{\lambda}(q)}. \quad (10)$$

Здесь  $\tau(\varepsilon)$  — полное время релаксации электронов,

$$\tau^{-1}(\varepsilon_k) = \nu_e(k) = \nu_{ei}(k) + \nu_{e0}(k) + \nu_{eph}(k),$$

частоты релаксации электронов на нейтральных,  $\nu_{e0}(k)$ , и заряженных,  $\nu_{ei}(k)$ , примесях имеют известный вид (см., например, [7], формулы (10.29), (10.50)), а частота столкновений электронов с фононами определяется выражением

$$\nu_{eph}^{\lambda}(k) = \sum_{\lambda} \langle \nu_{eph}^{\lambda}(k, q) \rangle_{z_{2k}^{\lambda}},$$

$$\begin{aligned} \nu_{eph}^{\lambda}(k, q) = & \frac{m_e |C_{0\lambda}|^2}{2\pi\hbar^2 k^3} q^5 N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1) \times \\ & \times \left\{ \left( 1 - \frac{2ms_{\lambda}}{\hbar q} \right) F^+(\varepsilon_k) + \right. \\ & \left. + \left( 1 + \frac{2ms_{\lambda}}{\hbar q} \right) F^-(\varepsilon_k) \right\}, \quad (11) \end{aligned}$$

где

$$F^{\pm}(\varepsilon_k) = \pm \frac{f_0(\varepsilon_k) - f_0(\varepsilon_k \pm \hbar\omega_q)}{f_0(\varepsilon_k)(1 - f_0(\varepsilon_k))}, \quad |C_{0\lambda}|^2 = \frac{E_{0\lambda}^2 \hbar}{s_{\lambda} \rho},$$

$E_{0\lambda}$  — константа деформационного потенциала,  $\rho$  — плотность. Для полупроводников с невырожденной статистикой носителей тока,

$$f_0(\varepsilon) \approx \exp\left(-\frac{\varepsilon - \zeta}{k_B T}\right),$$

функции  $F^{\pm}$  могут быть представлены в виде

$$F^+ \approx 1 - e^{-z}, \quad F^- \approx e^z - 1,$$

тогда с учетом неупругости электрон-фононного рассеяния найдем

$$(\tau_{eph}(\varepsilon))^{-1} = \sum_{\lambda} (\tau_{0eph}^{\lambda})^{-1} x^{-3/2} J_{1\lambda}(x),$$

$$J_{1\lambda}(x) = \frac{1}{2} (J_{1\lambda}^+(x) + J_{1\lambda}^-(x)),$$

$$J_{1\lambda}^{\pm}(x) = \int_0^{z_{max,\lambda}^{\pm}} J_{1\lambda}^{\pm}(z) dz, \quad (12)$$

$$J_{1\lambda}^+(z) = \frac{z^3(z - \delta_{\lambda})}{e^z - 1},$$

$$J_{1\lambda}^-(z) = \frac{z^3(z + \delta_{\lambda})}{e^z - 1} e^{-z},$$

$$(\tau_{0eph}^{\lambda})^{-1} = \frac{m_e |C_{0\lambda}|^2}{2\pi\hbar^3} q_{T\lambda}^2 \delta_{\lambda}^{-3/2}.$$

Верхние пределы интегрирования в (12) определяются выражениями

$$z_{max,\lambda}^{\pm} = \frac{2\hbar s_{\lambda} k}{k_B T} = 2\delta_{\lambda}^{1/2} x^{1/2} \pm \delta_{\lambda},$$

$$\delta_{\lambda} = \frac{2m_e s_{\lambda}^2}{k_B T} = \frac{T_{s\lambda}}{T}, \quad (13)$$

$$T_{s\lambda} = \frac{2m_e s_{\lambda}^2}{k_B}, \quad x = \frac{\varepsilon}{k_0 T},$$

где  $\delta_{\lambda}$  — параметр неупругости. Эффективная температура  $T_{s\lambda}$ , определяющая неупругость электрон-фононного рассеяния, для полупроводников, как правило, меньше 1 К, так, например, для Ge:  $T_{sL} \approx 0.8$  К при  $s_L = 5.21 \cdot 10^5$  см/с,  $m_e \approx 0.22m_0$ . Следовательно, уже при  $T > 10$  К величины  $\delta_{\lambda} \ll 1$  и  $z_{max} \ll 1$ , поэтому выражения (12) могут быть разложены по степеням  $z$ . В нулевом приближении по параметру неупругости  $\delta_{\lambda}$  из (12) получим известное выражение для времени релаксации электронов на фононах:

$$\tau_{eph}^{\lambda}(\varepsilon) = \tau_{0eph}^{\lambda} (2\delta_{\lambda})^{-2} x^{-1/2}. \quad (14)$$

В этом же приближении выражение для обратного времени релаксации фононов на электронах имеет вид

$$\begin{aligned} \nu_{ph\epsilon}^{\lambda}(k, q) = & \frac{m_e^2 |C_{0\lambda}|^2 k_B T}{\pi\hbar^5} e^{\eta} (1 - e^{-z}) e^{-x_m}, \\ x_m = & \frac{(z - \delta_{\lambda})^2}{4\delta_{\lambda}}. \end{aligned} \quad (15)$$

Концентрации электронов  $n_e$ , заряженных доноров  $N_{d+}$  и приведенный уровень Ферми  $\eta = \zeta/k_B T$  находятся из условия электронейтральности для германия (см. [7], формула (6.9)):  $N_d \approx 10^{12} - 10^{13}$  см<sup>-3</sup>,  $\varepsilon_d \approx 0.01$  эВ,  $m_e \approx 0.22m_0$ . Для этих значений параметров критерий невырожденной статистики хорошо выполняется.

Итак, в принятом нами приближении функция  $\chi(\varepsilon)$  учитывает непосредственное действие электрического поля и градиента температуры на электронную подсистему, а также эффект увлечения электронов фононами.

#### 4. ТЕРМОЭДС УВЛЕЧЕНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ С НЕВЫРОЖДЕННОЙ СТАТИСТИКОЙ НОСИТЕЛЕЙ ТОКА

Рассмотрим влияние нормальных процессов фонон-фононного рассеяния на термоэлектродвижущую силу полупроводников с невырожденной статистикой носителей тока. Вычислим ток проводимости  $\mathbf{j}$ , разбив его на три части, пропорциональные неравновесным добавкам к функции распределения электронов  $\chi(\varepsilon)$ :

$$\mathbf{j} = -\frac{e}{3\pi^2} \int_0^\infty d\varepsilon \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \frac{k^3}{m(\varepsilon)} \chi(\varepsilon) \approx \approx \mathbf{j}_{dr} + \mathbf{j}_{drag} + \mathbf{j}_{dif} = 0. \quad (16)$$

Из условия  $\mathbf{j} = 0$  найдем

$$\alpha = \alpha_{ph} + \alpha_{dif}. \quad (17)$$

Ниже мы не будем рассматривать диффузионную компоненту термоэдс, для кристаллов германия при  $T < 100$  К этот вклад мал. В случае невырожденной статистики выражение для термоэдс электрон-фононного увлечения может быть представлено в виде

$$\alpha_{ph} = -\frac{k_B}{e} \frac{\langle\langle \tau(\varepsilon) \tilde{A}_{ph}(\varepsilon) \rangle\rangle}{\langle\langle \tau(\varepsilon) \rangle\rangle}, \quad \langle\langle f(\varepsilon) \rangle\rangle = \frac{\int_0^\infty dx e^{-x} x^{3/2} f(\varepsilon)}{\int_0^\infty dx e^{-x} x^{3/2}}, \quad x = \frac{\varepsilon}{k_0 T}, \quad (18)$$

$$\tilde{A}_{ph}(\varepsilon) = \sum_\lambda \frac{m_e |C_{0\lambda}|^2}{4\pi \hbar^3} \times \times q_{T\lambda}^2 \delta_\lambda^{-1/2} x^{-3/2} (J_{2\lambda}^+(x) + J_{2\lambda}^-(x)), \quad (19)$$

$$J_{2\lambda}^\pm(x) = \int_0^{z_{m_{ax,\lambda}}^\pm} \frac{J_{1\lambda}^\pm(z) dz}{\tilde{\nu}_{ph}^\lambda(q)}, \quad (20)$$

$$J_{1\lambda}^+(z) = \frac{z^3(z - \delta_\lambda)}{e^z - 1},$$

$$J_{1\lambda}^-(z) = \frac{z^3(z + \delta_\lambda)}{e^z - 1} e^{-z}.$$

Верхние пределы интегрирования в (20) определяются выражениями (13). Прежде всего отметим, что в термоэдс увлечения, как и в решеточную теплопроводность [11, 22] входит перенормированная  $N$ -процессами частота релаксации импульса фононов. В отличие от стандартных однопараметрических приближений, для термоэдс увлечения [7–9, 24–28] в выражениях (18)–(20) учитывается неупругость электрон-фононного рассеяния, а также вклад дрейфового движения фононов. Этот вклад имеет различный вид для механизмов релаксации Херринга и Саймонса. Поскольку дрейфовая скорость фононов определяется всеми термически возбужденными фононами, термоэдс становится чувствительной к степени изотопического беспорядка. Как видно из формул (6), (19)–(20), учет дрейфа фононной подсистемы, связанный с нормальными процессами рассеяния фононов, приводит к уменьшению эффективной частоты релаксации фононов и, соответственно, к увеличению доли импульса, передаваемого электронам фононами. Этот результат имеет важное практическое значение для интерпретации экспериментальных данных по термоэдс кристаллов германия с изотопическим беспорядком.

В предельном случае  $\nu_{phN}(q) \ll \nu_{phR}(q)$  вкладом дрейфового движения фононов можно пренебречь и использовать выражение для термоэдс увлечения, полученное ранее в рамках однопараметрического приближения [7–9, 24–28]. При  $\nu_{phN}(q) \gg \nu_{phR}(q)$  нормальные процессы фонон-фононного рассеяния и связанный с ним дрейф фононной системы приводят к значительному увеличению абсолютных значений термоэдс увлечения. Заметим, что при интерпретации экспериментальных данных по термоэдс увлечения в работах, выполненных ранее в однопараметрическом приближении (см. [7–9, 24–28]), частота релаксации в нормальных процессах  $\nu_{phN}(q)$  включалась в полную частоту релаксации фононов  $\nu_{ph}^\lambda(q)$  в качестве резистивного механизма рассеяния фононов, а при  $\nu_{phN}(q) \gg \nu_{phR}(q)$  она рассматривалась в качестве единственного механизма релаксации импульса длинноволновых фононов [7, 8]. Однако из выражений (18)–(20) следует, что в этом предельном случае из термоэдс увлечения исключается



частота релаксации  $\nu_{phN}(q)$ , и  $\alpha_{ph}$  полностью определяется усредненной частотой релаксации фононов в резистивных процессах рассеяния:

$$\begin{aligned} \alpha_{ph}^{(S,H)} &\approx -\frac{k_B}{e} \times \\ &\times \sum_{\lambda} \frac{m_F s_{\lambda}^2}{k_B T} \frac{\langle\langle \tau(\varepsilon) \nu_{e\,ph}^{\lambda}(\varepsilon) \rangle\rangle}{\langle \nu_{phR}^{\lambda}(q) \rangle_{z_{d\lambda}}^{(S,H)} \langle\langle \tau(\varepsilon) \rangle\rangle}, \\ \langle \nu_{phR}^{\lambda}(q) \rangle^{(S)} &= \frac{\langle \nu_{phR}^{\lambda} \rangle}{J_{\lambda}^{(4)}}, \\ \langle \nu_{phR}^{\lambda}(q) \rangle^{(H)} &= \frac{\langle \nu_{phR}^L \rangle + 2S_*^5 \langle \nu_{phR}^t \rangle}{J_L^{(4)} + 2S_*^3 J_t^{(4)}}, \\ J_{\lambda}^{(4)} &= \int_0^{z_{d\lambda}} \frac{dz z^4 e^z}{(e^z - 1)^2}. \end{aligned} \quad (21)$$

Однопараметрическое приближение в этом случае дает совершенно иной результат:

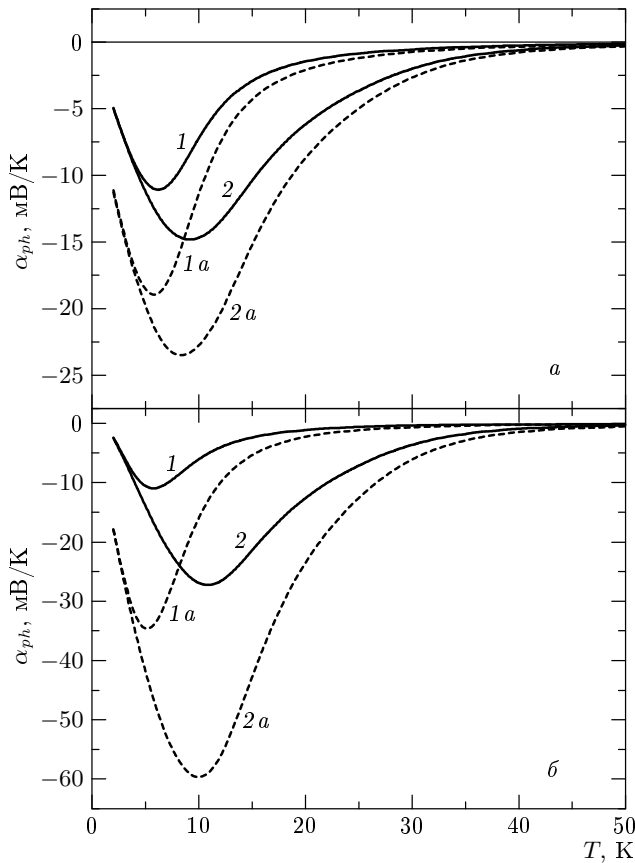
$$\begin{aligned} \alpha_{ph}^{(S,H)} &\approx -\frac{k_B}{e} \sum_{\lambda} \frac{m_F s_{\lambda}^2}{k_B T} \frac{1}{\langle\langle \tau(\varepsilon) \rangle\rangle} \times \\ &\times \left\langle \left\langle \tau(\varepsilon) \int_0^{z_{2k}^{\lambda}} dz_q^{\lambda} \frac{\nu_{e\,ph}^{\lambda}(k, q)}{\nu_{phN}^{\lambda}(q)} \right\rangle \right\rangle. \end{aligned} \quad (22)$$

Поэтому выводы, полученные ранее относительно температурных и полевых зависимостей термоэдс увлечения [7–9, 24–28], нуждаются в уточнении. Очевидно, что в однопараметрическом приближении (22) термоэдс увлечения  $\alpha_{ph}$  нечувствительна к степени изотопического беспорядка. Следует отметить, что иной подход к расчету термоэдс увлечения был предложен в работах [12, 13]. Он основан на разделении всей системы на две подсистемы: подсистему длинноволновых фононов ( $q < 2k$ ), с которыми взаимодействуют электроны, и подсистему тепловых фононов ( $q > q_{TL}$ ). Авторами работ [12, 13] предложен механизм двухступенчатого увлечения: дрейфовое движение фононов определяется тепловыми фононами, которые, в свою очередь, увлекают длинноволновые фононы. По своему физическому содержанию наш метод и подход, развитый в этих работах, совпадают, поскольку дрейфовое движение фононов, как и теплопроводность, в нашей теории определяется именно тепловыми фононами. Однако наш метод носит более общий характер: нами корректно рассматриваются  $N$ -процессы рассеяния тепловых фононов с учетом их дрейфового и диффузионного движений, выделяются вклады фононов различных поляризации, рассматривается как внутриветвевое, так и межветвевое перераспределение импульса фононов в  $N$ -процессах рассеяния.

## 5. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТА ТЕРМОЭДС УВЛЕЧЕНИЯ КРИСТАЛЛОВ ГЕРМАНИЯ С РАЗЛИЧНЫМ ИЗОТОПИЧЕСКИМ СОСТАВОМ

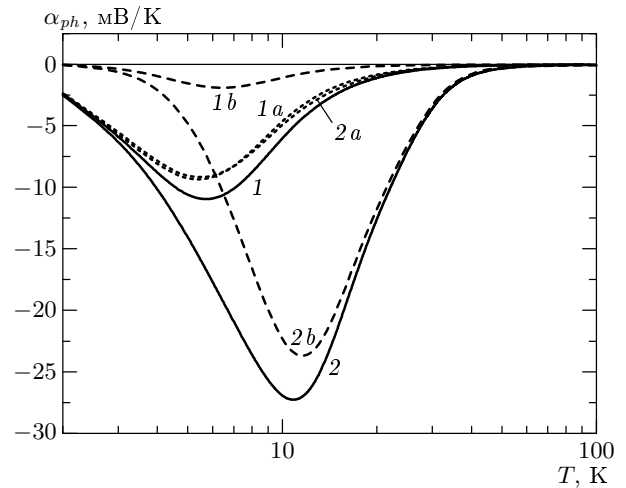
Ниже приводятся результаты численного анализа термоэдс увлечения в кристаллах германия с различным изотопным составом, которые с учетом сделанных при этом приближений могут претендовать лишь на качественное объяснение эффекта. Главными из них являются: приближение изотропной зоны и предположение о том, что дрейфовая скорость фононов не зависит от волнового вектора, т. е. дрейфовая скорость тепловых и длинноволновых фононов одинакова. Расчет термоэдс увлечения с реальной зонной структурой германия в рамках предложенного метода учета нормальных процессов рассеяния фононов при раздельном рассмотрении длинноволновых и тепловых фононов представляет самостоятельный интерес. В данном анализе мы ограничиваемся рассмотрением влияния дрейфового движения фононов и неупругости электрон-фононного рассеяния на термоэдс увлечения в кристаллах германия. Значения параметров, определяющих частоты релаксации фононов, взяты из анализа данных по теплопроводности кристаллов Ge с различным изотопным составом, полученных в работах [3, 22]. Использование этих параметров позволило согласовать результаты расчетов теплопроводности для механизма релаксации Херринга [22] с экспериментальными данными [3] в широком температурном интервале во всем исследованном диапазоне изотопического обогащения. В данном расчете термоэдс увлечения эти параметры не варьируются. Подгоночным параметром теории является константа деформационного потенциала. При фиксированной эффективной массе электронов она выбирается из условия совпадения рассчитанного значения абсолютной термоэдс в точке максимума с экспериментальными значениями для германия с природным изотопным составом и затем используется для расчета термоэдс  $^{70}\text{Ge}$  (99.99%). Поскольку в кристаллографическом направлении [111] эффективная масса электронов одного из четырех эллипсоидов  $m_e \approx 1.68m_0$ , ее средняя величина варьировалась от значения эффективной массы плотности состояний  $m_e \approx 0.22m_0$  до значения  $m_e \approx m_0$ .

Прежде всего рассмотрим роль неупругости при передаче импульса от неравновесных фононов к равновесным электронам. На рис. 3а, б приведены результаты расчетов термоэдс увлечения для  $^{nat}\text{Ge}$  и  $^{70}\text{Ge}$  (99.99%) при  $m_e \approx 0.22m_0$  и  $m_e \approx m_0$ .



**Рис. 3.** Зависимости термоэдс увлечения от температуры для значений параметров: *a* —  $m_e = 0.22m_0$ ,  $E_{0L} = 16$  эВ; *b* —  $m_e = m_0$ ,  $E_{0L} = 4$  эВ. Кривые 1, 1а — для германия с природным изотопным составом ( $N_d = 4 \cdot 10^{12}$  см<sup>-3</sup>); 2, 2а — для германия с 99.99% <sup>70</sup>Ge ( $N_d = 2 \cdot 10^{13}$  см<sup>-3</sup>). Кривые 1, 2 построены с точным учетом неупругости электрон-фононного рассеяния, 1а, 2а — в линейном приближении по параметру неупругости электрон-фононного рассеяния

Как видно из рисунков, точный учет неупругости электрон-фононного рассеяния приводит к значительному подавлению вклада фононного увлечения в термоэдс. Максимальные значения термоэдс  $|\alpha_{max}|$  уменьшаются в 1.6–1.7 раза для значения  $m_e \approx 0.22m_0$ , однако с увеличением эффективной массы электронов роль неупругости возрастает: при  $m_e \approx m_0$  величина  $|\alpha_{max}|$  уменьшается в 3 раза для <sup>nat</sup>Ge и в 2.2 раза для <sup>70</sup>Ge (99.99%). Этот результат явился неожиданным для нас. Дело в том, что анализ времени релаксации электронов на фононах [7–9] показал, что для температур  $T \gg T_{s\lambda}$  ( $T_{s\lambda} \approx 0.8$  К для Ge при  $m_e \approx 0.22m_0$ ) роль неупругости мала, и при температурах, больших 5 К, ею можно пренебречь.

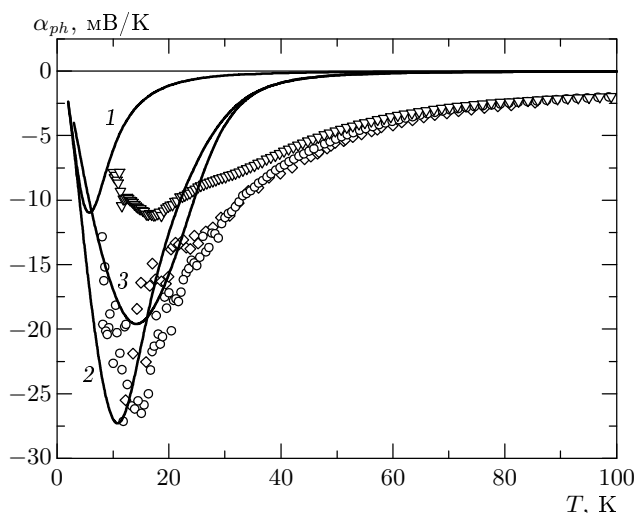


**Рис. 4.** Зависимости термоэдс увлечения (1, 2), а также вкладов диффузионного (1а, 2а) и дрейфового (1б, 2б) движений фононов от температуры для германия с различным изотопным составом ( $m_e = m_0$ ,  $E_{0L} = 4$  эВ) с точным учетом неупругости электрон-фононного рассеяния. Кривые 1, 1а, 1б — для германия с природным изотопным составом ( $N_d = 4 \cdot 10^{12}$  см<sup>-3</sup>), 2, 2а, 2б — для германия с 99.99% <sup>70</sup>Ge ( $N_d = 2 \cdot 10^{13}$  см<sup>-3</sup>)

Поэтому в ранее опубликованных работах, посвященных термоэдс увлечения в полупроводниках [6–9, 24–30], неупругость электрон-фононного рассеяния учитывалась в линейном приближении по параметру неупругости  $\hbar\omega_{q\lambda}/k_B T$ .

Следует отметить, что учет рассеяния на заряженных и нейтральных донорных примесях при концентрациях порядка  $10^{12}$ – $10^{13}$  см<sup>-3</sup> оказывает незначительное влияние на величины термоэдс (это рассеяние вносит вклад менее 3%), тогда как величины подвижности электронов изменяются более существенно в низкотемпературной области.

На рис. 4 приведены вклады дрейфового и диффузионного движений фононов в термоэдс увлечения для <sup>nat</sup>Ge и <sup>70</sup>Ge (99.99%). Как видно из рисунка, для <sup>nat</sup>Ge преобладающий вклад в термоэдс вносит диффузионное движение фононов. Вклад дрейфового движения мал, в максимуме  $|\alpha|$  он составляет 21% от диффузионного вклада. В противоположность этому для <sup>70</sup>Ge (99.99%) дрейфовый вклад в термоэдс увлечения доминирует. Он превышает диффузионный в 6 раз. Из этого следует, что, действительно, изотопический эффект в термоэдс Ge связан с дрейфовым движением тепловых фононов. Как уже отмечалось при анализе теплопроводности



**Рис. 5.** Зависимости термоэдс увлечения от температуры ( $E_{0L} = 4$  эВ). Кривая 1 — для германия с натуральным изотопным составом ( $m_e = m_0$ ,  $N_d = 4 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ ), 2 — для германия с 99.99 %  $^{70}\text{Ge}$  ( $m_e = m_0$ ,  $N_d = 2 \cdot 10^{13} \text{ см}^{-3}$ ) в направлении [111], 3 — для германия с 99.99 %  $^{70}\text{Ge}$  ( $m_e \approx 0.9m_0$ ,  $N_d = 2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$ ) в направлении [100]; точки — экспериментальные данные

сти кристаллов Ge и Si с различным изотопным составом [22, 23], уменьшение степени изотопического беспорядка приводит к резкому увеличению вклада дрейфового движения продольных фононов в теплопроводность. Этот же эффект проявляется и в термоэдс увлечения.

На рис. 5 приведены теоретические и экспериментальные температурные зависимости термоэдс увлечения для  $^{nat}\text{Ge}$  и  $^{70}\text{Ge}$  (99.99%). Как видно из рисунка, представленная теория качественно объясняет изотопический эффект в термоэдс: максимальные значения  $|\alpha_{max}|$  при переходе от  $^{nat}\text{Ge}$  к  $^{70}\text{Ge}$  (99.99%) увеличиваются в 1.3 раза для значения  $m_e \approx 0.22m_0$  и в 2.25 раза для  $m_e \approx m_0$ , что фактически совпадает с экспериментально наблюдаемым увеличением в направлении [111]. Это может указывать на преобладающую роль одного из четырех эллипсоидов с максимальной эффективной массой вдоль направления [111]. Однако положение максимумов для  $^{nat}\text{Ge}$  (см. рис. 3, 4, 5) оказывается сдвинутым в область низких температур:  $T_{max} \approx 6$  К, тогда как эксперимент дает  $T_{max} \approx 17$  К. Для  $^{70}\text{Ge}$  (99.99%) расчет дает  $T_{max} \approx 10$  К, экспериментально наблюдается  $T_{max} \approx 15$  К. При расчете термоэдс в направлении [100] (см. рис. 5, кривая 3) константа деформационного потенциала не варьирова-

лась, а скорости звука, согласно [31], были взяты  $s_L = 4.92 \cdot 10^5 \text{ см/с}$  и  $s_t = 3.55 \cdot 10^5 \text{ см/с}$ . В этом случае изотопический эффект в термоэдс при той же константе деформационного потенциала оказался на 35 % меньшим, что может указывать на некоторую анизотропию термоэдс увлечения.

Следует отметить, что в расчетах термоэдс увлечения учитывался только вклад продольных фононов. Проведенный анализ показал, что в рамках принятых приближений изотопический эффект для поперечных фононов мал, и при переходе от  $^{nat}\text{Ge}$  к высокообогащенному германию этот вклад увеличивается примерно на 10%. Это связано с преобладающей ролью диффузионного движения поперечных фононов (см. подробнее [22]). Поэтому в данном анализе вкладом поперечных фононов мы пренебрегли, хотя положение максимума  $|\alpha_{ph}^t|$  находится примерно при 20–22 К. Учет этого вклада мог бы заметно улучшить согласие рассчитанных кривых с экспериментальными данными при температурах выше максимума. Однако введение дополнительного подгоночного параметра теории вряд ли что-либо добавило бы к физическому содержанию данной работы.

## 6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Итак, в данной работе интерпретирована экспериментально обнаруженная сильная зависимость термоэдс кристаллов германия от изотопного состава. Развита теория увлечения электронов фононами в полупроводниках с невырожденной статистикой носителей тока, учитывающая влияние дрейфового движения фононов, связанного с нормальными процессами рассеяния фононов. Дано качественное объяснение изотопического эффекта в термоэдс увлечения. Показано, что этот эффект связан с дрейфовым движением фононов, которое оказывается весьма чувствительным к изотопическому беспорядку в кристаллах германия. Проанализирована роль неупругости электрон-фононного рассеяния в термоэдс увлечения в полупроводниках. Показано, что строгий учет неупругого рассеяния электронов приводит к значительному (более чем в два раза) уменьшению абсолютных значений термоэдс увлечения. По нашему мнению, приближение изотропной зоны для электронов проводимости, а также предположение о равенстве дрейфовых скоростей длинноволновых и тепловых фононов не позволили добиться количественного согласия с экспериментальными данными по термоэдс увлечения, в отличие от расчетов теплопроводности [22].

Учет обоих перечисленных факторов требует значительных математических усилий. Прежде всего необходимо рассмотреть отдельно релаксацию длинноволновых и тепловых фононов и проанализировать механизм нормальных процессов рассеяния Саймонса, который приводит к перераспределению импульса между тепловыми и длинноволновыми фононами различных колебательных ветвей.

Авторы выражают благодарность А. П. Танкееву за обсуждение результатов работы и критические замечания.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (гранты №№ 00-02-16299, 01-02-17469), CRDF (грант № RP2-2274), а также фонда «Династия» и МЦФФМ.

## ЛИТЕРАТУРА

1. K. Itoh, W. L. Hansen, E. E. Haller et al., *J. Mater. Res.* **8**, 1341 (1993).
2. В. И. Ожогин, А. В. Инюшкин, А. Н. Талденков и др., *Письма в ЖЭТФ* **63**, 463 (1996).
3. M. Asen-Palmer, K. Bartkowski, E. Gmelin et al., *Phys. Rev. B* **56**, 9431 (1997).
4. А. П. Жернов, Д. А. Жернов, *ЖЭТФ* **114**, 1757 (1998).
5. А. П. Жернов, *ФТТ* **41**, 1185 (1999).
6. C. Herring, *Phys. Rev.* **96**, 1163 (1954).
7. В. М. Аскеров, *Электронные явления переноса в полупроводниках*, Наука, Москва (1985), с. 318.
8. И. М. Цидильковский, *Термомагнитные явления в полупроводниках*, Наука, Москва (1960).
9. П. С. Зырянов, М. И. Клиггер, *Квантовая теория явлений электронного переноса в кристаллических полупроводниках*, Наука, Москва (1976), с. 480.
10. И. Г. Кулеев, *ФММ* **90**, 14, 1 (2000).
11. И. Г. Кулеев, *ФТТ* **42**, 649 (2000); *ФТТ* **44**, 215 (2002).
12. В. А. Козлов, Э. Л. Нагаев, *Письма в ЖЭТФ* **13**, 639 (1971).
13. А. А. Бельчик, В. А. Козлов, *ФТП* **20**, 53 (1986).
14. В. С. Оскотский, А. М. Погарский, И. Н. Тимченко, С. С. Шалыт, *ФТТ* **10**, 3247 (1968).
15. А. Н. Талденков, А. В. Инюшкин, В. И. Ожогин и др., *Труды IV конференции «Физико-химические процессы при селекции атомов и молекул»*, Звенигород (1999), Изд-во ТРИНИТИ, Троицк, Московская обл. (1999), с. 243.
16. J. Callaway, *Phys. Rev.* **113**, 1046 (1959).
17. Р. Берман, *Теплопроводность твердых тел*, Мир, Москва (1979), с. 288.
18. Б. М. Могилевский, А. Ф. Чудновский, *Теплопроводность полупроводников*, Наука, Москва (1972), с. 536.
19. S. Simons, *Proc. Phys. Soc.* **82**, 401 (1963); **83**, 799 (1963).
20. C. Herring, *Phys. Rev.* **95**, 954 (1954).
21. T. H. Geballe and G. W. Hull, *Phys. Rev.* **94**, 1134 (1954).
22. И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, *ЖЭТФ* **120**, 1952 (2001).
23. И. Г. Кулеев, И. И. Кулеев, *ЖЭТФ* **122**, 558 (2002).
24. Л. Э. Гуревич, И. Я. Коренблит, *ФТТ* **6**, 856 (1964).
25. И. Г. Ланг, С. Т. Павлов, *ЖЭТФ* **63**, 1495 (1972).
26. И. Г. Кулеев, *ФММ* **87**, 5 (1999).
27. И. Г. Кулеев, *ФТТ* **42**, 979 (2000).
28. E. Kaden and H.-L. Günter, *Phys. Stat. Sol. B* **126**, 733 (1984).
29. A. G. Samoilovich, I. S. Buda, and I. V. Dakhovski, *Phys. Stat. Sol.* **23**, 229 (1967).
30. А. Г. Самойлович, И. С. Буда, *ФТП* **3**, 400 (1969).
31. B. Truel, C. Elbaum, and B. B. Chick, *Ultrasonic Methods in Solid State Physics*, Academ. Press, New York and London (1969).