Письма в ЖЭТФ, том 53, вып. 5, стр. 254 - 257 10 марта 1991 г.

О ВОЗМОЖНОСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПРИПОВЕРХНОСТНОГО ИЗГИБА ЗОН В ПОЛУМЕТАЛЛАХ

В.А.Козлов, Е.Е.Нариманов, К.А.Сахаров

Московский физико-технический институт
141700, Долгопрудный

Поступила в редакцию 28 декабря 1990 г.
После переработки 6 февраля 1991 г.

Установлено, что поверхностный изгиб зон в полуметаллах определяет знаковые закономерности их термоэдс. Предложена экспериментальная ситуация по определению величины и знака поверхностного заряда.

Определение величины приповерхностного изгиба зон в полуметаллах имеет принципиальное значение для физики поверхностных явлений. В частности, наличие изгиба зон приводит к возникновению у поверхности области пространственного заряда, что существенно меняет характер отражения на ней носителей. В этих условиях часть носителей одного знака отражается зеркально от области пространственного заряда, тогда как другая часть и носители, имеющие противоположный заряд, рассеиваются собственно реальной поверхностью. Простые энергетические соображения показывают, что среди носителей, знак которых совпадает со знаком поверхностного заряда, границы раздела достигают лишь те, у которых угол между нормалью к поверхности и направлением скорости не превышает величины $\theta_м = \arccos(\sqrt{eU/E_F})$, где eU - значение приповерхностного изгиба зон, E_F - энергия Ферми.

Обычно о наличии поверхностного изгиба зон в полуметаллах судят по измерениям коэффициентов зеркальности электронов и дырок, в частности, в экспериментах по фокусировке носителей магнитным полем [1]. Однако в области температур кипения жидкого гелия описание поверхностного рассеяния с помощью одного параметра зеркальности не вполне адекватно [2].

В настоящей работе обращено внимание на принципиально иную ситуацию для определения величины приповерхностного изгиба зон в полуметаллах путем измерения термоэдс фононного увлечения в области сверхнизких температур. Существо дела состоит в следующем: в компенсированных материалах вследствие равенства концентраций электронов и дырок термоэдс фононного увлечения обращается в ноль, если рассеяние происходит только внутри электрон-фононной системы. В чистых совершенных монокристаллах поверхностное рассеяние носителей ведет к раскомпенсации системы и появлению среднего дрейфа фононов, в случае $d/l \ll 1$ пропорционального $d(1/l^+ - 1/l^-)$. В силу различного характера температурных зависимостей $l^+(T)$ и $l^-(T)$ существует T^0, при которой термоэдс опять обращается в ноль. В свою очередь возникновение пространственного заряда у поверхности ведет к появлению группы носителей, не достигающих поверхности и фактически зеркально отражающихся. Очевидно, что это приведет к изменению эффективной длины пробега, например, электронов (заряд отрицательный) и тем самым к сдвигу T^0 пропорционально их количеству, т.е. $\sim \cos\theta_м = \sqrt{eU/E_F}$.

Так как висмут является наиболее изученным материалом, для которого возможно строгое количественное построение теории кинетических явлений, соответствующие расчеты проведены на примере этого полуметалла. Поскольку в многодолинных материалах в условиях, когда между длиной свободного пробега относительно внутридолинного рассеяния l, диффузионной длиной L

и размером образца d имеет место неравенство $l < d < L$, кинетические коэффициенты определяются анизотропно-размерными эффектами [3], то дальнейшее рассмотрение касается только области температур, где $L > l > d$. В этих условиях междолинное рассеяние как в объеме, так и на поверхности практически не влияет на кинетические коэффициенты, поскольку носители тока не успевают проявить свою принадлежность другой долине до следующего столкновения с поверхностью.

В указанных условиях соответствующая система кинетических уравнений для неравновесных частей функций распределения носителей сорта $\alpha : \varphi^\alpha$ и фононов - χ имеет вид

$$v_z \partial\varphi^\alpha/\partial z - e^\alpha(\vec{E}\vec{v}) = \hat{I}\{\varphi^\alpha, \chi\}, \tag{1}$$

$$\frac{\partial F^0}{\partial T}\frac{\partial\omega}{\partial\vec{q}}\vec{\nabla}T = \hat{I}\{\chi, \chi\} + \sum_\alpha \hat{I}\{\varphi^\alpha, \chi\}. \tag{2}$$

Соответствующие граничные условия с учетом поверхностного изгиба зон $e^\alpha U$ и чисто диффузном рассеянии собственно поверхностью могут быть представлены следующим образом:

$$\varphi^{\lessgtr\alpha}(\pm d) = \varphi^{\gtrless\alpha}(\pm d), \quad v_z^2/2\epsilon_{zz}^\alpha < e^\alpha U,$$

$$\varphi^{\lessgtr\alpha}(\pm d) = B^\alpha, \quad v_z^2/2\epsilon_{zz}^\alpha > e^\alpha U, \tag{3}$$

где ϵ_{ik}^α - тензор обратных эффективных масс носителей долины α, а величины B^α находятся из условия интегрального баланса потоков:

$$< v_z\varphi^{>\alpha} >= - < v_z\varphi^{<\alpha} > .$$

Поскольку рассеяние носителей на фононах не является в рассматриваемой области температур упругим, решение системы (1), (2) было найдено вариационным методом. Для термоэдс фононного увлечения получим:

$$\alpha_{xx}^\Sigma = \frac{s^2\tau^{ph}}{T\sigma_{xx}^\Sigma}\sum_\alpha e^\alpha n_0^\alpha R_{xx}^{2\alpha}\left(1 - \frac{R_{xz}^{2\alpha}\sigma_{xz}^\alpha}{R_{xx}^{2\alpha}\sigma_{zz}^\alpha}\right)\times$$

$$\times(1 - (1 - \frac{3}{2}\lambda^\alpha + \frac{1}{2}(\lambda^\alpha)^3)\frac{l^\alpha}{2d}(1 - \exp(-2d/l^\alpha))), \tag{4}$$

где

$$\lambda^\alpha = \begin{cases} 1, & e^\alpha U \geq E_F^\alpha \\ \sqrt{e^\alpha U/E_F^\alpha}, & 0 \leq e^\alpha U \leq E_F^\alpha \\ 0, & e^\alpha U \leq 0 \end{cases}$$

τ^{ph} - эффективное время релаксации в фононной подсистеме, τ_{ik}^α - тензор "времен релаксации" носителей, который не отвечает временам релаксации упругого рассеяния, а соответствует τ при формальной записи проводимости в стандартной форме $\sigma = ne^2\tau/m$, σ_{xx}^Σ - суммарная проводимость системы, длина пробега $l^\alpha = \sqrt{2E_F^\alpha/\epsilon_{zz}^\alpha}(\tau/m)_{zz}^\alpha$, $R_{ik}^\alpha = (A^\alpha R A^{\alpha-1})_{ik}$ - преобразованная матрица R закона дисперсии фононов $\omega_{\vec{q}} = s|R\vec{q}|$. Соответствующее преобразование A^α выбирается таким образом, чтобы пространство $v_z > 0$ оставалось неизменным. n_0^α - концентрация носителей долины α.

Для дальнейшего анализа необходимо детальное знание температурной зависимости длин свободного пробега l^α электронов и дырок, которые могут быть вычислены методом, изложенным в [4]. Соответствующий анализ формулы (4) приведен на рисунке. Как это следует из представленных данных, термоэдс как функция температуры проходит через ноль. При этом значение T^0, при котором α^Σ_{xx} обращается в ноль, однозначно связано с величиной приповерхностного изгиба зон соотношениями:

$$\sqrt{-\frac{|e|U}{E_F^e}} = \frac{2}{3}\frac{\partial}{\partial T}\left[\sum_\alpha \frac{e^\alpha d}{|e^\alpha| l^\alpha}\right]\Big|_{T=T^*}(T^0 - T^*),\quad T^0 > T^*,$$

$$\sqrt{\frac{|e|U}{E_F^h}} = \frac{2}{3}\frac{\partial}{\partial T}\left[\sum_\alpha \frac{e^\alpha d}{|e^\alpha| l^\alpha}\right]\Big|_{T=T^*}(T^* - T^0),\quad T^0 < T^*. \tag{5}$$

Температура T^* определяется из условия $\alpha^\Sigma_{xx} = 0$ в отсутствие поверхностного заряда и зависит лишь от ориентации исследуемого образца относительно кристаллографической системы координат. В частности, для висмута, если нормаль к поверхности параллельна оси C_3, $T^* = 0,66$ К $\partial/\partial T[\sum_\alpha e^\alpha/|e^\alpha|l^\alpha]|_{T=T^*} =$ $0,8$ см$^{-1}$, а когда перпендикулярна поверхности ось C_2, $T^* = 0,67$ К, $\partial/\partial T[\sum_\alpha e^\alpha/|e^\alpha|l^\alpha]|_{T=T^*} = 0,6$ см$^{-1}$. Следует отметить, что полученные здесь численные значения слабо зависят от метода решения, поскольку уже при $T/\Theta_D = 0,1$, где Θ_D - температура Дебая, вариационный метод дает ошибку в вычислении кинкоэффициентов менее 1%, а при рассматриваемых температурах эта точность еще выше [4]. Подчеркнем, что сам вид функциональной зависимости (5) при этом не изменится.

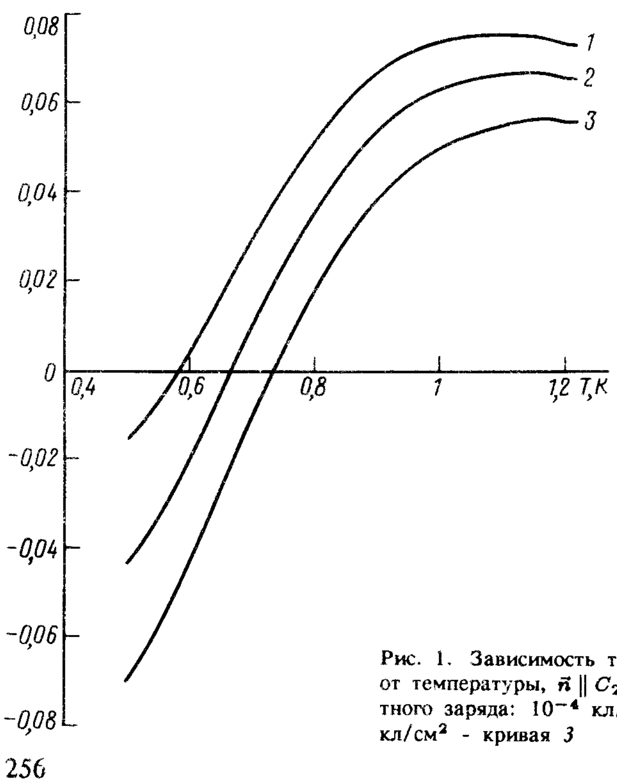

Рис. 1. Зависимость термоэдс (в единицах $s^2\tau^{ph}|e|n_0/T\sigma^\Sigma_{xx}$) от температуры, $\vec{n} \parallel C_2$, $d = 0,5$ см для плотности поверхностного заряда: 10^{-4} кл/см^2 - кривая *1*, 0 - кривая *2*, - 10^{-4} кл/см^2 - кривая *3*

Таким образом, исследование температурной зависимости термоэдс фононного увлечения в области сверхнизких температур позволяет, на наш взгляд, установить величину и знак поверхностного изгиба зон. Как показывает расчет (рисунок), обращение α_{xx}^{Σ} в ноль происходит в области температур $T = 0,5 - 0,8$ K. Согласно данным работы [5], в этом температурном диапазоне термоэлектродвижущая сила висмута существенно превышает диффузионную термоэдс и, более того, остается доминирующей вплоть до 0,05 K.

Литература

1. Свекло И.Ф., Цой В.С. Письма в ЖЭТФ, 1989, 49, 290.
2. Эдельман В.С., Каганов М.Н. Электроны проводимости. М.: Наука, 1985, 416 с.
3. Рашба Э.И. ЖЭТФ, 1965, 48, 1427.
4. Бельчик А.А., Козлов В.А., Лавренюк М.Ю., Минина Н.Я. ЖЭТФ, 1990, 98, 298.
5. Uher C., Pratt W. J.Phys., 1978, 8, 1979.