



УДК 537

П. В. Горський

Діагностика функціональних матеріалів із замкненими поверхнями Фермі, описуваних моделлю Фіваза, та деякі аспекти їх застосування

(Представлено академіком НАН України Л. І. Анатичуком)

Наведено результати теоретичних досліджень впливу непараболічності, описуваної моделлю Фіваза, на властивості шаруватих функціональних матеріалів із замкненими поверхнями Фермі. Теоретичні розрахунки поздовжніх кінетичних коефіцієнтів для ряду моделей часу релаксації як у квантуючому магнітному полі, перпендикулярному до шарів, так і за його відсутності, виконано для двох випадків: моделі Фіваза та наближення ефективної маси. Показано, що ефекти, пов'язані з непараболічністю, можуть виявлятися не лише у випадку відкритих поверхонь Фермі, як це традиційно вважається, але й у випадку замкнених поверхонь Фермі. Це є сприятливим фактором для діагностики таких матеріалів за польовими та температурними залежностями їх кінетичних коефіцієнтів. Загальні співвідношення, на основі яких виконувалися розрахунки, не можуть бути отримані в рамках традиційних підходів. Додатково досліджено вплив непараболічності, описуваної моделлю Фіваза, на властивості монокристалічних та порошкових термоелектричних матеріалів. На основі цих досліджень запропоновано термоелектричні матеріали, оптимізовані за гранулометричним складом порошку та зонним спектром.

Застосування функціональних матеріалів для створення тих або інших елементів, приладів і систем передбачає опис, пояснення та прогнозування їх властивостей, в тому числі на основі певних модельних уявлень про зонний спектр матеріалів. У ряді випадків зона структура матеріалу прямо визначає сферу його застосування. Зокрема, важливу роль у функціональній електроніці відіграють шаруваті матеріали, або матеріали з надграткою, описувані моделлю Фіваза [1].

$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m^*}(k_x^2 + k_y^2) + \Delta(1 - \cos ak_z). \quad (1)$$

У даній формулі k_x , k_y , k_z — відповідні компоненти квазіімпульсу; m^* — маса носіїв струму в площині шарів; Δ — ширина вузької міні-зони провідності, яка описує рух носіїв струму в площині шарів; a — віддаль між трансляційно еквівалентними шарами; решта позначень загальноприйняті.

© П. В. Горський, 2014

Ці матеріали застосовуються при створенні нелінійних функціональних елементів, зокрема підсилювачів електромагнітних хвиль, приймачів електромагнітного випромінювання, які ґрунтуються на радіоелектричному ефекті, генераторів та змішувачів терагерцового діапазону, приладів, що базується на використанні солітонів та бризерів, а також на явищі самоіндукованої прозорості [2, 3]. В багатьох випадках квазідвовимірні провідники, описувані моделлю Фіваза або моделями, близькими до неї, розглядаються як потенційні високотемпературні надпровідники [4].

Більшість дослідників вважає, що ефекти непараболічності, пов'язані з вузькістю міні-зони, виявляються лише тоді, коли енергія Фермі ζ_0 носіїв заряду при абсолютному нулі температури задовольняє умову $\zeta_0/2\Delta \gg 1$, тобто коли поверхні Фермі (ПФ) цих матеріалів є *сильно відкритими*. Саме для таких шаруватих матеріалів побудовано, наприклад, теорії провідності та термоЕРС у квантуючому магнітному полі [5, 6]. Такі матеріали порівняно просто діагностуються при наявності биття осциляцій Шубнікова-де Гааза (ШДГ) та де Гааза-ван Альфена (ДГВА), а також термоЕРС. В той же час достовірних критеріїв розрізнення функціональних матеріалів із *замкненими або перехідними* ПФ, описуваних моделлю Фіваза, тобто таких, для яких $\zeta_0/2\Delta \leq 1$, на даний час не встановлено. Однак для функціонування ряду приладів, зокрема таких, які ґрунтуються на радіоелектричному ефекті, а також на явищі самоіндукованої прозорості, важлива така концентрація носіїв заряду, при якій їх ступінь виродження невеликий або вони є невиродженими. Тому дану роботу присвячено опису деяких теоретичних засад діагностики та аспектів застосування функціональних матеріалів, описуваних моделлю Фіваза, за умови *замкненості* їх ПФ.

Діагностика функціональних матеріалів із замкненими ПФ, описуваних моделлю Фіваза. *Загальні співвідношення.* У роботі [7] автор даного повідомлення отримав такий вираз для поздовжньої електропровідності шаруватого функціонального матеріалу у квантуючому магнітному полі для випадку, коли квантуюче магнітне та електричне поля перпендикулярні до площини шарів, а час релаксації поздовжнього квазіімпульсу (з точки зору залежності від квантових чисел) залежить лише від цього квазіімпульсу і не осцилює зі зміною магнітного поля:

$$\sigma_{zz} = \sigma_0 + \sigma_{os} + \sigma_{mr}. \quad (2)$$

У цій формулі відповідні складові електропровідності визначаються так:

$$\sigma_0 = \frac{16\pi^2 e^2 m^* a}{h^4} \int_{W(x) \leq \zeta} \tau(x) W'^2(x) dx, \quad (3)$$

$$\sigma_{os} = \frac{32\pi^2 e^2 m^* a}{h^4} \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l f_l^\sigma \int_{W(x) \leq \zeta} \tau(x) W'^2(x) \cos\left(\pi l \frac{\zeta - W(x)}{\mu^* B}\right) dx, \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{mr} = & \frac{16\pi^2 e^2 m^* a}{h^4} \sum_{l=1}^{\infty} (-1)^l h_l^\sigma \left[\int_{W(x) \leq \zeta} \tau(x) W'^2(x) \exp\left(l \frac{W(x) - \zeta}{kT}\right) dx - \right. \\ & \left. - \int_{W(x) \geq \zeta} \tau(x) W'^2(x) \exp\left(\frac{\zeta - W(x)}{kT}\right) dx \right]. \quad (5) \end{aligned}$$

У формулах (3)–(5) $x = ak_z$, $\tau(x)$ — час релаксації поздовжнього квазіімпульсу; $W(x)$ — закон дисперсії носіїв заряду у напрямку, перпендикулярному до шарів; $\mu^* = \mu_B m_0 / m^*$, μ_B — магнетон Бора; B — індукція магнітного поля, крім того,

$$f_l^\sigma = \frac{\pi^2 l k T / \mu^* B}{\text{sh}(\pi^2 l k T / \mu^* B)}, \quad h_l^\sigma = \frac{l \mu^* B / k T}{\text{sh}(l \mu^* B / k T)}. \quad (6)$$

Таким чином, повна поздовжня провідність шаруватого функціонального матеріалу у квантуючому магнітному полі містить три складові: сталу, осцилюючу і неосцилюючу відносно магнітного поля. Зауважимо, що формула (4) для осцилюючої частини електропровідності явним чином враховує той факт, що при зникненні ПФ, тобто у невиродженому газі носіїв заряду, осциляції ДГШ відсутні. Формули (3)–(5) не можуть бути отримані у традиційному квазікласичному наближенні, для якого не є істотними ні конкретний характер закону дисперсії носіїв заряду у напрямку, перпендикулярному до шарів, ні скінченна протяжність ПФ уздовж напрямку магнітного поля.

Діагностика за ефектом Шубнікова–де Гааза (ШДГ). З метою встановлення критеріїв розрізнення функціональних матеріалів із замкненими ПФ, описуваних моделлю Фіваза, всі розрахунки за формулами (3)–(5) виконувались для двох випадків, а саме: для випадку, коли у відповідності з (1) $W(x)$ — косинусоїдальний закон, і для випадку, коли у $W(x)$ зроблено наближення ефективної маси. При цьому розглядалося чотири випадки модельних залежностей $\tau(x)$: наближення сталого часу релаксації $\tau(x) \equiv \tau_0$, наближення сталої довжини вільного пробігу, коли $\tau(x) \propto v_f^{-1}(x)$, а також моделі $\tau(x) \propto v_f(x)$ та $\tau(x) \propto v_z(x)$ [8]. Наближення $\tau(x) \equiv \tau_0$ є найпростішим, але воно часто застосовується для опису розсіювання носіїв заряду у кристалах з надграткою, оскільки вважається підтвердженим експериментально. Наближення $\tau(x) \propto v_f^{-1}(x)$, де $v_f(x)$ — швидкість носіїв заряду на ПФ, застосовне для випадку розсіювання на іонізованих домішках при низьких температурах. Наближення $\tau(x) \propto v_f(x)$ справедливе у випадку розсіювання на деформаційному потенціалі акустичних фононів. Наближення $\tau(x) \propto v_z(x)$ застосовне для обох зазначених випадків поблизу ультраквантової границі. Крім того, у квазікласичній області магнітних полів, тобто при $\mu^* B / \Delta \ll 1$, зазначені розрахунки доповнювались розрахунками осцилюючої частини поздовжньої електропровідності в рамках традиційного квазікласичного підходу [9], коли час релаксації вважається обернено пропорційним до повної щільності станів у магнітному полі, і, отже, є осцилюючою функцією магнітного поля та залежить від енергії носіїв заряду в цілому, а не від їх поздовжнього квазіімпульсу. Однак традиційна методика модифікувалася шляхом явного врахування конкретного закону дисперсії носіїв заряду та скінченної протяжності ПФ уздовж напрямку магнітного поля. Встановлено, що в усіх випадках замкнених ПФ за умови сталості концентрації носіїв заряду в рамках моделі Фіваза має місце зменшення частоти осциляцій ШДГ і їх відставання за фазою порівняно з наближенням ефективної маси. Це явище зумовлене тим, що при одній і тій же енергії щільність станів в моделі Фіваза більша, ніж у наближенні ефективної маси. Форма осциляцій та їх відносний вклад істотно залежать не лише від конкретного закону дисперсії $W(x)$, а й від того, як саме моделюється залежність $\tau(x)$. Значна відмінність даних результатів від результатів, отриманих у рамках модифікованого традиційного підходу, полягає в тому, що при умові $\tau = \tau(x)$ відносний вклад осциляцій ШДГ у рамках моделі Фіваза більший, ніж у наближенні ефективної маси, в той час як в рамках традиційного підходу цей вклад менший. З іншого боку, як у моделі Фіваза, так і у наближенні ефективної маси, відносний вклад осциляцій ШДГ, отриманий у рамках модифікованого традиційного

підходу, при умови $\mu^*B/\Delta \ll 1$ є більшим, ніж у рамках будь-якої з розглянутих моделей $\tau = \tau(x)$. Таким чином, виконання умов справедливості традиційного підходу до розгляду розсіювання носіїв заряду у квантуючому магнітному полі не заважає, а сприяє діагностиці функціональних матеріалів із замкненими ПФ, описуваних моделлю Фіваза. В усіх випадках відмінність між залежностями, одержаними в рамках моделі Фіваза і в наближенні ефективної маси, зростає зі збільшенням концентрації носіїв заряду.

Діагностика у полях поблизу ультраквантової границі. Поряд з осциляціями провідності у слабких квантуючих магнітних полях розглядалась її залежність від магнітного поля у більш сильних магнітних полях, коли моделі $\tau = \tau(x)$ справедливі. Виявилось, що в цьому випадку для моделі Фіваза має місце локальний максимум електропровідності [8, 10], який виражений тим краще, чим більша концентрація носіїв заряду. У наближенні ефективної маси такий максимум не спостерігається. Цей максимум найбільш яскраво виражений у випадку $\tau(x) \propto v_f(x)$, тобто за умови розсіювання носіїв заряду на акустичних фонах, а найменш яскраво — у випадку $\tau(x) \propto v_f^{-1}(x)$, тобто за умови розсіювання носіїв заряду на заряджених домішках. Однак навіть і у випадку розсіювання носіїв заряду на заряджених домішках в області найбільш яскравого прояву непараболічності, описуваної моделлю Фіваза, зменшення електропровідності при зростанні магнітного поля в моделі Фіваза більш повільне, ніж у наближенні ефективної маси. При розгляданні провідності в сильних магнітних полях у виродженому газі носіїв заряду враховувався також стиск ПФ у напрямку квантуючого магнітного поля, пов'язаний з конденсацією носіїв заряду на найнижчому рівні Ландау. Цей стиск веде до різкого зниження поздовжньої електропровідності матеріалу після максимуму провідності, причому залежність провідності від індукції магнітного поля є ступеневою і показник ступеня залежить від моделі часу релаксації. При цьому він однаковий як у моделі Фіваза, так і в наближенні ефективної маси, але коефіцієнти пропорційності різні внаслідок відмінності енергій Фермі за умови сталості концентрації носіїв заряду.

Діагностика за неосцилюючою частиною магнітоопору. За умов слабого і проміжного виродження, коли осциляції ШДГ виражені слабо або відсутні, залежність поздовжньої електропровідності від магнітного поля цілком визначається залежністю від нього неосцилюючої складової у відповідності з формулою (5). В цьому випадку знак і величина магнітоопору визначаються двома конкуруючими процесами теплової активації носіїв заряду: з нижніх рівнів Ландау на рівень хімічного потенціалу і з рівня хімічного потенціалу на верхні рівні Ландау. Якщо домінує перший процес, магнітоопір є від'ємним, а якщо другий — додатним. На співвідношення між цими процесами впливає не лише зонна структура матеріалу, а й відношення відстані між рівнями Ландау до енергії теплового руху. Виявляється, що при певних температурах порядку ширини міні-зони в моделі Фіваза при всіх концентраціях носіїв заряду має місце стійкий від'ємний магнітоопір, в той час як у наближенні ефективної маси він може бути додатним, а якщо він і є від'ємним, то виражений істотно слабше, ніж у моделі Фіваза [8].

Діагностика за польовими залежностями термоЕРС та фактора потужності. Керування властивостями термоелектричних матеріалів за допомогою поздовжнього магнітного поля. Діагностика матеріалів із замкненими ПФ, описуваних моделлю Фіваза, можлива також за польовими залежностями поздовжньої термоЕРС та фактора потужності. Розрахунки показують, що для всіх розглянутих моделей $\tau = \tau(x)$ у квазікласичній області магнітних полів в моделі Фіваза має місце відставання осциляцій термоЕРС за фазою і збільшення їх відносного вкладу порівняно з наближенням ефективної маси,

хоча в цілому термоЕРС у наближенні ефективної маси більша, ніж в моделі Фіваза. Така відмінність зумовлена тим, що будь-яке обмеження розкиду носіїв заряду за енергіями повинно зменшувати модуль термоЕРС. В більш сильних магнітних полях поблизу ультраквантової границі існує такий інтервал магнітних полів, де відмінності між моделлю Фіваза і наближенням ефективної маси виражені найяскравіше. Так само, як і у випадку з електропровідністю, ці відмінності найбільше виражені за умов розсіювання носіїв заряду на акустичних фонах, а найменше — за умов розсіювання на іонізованих домішках. Ці відмінності тим більші, чим більша концентрація носіїв заряду. В більш сильних магнітних полях модуль термоЕРС має максимум, тому що, з одного боку, цей модуль малий при низьких температурах у слабких магнітних полях, а з іншого, — він повинен зменшуватись і у сильних магнітних полях за рахунок стиску ПФ. Однак концентрація носіїв заряду і характер їх руху перпендикулярно до площини шарів слабо впливають на величину і положення цього максимуму. Проте, в моделі Фіваза він дещо більший і зміщений у бік слабших магнітних полів у порівнянні з наближенням ефективної маси. В ультраквантових магнітних полях внаслідок стиску ПФ для всіх моделей $\tau = \tau(x)$ термоЕРС спадає зі зростанням індукції магнітного поля за законом оберненого квадрата.

Діагностика за польовими залежностями фактора потужності в квантуючих магнітних полях за умови сильного виродження електронного газу ґрунтується на тому, що, як показують розрахунки, у квазікласичних магнітних полях для всіх моделей $\tau = \tau(x)$ в моделі Фіваза має місце відставання осциляцій фактора потужності за фазою і збільшення їх відносного вкладу порівняно з наближенням ефективної маси. В більш сильних полях непараболічність, описувана моделлю Фіваза, за умови замкненості ПФ веде до зменшення величини максимуму фактора потужності і округлення форми відповідного піку порівняно з наближенням ефективної маси [11].

За умов слабого і проміжного виродження модуль термоЕРС та величина фактора потужності визначаються тими ж процесами теплової активації носіїв заряду, що й неосцилююча частина поздовжньої електропровідності. Тому існують такі, взагалі кажучи, різні за величиною, оптимальні значення індукції магнітного поля, при яких модуль термоЕРС і величина фактора потужності відповідно досягають максимуму. Тому, якщо ефективні маси носіїв заряду в площині шарів незначні, то *існує можливість керування властивостями шаруватих термоелектричних матеріалів за допомогою поздовжнього (відносно градієнта температури та електричного струму) магнітного поля*. Однак, оскільки непараболічність, описувана моделлю Фіваза, знижує величину максимуму фактора потужності та ступінь його вираження в порівнянні з наближенням ефективної маси, то з цієї точки зору більш вигідними є термоелектричні матеріали з параболічним або слабо відмінним від параболічного законом дисперсії носіїв заряду.

Діагностика за температурними залежностями кінетичних коефіцієнтів за відсутності магнітного поля. Діагностика матеріалів із замкненими ПФ, описуваних моделлю Фіваза, за залежністю їх поздовжніх кінетичних коефіцієнтів від температури за відсутності магнітного поля, як показують розрахунки, може ґрунтуватись на наступному. По-перше, анізотропія електропровідності шаруватих матеріалів, описуваних моделлю Фіваза, істотно більша, ніж у наближенні ефективної маси. По-друге, термоЕРС матеріалів, описуваних моделлю Фіваза, у напрямку, перпендикулярному до шарів, за інших рівних умов повинна бути меншою, ніж у наближенні ефективної маси. По-третє, враховуючи протилежний характер змін термоЕРС та електропровідності з температурою, на температурній залежності фактора потужності повинен спостерігатися максимум, який в моделі

Фіваза має меншу величину і менше різко виражений, ніж у наближенні ефективної маси. Основна причина усіх зазначених відмінностей полягає в тому, що врахування скінченності ширини міні-зони провідності зменшує як термоЕРС, так і провідність у напрямку, перпендикулярному до шарів. Зауважимо, що розрахунки, на підставі яких зроблено дані висновки, виконувались для моделей сталого часу релаксації і часу релаксації, обернено пропорційного до густини станів носіїв заряду за відсутності магнітного поля.

Діагностика зарядово-впорядкованих функціональних матеріалів. Зарядово-впорядковані шаруваті функціональні матеріали можна поділити на матеріали з впорядкуванням у площині шарів і матеріали з міжшаровим впорядкуванням. Вважається, що в основному має місце впорядкування у площині шарів, але в попередніх роботах, зокрема [12], показано, що може мати місце і міжшарове впорядкування, яке полягає у простому чергуванні шарів з різними електронними густинами і яке розглядається у даній роботі. Причиною останнього є взаємодія носіїв заряду з коливаннями шарів як цілого в їх площині. Відрізнити два типи впорядкування можна, зокрема, за характером зміни анізотропії електропровідності в процесі фазового відповідного переходу другого роду. Якщо вона зростає, має місце міжшарове зарядове впорядкування, якщо ж спадає — впорядкування у площині шарів. За умови фазового переходу з неупорядкованого стану у зарядово-впорядкований відбувається топологічний перехід від замкненої поверхні до відкритої зі зменшенням ширини вузької міні-зони провідності. Внаслідок цього при температурах, нижчих за критичну температуру переходу, має місце біперіодичний характер осциляцій ШДГ у квазікласичних магнітних полях та збільшення їх відносного вкладу. У більш сильних магнітних полях, в тому числі внаслідок польової залежності хімічного потенціалу та параметра впорядкування, який описує нерівномірність заповнення шарів електронами, повинна спостерігатись послідовність максимумів та нулів поздовжньої електропровідності [13]. З цієї точки зору поведінка зарядово-впорядкованого шаруватого матеріалу у магнітному полі подібна до поведінки системи з напівпровідникових та діелектричних шарів, які чергуються. Отже, прозорість зарядово-впорядкованого кристала можна керувати за допомогою магнітного поля.

Осциляції термоЕРС у квазікласичних магнітних полях також мають біперіодичний характер. У більш сильних магнітних полях термоЕРС зарядово-впорядкованого матеріалу різко зростає і має місце ряд послідовних перемикань її полярності, узгоджених з польовою залежністю хімічного потенціалу. Після останнього перемикання полярності термоЕРС зарядово-впорядкованого функціонального матеріалу різко знижується за законом оберненого квадрата [14].

У випадку, коли осциляції ШДГ відсутні, має місце монотонна залежність поздовжнього магнітоопору зарядово-впорядкованого матеріалу від магнітного поля, причому спостерігається інверсія магнітоопору залежно від величини відношення W_0/ζ_{02D} , де W_0 — величина ефективної притягуючої взаємодії, яка веде до міжшарового зарядового впорядкування; ζ_{02D} — енергія Фермі ідеального двовимірного Фермі-газу при абсолютному нулі температури. А саме, у випадку $1 < W_0/\zeta_{02D} \leq 2$ магнітоопір є додатним, а при подальшому зростанні взаємодії він спочатку зменшується до нуля, а потім стає від'ємним. Модуль термоЕРС та фактор потужності в цьому випадку є монотонно спадними функціями магнітного поля.

За відсутності магнітного поля для всіх розглянутих моделей часу релаксації при температурах, нижчих за критичні, електропровідність, термоЕРС та фактор потужності набагато менші, ніж при вищих температурах. Це відбувається тому, що у зарядово-впорядкованому стані має місце сильне обмеження руху носіїв заряду у напрямку, перпендикулярному до

шарів, а також обмеження їх розкиду за енергіями. При досягненні температури фазового переходу на всіх зазначених залежностях спостерігаються злами, характерні для фазових переходів 2-го роду.

Вплив непараболічності, описуваної моделлю Фіваза, на властивості термоелектричних матеріалів на основі порошків. Аналіз впливу класичних розмірних ефектів на властивості термоелектричних матеріалів, отримуваних на основі порошків, свідчить, що принаймні в рамках моделі Дебая для густини фононних станів при кожній температурі існує такий оптимальний найбільш ймовірний радіус частинки порошку, при якому термоелектрична добротність матеріалу найбільша. Однак цей результат можна одержати лише за умови врахування впливу частоти фононів на розсіювання їх на межах частинок матеріалу та контактів між ними. В рамках моделі сталої довжини вільного пробігу фононів оптимального радіуса частинок не існує. Все перелічене дає можливість запропонувати новий клас функціонально-градієнтних термоелектричних матеріалів на основі порошків змінного гранулометричного складу, крупність яких узгоджено зі зміною температури вздовж термоелектричної гілки [8, 15].

Однак слід зазначити, що непараболічність, описувана моделлю Фіваза, внаслідок обмеження міжшарового руху носіїв заряду та їх розкиду за енергіями негативно впливає на фактор потужності та добротність термоелектричного матеріалу. Розрахунки показують, що якщо закон дисперсії носіїв заряду параболичний і зона провідності вважається нескінченною, то шляхом оптимізації гранулометричного складу порошкового матеріалу його відносну термоелектричну ефективність можна підвищити у 1,2–1,7 рази порівняно з монокристалічним матеріалом. Але непараболічність, описувана моделлю Фіваза, знижує цей показник до рівня 0,8–1,2 порівняно з монокристалічним матеріалом з параболичним зонним спектром.

Оптимізація термоелектричних матеріалів за типом непараболічності зонної структури. Враховуючи вищесказане, поряд з моделлю Фіваза було проаналізовано так звану модель ідеальної непараболічності, у відповідності з якою міні-зона, що описує рух носіїв заряду між шарами, має скінченну ширину, але параболичний закон дисперсії зберігається в усьому інтервалі поздовжнього квазіімпульсу аж до меж одновимірної зони Брілюєна. Така міні-зона, на відміну від описуваної моделлю Фіваза, не має ділянок з від'ємною ефективною масою. Внаслідок цього, як показано розрахунками в рамках моделі сталої довжини вільного пробігу носіїв заряду, при зростанні відношення ефективних мас перпендикулярно до шарів і в площині шарів термоЕРС в площині шарів зменшується, але електропровідність в цій площині істотно зростає. Тому зростає як фактор потужності, так і термоелектрична добротність такого матеріалу. З одного боку, отримані результати пояснюють відсутність стабільних, позитивних з прикладної термоелектричної точки зору, зрушень у дослідях з надгратками та наногетероструктурами з квантовими ямами. Суть тут полягає в тому, що зонний спектр таких квазідвовимірних систем описується моделлю Фіваза. З іншого боку, якби можна було реалізувати цілком аналогічні системи, зонний спектр яких описувався б моделлю ідеальної непараболічності, добротність термоелектричних матеріалів, у тому числі на основі порошків, можна було б істотно збільшити.

Ще один важливий аспект застосування *термоелектричних* матеріалів з непараболічним зонним спектром пов'язаний з електричним контактним опором метал–термоелектричний матеріал, величина якого може істотно впливати на вихідні параметри та характеристики термоелектричних генераторів та охолоджувачів. Вважається, що за інших рівних умов зазначений контактний опір тим менший, чим менший питомий опір термоелектричного

матеріалу. Отже, з цієї точки зору застосування матеріалів, описуваних моделлю Фіваза, як “генераторних” або “охолоджувальних” недоцільне. Однак з цієї ж причини застосування для створення генераторів або охолоджувачів матеріалів, описуваних моделлю ідеальної непараболічності, уявляється вельми доцільним.

Автор висловлює подяку акад. НАН України Л. І. Анатичуку за запропоновану тему, конструктивне та корисне обговорення результатів та представлення роботи.

1. *Fivaz R. F.* Theory of layer structures // J. Phys. Chem. Solids. – 1967. – **28**, No 5. – P. 839–845.
2. *Басс Ф. Г., Булгаков А. А., Тетервов А. П.* Высокочастотные свойства полупроводников со сверхрешетками. – Москва: Наука, 1989. – 288 с.
3. *Кадушкин В. И., Ивашова Т. А.* Гетероструктура с 2D-электронами как датчик Холла // Физика и техника полупроводников. – 1991. – **25**, вып. 3. – С. 566–568.
4. *Kartsovnik M. V., Laukhin V. N., Shchegolev I. F.* Study of the superconducting transitions in two modifications of β -(BEDT-TTF)₂I₃ on the basis of diamagnetic screening signal // Sov. Phys. JETP. – 1986. – **63**, No 6. – P. 1273–1275.
5. *Песчанский В. Г.* Гальваномагнитные явления в органических слоистых проводниках // Журн. эксперим. и теорет. физики. – 2002. – **121**, вып. 5. – С. 1204–1212.
6. *Кириченко О. В., Крстовска Д., Песчанский В. Г.* Термоэлектрические явления в слоистых проводниках в сильном магнитном поле // Там же. – 2004. – **126**, вып. 1(7). – С. 246–252.
7. *Горський П. В.* Поздовжня електропровідність шаруватих кристалів у сильному магнітному полі // Укр. фіз. журн. – 2005. – **50**, № 11. – С. 1252–1260.
8. *Gorskyi P. V.* Layered structure effects as realization of anisotropy in magnetic, galvanomagnetic and thermoelectric phenomena. – New York: Nova Publ., 2014. – 366 p.
9. *Grigoriev P. D.* Theory of Shubnikov-de Haas effect in quasi-two dimensional metals // Phys. Rev. B. – 2003. – **67**. – 144401, 8 p.
10. *Горський П. В.* Чи виражені ефекти шаруватості при замкнених поверхнях Фермі // Укр. фіз. журн. – 2010. – **55**, № 12. – С. 1297–1305.
11. *Горський П. В.* Фактор потужності шаруватого термоелектричного матеріалу із замкненою поверхнею Фермі у квантуючому магнітному полі // Там само. – 2013. – **58**, № 4. – С. 372–380.
12. *Пашицкий Э. А., Шпигель А. С.* О сосуществовании сверхпроводимости и ферромагнетизма в двумерных системах // Физика низк. температур. – 1978. – № 4. – С. 976–983.
13. *Горский П. В.* Продольная электропроводность слоистых зарядово-упорядоченных кристаллов в сильном квантующем магнитном поле // Там же. – 2011. – **45**, № 7. – С. 928–935.
14. *Горський П. В.* Вплив зарядового впорядкування на термоЕРС шаруватих кристалів у квантуючому магнітному полі // Термоелектрика. – 2012. – № 4. – С. 14–22.
15. *Анатичук Л. І., Горський П. В., Михальченко В. П.* Вплив розмірних ефектів на властивості термоелектричних матеріалів // Там само. – 2014. – № 1. – С. 5–11.

*Институт термоелектрики НАН
та МОН України, Чернівці*

Надійшло до редакції 29.07.2014

П. В. Горський

Диагностика функциональных материалов с замкнутыми поверхностями Ферми, описываемых моделью Фиваза, и некоторые аспекты их применения

Представлены результаты теоретических исследований влияния непараболічності, описываемой моделью Фиваза, на свойства функциональных материалов с замкнутыми поверхностями Ферми. Теоретические расчеты продольных кинетических коэффициентов для ряда моделей времени релаксации как в квантующем магнитном поле, перпендикулярном слоям, так и в его отсутствие, выполнены для двух случаев: модели Фиваза и приближения

эффективной массы. Показано, что эффекты, связанные с непараболичностью, могут проявляться не только в случае открытых поверхностей Ферми, как традиционно считается, но и в случае замкнутых поверхностей Ферми. Это является фактором, благоприятствующим диагностике таких материалов по полевым и температурным зависимостям их кинетических коэффициентов. Общие соотношения, на основе которых выполнялись расчеты, не могут быть получены в рамках традиционных подходов. Дополнительно исследовано влияние непараболичности, описываемой моделью Фиваза, на свойства монокристаллических и порошковых термоэлектрических материалов. На основании этих исследований предложены термоэлектрические материалы, оптимизированные по гранулометрическому составу порошка и зонному спектру.

P. V. Gorskyi

Diagnostics of functional materials with closed Fermi surfaces described by the Fivaz model and some aspects of their application

The results of theoretical studies of the influence of a nonparabolicity in the Fivaz model on the properties of functional materials with closed Fermi surfaces are presented. Theoretical calculations of the longitudinal kinetic coefficients in the relaxation time approximation in a quantizing magnetic field perpendicular to layers and in the absence of a magnetic field are performed for two cases, such as the Fivaz model and the effective mass approximation. It is shown that the nonparabolicity effects may be well observed not only for highly open Fermi surfaces, as the majority of researchers believe, but for transient or closed Fermi surfaces. This is favorable factor for the diagnostics of such materials by the temperature and field dependences of their kinetic coefficients. Additionally, we investigated the nonparabolicity influence in the Fivaz model on the properties of thermoelectric materials in single crystals and powders. On this basis, some thermoelectric materials optimized by a powder grain size composition and a band spectrum are proposed.