

ОБЗОРЫ АКТУАЛЬНЫХ ПРОБЛЕМ

ТермоЭДС в топологических изоляторах
и двумерных полуметаллах на основе HgTe

Г.М. Гусев, З.Д. Квон, А.Д. Левин, Е.Б. Ольшанецкий, Н.Н. Михайлов

В последние годы были предприняты значительные усилия по исследованию влияния нетривиальной электронной топологии на термоэлектрические свойства материалов. В частности, топологические изоляторы и двумерные полуметаллы стали новым классом термоэлектрических материалов. Когда уровень Ферми находится в пределах запрещённой зоны, термоэлектрический транспорт в двумерных топологических изоляторах определяется в первую очередь одномерными геликоидальными краевыми состояниями, тогда как в трёхмерных топологических изоляторах транспорт определяется двумерными состояниями, которые существуют на поверхности материала. В настоящей работе сделан обзор результатов, полученных на квантовых ямах HgTe, уникальность которых заключается в том, что они сочетают в себе оптимальные характеристики топологических изоляторов и наиболее эффективных термоэлектрических материалов. Также рассмотрены термоэлектрические явления в двумерных полуметаллах на основе HgTe. Эти материалы имеют перекрывающиеся в энергетическом пространстве электронные и дырочные зоны, что приводит к сильному взаимному рассеянию между электронами и дырками, влияющему на термоэлектрический транспорт и приводит к температурно-зависимому сопротивлению. Явления термоЭДС в двумерных полуметаллах рассматриваются с учётом эффектов диффузии и фононного увлечения. Кроме того, в обзоре обсуждаются двумерные полуметаллы Вейля с бесщелевым конусным спектром и их термоэлектрические свойства. Отмечается влияние сосуществования дираковских и тяжёлых дырок в валентной зоне на термоэлектрические свойства данного материала и перспективы его применения в термоэлектрических устройствах.

Ключевые слова: топологический изолятор, термоЭДС, квантовый транспорт, квантовая яма HgTe

PACS numbers: 72.15.Jf, 72.20.Pa, 85.35.Be

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2025.04.039898>

Содержание

1. Введение (2).
2. Энергетический спектр топологических изоляторов и двумерных полуметаллов на основе HgTe (3).
3. Эксперимент и образцы (5).
4. ТермоЭДС в 2D топологическом изоляторе (6).

Г.М. Гусев^(1,a), З.Д. Квон^(2,3,b), А.Д. Левин^(1,c),
Е.Б. Ольшанецкий^(2,4,d), Н.Н. Михайлов^(2,e)

⁽¹⁾ Universidade de São Paulo, Instituto de Física,
São Paulo, Brazil

⁽²⁾ Институт физики полупроводников им. А.В. Ржанова СО РАН,
просп. Академика Лаврентьева 13, 630090 Новосибирск,
Российская Федерация

⁽³⁾ Новосибирский государственный университет,
Академгородок, ул. Пирогова 2, 630090 Новосибирск,
Российская Федерация

⁽⁴⁾ Новосибирский государственный технический университет,
просп. Карла Маркса 20, 630073 Новосибирск,
Российская Федерация

E-mail: ^(a) gusev@if.usp.br, ^(b) kvon@isp.nsc.ru,
^(c) alexander.d.levin@gmail.com, ^(d) eolsh@isp.nsc.ru,
^(e) mikhaïlov@isp.nsc.ru

Статья поступила 14 февраля 2025 г.,
после доработки 2 апреля 2025 г.

- 4.1. Теоретическая модель. 4.2. Обсуждение и сравнение с экспериментом. 4.3. Выводы.
5. ТермоЭДС в трёхмерном топологическом изоляторе (14).
5.1. Введение. 5.2. Результаты. 5.3. Обсуждение. 5.4. Выводы.
6. ТермоЭДС в двумерном полуметалле в квантовой яме HgTe (18).
6.1. Сопротивление и подвижность в 2D полуметаллах.
6.2. ТермоЭДС в двумерном полуметалле. 6.3. Выводы.
7. ТермоЭДС в 2D полуметалле Вейля (22).
7.1. Введение. 7.2. Экспериментальные результаты и обсуждение. 7.3. Заключение.
8. Итоговые замечания (25).
- Список литературы (26).

1. Введение

Термоэлектрические эффекты в твёрдых телах относятся к классу фундаментальных кинетических явлений [1]. Они отражают основные свойства переноса энергии квазичастицами в металлах и полупроводниках, что делает их ценным инструментом для идентификации носителей заряда и транспортных механизмов, действующих в данном процессе. Кроме того, такие эффекты имеют значительную прикладную ценность, будучи связанными с преобразованием тепловой формы энергии в электрическую [2]. Недавнее открытие топологических изоляторов (ТИ) и

двумерных классических и вейлевских полуметаллов открывает новые перспективы в этой области благодаря их нетрадиционной электронной структуре и уникальным свойствам. ТИ демонстрируют уникальные транспортные свойства, которые вытекают из бесцелевого линейного спектра их геликоидальных поверхностных или краевых состояний [3–12]. Например, теоретически ожидается, что краевые состояния двумерных ТИ будут иметь чрезвычайно большую длину свободного пробега и подвижность из-за их топологической защиты от обратного рассеяния [3–5, 13–15]. В двумерных ТИ транспорт определяется краевыми состояниями, когда уровень Ферми остаётся в пределах запрещённой зоны. Положение уровня Ферми в запрещённой зоне стабилизируется объёмными состояниями, присутствующими в ней и возникающими из-за случайной пространственной неоднородности или беспорядка. Эти состояния обычно локализованы, но электронные переходы между краевыми и объёмными состояниями возможны и могут влиять на транспортные свойства в двумерных ТИ. Считается, что смешивание краевых и объёмных состояний значительно усиливает диффузионную термоЭДС в двумерных ТИ. Двумерные классические и вейлевские полуметаллы также являются новыми и интересными видами двумерных и трёхмерных электронных систем [16–20]. Двухкомпонентный (электронно-дырочный) классический и квантовый транспорт, электронно-дырочное рассеяние Ландау, квантовый эффект Холла в электронно-дырочной жидкости, двумерная сеть спиральных краевых состояний — вот лишь неполный список новых физических явлений, открытых в таких системах за последние два десятилетия [17, 21].

Необходимо отметить, что до сих пор HgTe является единственным полупроводником, на основе которого 2D ТИ и 3D ТИ, 2D классические полуметаллы и полуметаллы Вейля были экспериментально реализованы наиболее надёжным способом. Поэтому нет сомнений, что исследование их термоэлектрических свойств является очень важной задачей современной физики конденсированного состояния.

Некоторые из недавних обзорных статей, включая [22–25], в основном сосредоточены на трёхмерных топологических изоляторах и полуметаллах. Они предлагают ценную информацию о последних исследованиях в данной

области и помогают ориентировать будущие исследовательские усилия, направленные на разработку более эффективных технологий преобразования энергии. По сравнению с ними настоящая обзорная статья представляет собой резюме последних исследований термоэлектрических свойств 2D топологических изоляторов и полуметаллов на основе материала HgTe. Она охватывает ряд тем, включая теоретические основы, касающиеся этих материалов, экспериментальные методы измерения их термоэлектрических свойств и анализ механизмов рассеяния.

2. Энергетический спектр топологических изоляторов и двумерных полуметаллов на основе HgTe

В этом разделе энергетический спектр квантовой ямы (КЯ) и плёнок на основе HgTe рассмотрен более подробно. На рисунке 1 представлен качественный вид энергий основных подзон размерного квантования в такой яме в зависимости от её толщины [26–28]. Как видно, поведение спектра, которое принципиально зависит от толщины ямы, можно условно разделить на четыре области. В первой области $d_w < d_c$ реализуется прямозонный нормальный 2D изолятор. Его запрещённая зона уменьшается с ростом толщины, обращаясь в ноль при критической толщине ямы d_c , равной 6,3–6,5 нм в зависимости от ориентации и деформации квантовой ямы. При дальнейшем увеличении толщины d_w происходит переход во вторую область, где реализуется 2D изолятор с инвертированным зонным спектром — 2D топологический изолятор. В диапазоне толщин квантовой ямы $14 < d_w < 30$ нм вследствие непрямого перекрытия минимума двумерной подзоны размерного квантования H_1 (зона проводимости) и боковых максимумов подзоны H_2 (валентная зона) возникает двумерный полуметалл. Наконец, толщины ямы $d_w \geq 60$ нм соответствуют состоянию трёхмерного топологического изолятора.

Рассмотрим энергетический спектр некоторых из перечисленных систем более подробно, начав с 2D ТИ. Рассчитанный в [29] энергетический спектр 2D ТИ для ориентаций поверхности (100) и (013) показан на рис. 2а. Как видно, основные характеристики этого спектра

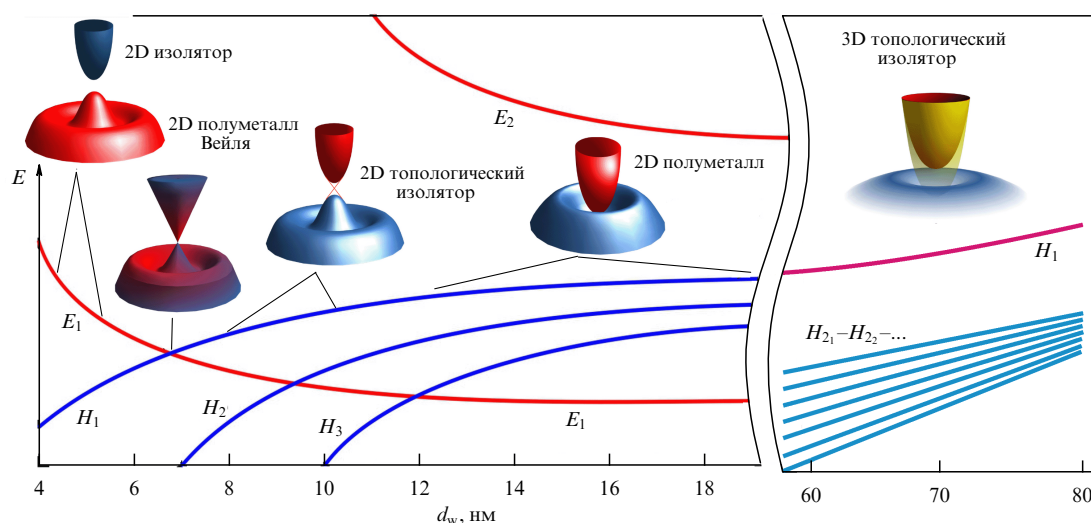


Рис. 1. Качественный вид энергетического спектра топологических изоляторов и двумерного полуметалла на основе HgTe (E_1 и E_2 — энергии электронных 2D подзон, H_1 , H_2 и H_3 — энергии дырочных 2D подзон).

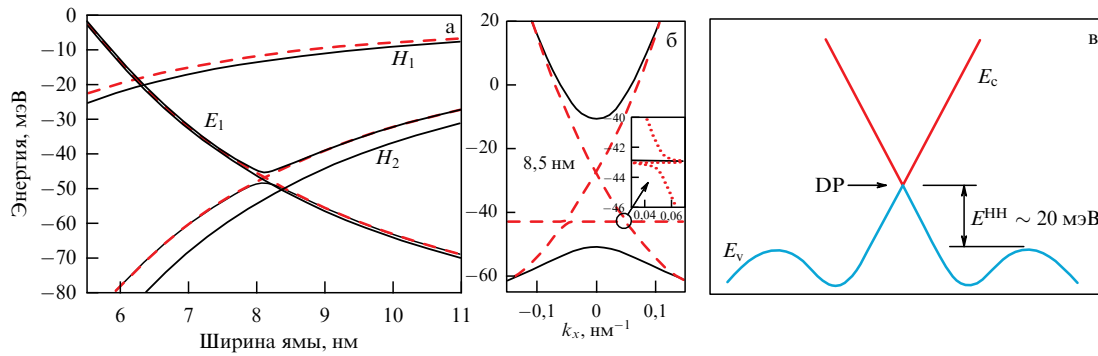


Рис. 2. (а) Энергия дна подзоны как функция толщины квантовой ямы в диапазоне 5,5–11 нм (сплошные кривые для поверхностной ориентации (100), штриховые кривые для ориентации (013)). (б) Закон дисперсии объёмных и краевых состояний для квантовых ям HgTe с ориентацией (013) (рисунок взят из [29]). (в) Качественный вид энергетического спектра в квантовой яме HgTe критической ширины $d_w = 6,3–6,5$ нм.

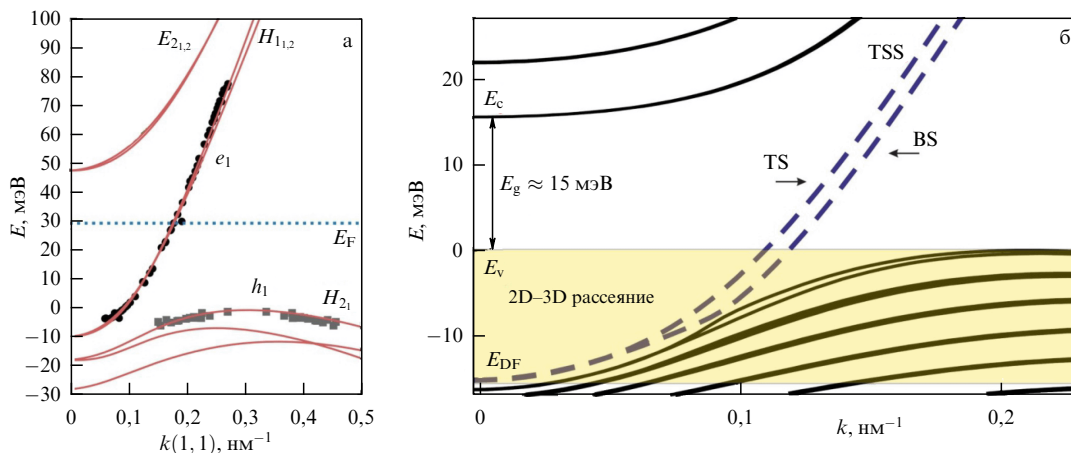


Рис. 3. (а) Энергетический спектр 2D полуметалла в квантовой яме HgTe ($d_w = 22$ нм). Символы — экспериментальные данные, полученные из значений циклотронной массы; сплошные линии — расчёт с помощью модели $k \times p$ (рисунок взят из [30]). (б) Зонная структура 3D топологического изолятора на основе напряжённой плёнки HgTe толщиной 80 нм. Сплошные линии — дисперсия энергии объёмных состояний, штриховые линии — дисперсия энергии поверхностных дираковских фермионов на верхней (TS) и нижней поверхности (BS) плёнки. Примерное энергетическое окно, в котором сосуществуют поверхностные электроны и объёмные дырки, отмечено жёлтой заливкой (рисунок взят из [31]).

слабо зависят от ориентации поверхности. Критическая толщина в обоих случаях составляет 6,3 нм, а состояние 2D ТИ с наибольшей шириной запрещённой зоны, соответствующее простой инверсии зон, реализуется при толщине КЯ 8,2–8,5 нм. Ширина запрещённой зоны в данном случае составляет примерно 30 мэВ. Закон дисперсии краевых и объёмных состояний для квантовой ямы толщиной 8,5 нм с ориентацией (013) показан на рис. 2б, который хорошо иллюстрирует все особенности спектра 2D ТИ на основе квантовой ямы HgTe: линейный дираковский спектр краевых токовых состояний и параболический спектр с запрещённой зоной для объёмных состояний. Отметим, что краевые состояния существуют не только в запрещённой зоне, но и при энергиях, соответствующих разрешённым объёмным зонам. На рисунке 2б также отчётливо видно антипересечение краевых состояний с объёмными состояниями в нижней части запрещённой зоны из-за более низкой симметрии поверхности (013).

На рисунке 2в представлен энергетический спектр квантовой ямы HgTe с критической толщиной $d_w = 6,3–6,5$ нм, при которой возникает вейлевский 2D полуметалл. Согласно расчётам, проведённым во многих

работах, спектр квантовой ямы HgTe с $d = d_c$ представляет собой симметричный конус Дирака с дисперсией $E = \hbar v_{DF} k$ ($v_{DF} = 7–8 \times 10^7$ см с⁻¹) только для энергий, отстоящих от точки Дирака не более чем на 20–30 мэВ. Несколько ниже точки Дирака в некоторой точке, удалённой от центра зоны Бриллюэна, находятся боковые экстремумы валентной зоны, представляющие собой минимумы энергии тяжёлых 2D дырок.

На рисунке 3а показан типичный энергетический спектр 2D полуметалла в квантовой яме толщиной 22 нм. Видно, что данная система имеет перекрытие порядка 10 мэВ между минимумом зоны проводимости в центре зоны Бриллюэна и двумя долинами валентной зоны в направлении [03-1]. Эффективная масса электрона $m_e = 0,025–0,03m_0$, а масса дырки $m_h = 0,25–0,3m_0$, что примерно в десять раз больше [30].

Необходимо отметить, что объёмный теллурид ртути, несмотря на инвертированную природу его спектра, не может быть классифицирован как ТИ, поскольку является бесщелевым полупроводником. Однако приложение к 3D образцу HgTe одноосной деформации сжатия может привести к открытию в его спектре щели и, соответственно, к его трансформации в состояние 3D ТИ. Аналогичная, но

не идентичная ситуация имеет место в случае плёнок HgTe, выращенных на подложках CdTe из-за разницы в постоянных решёток HgTe ($a_{\text{HgTe}} = 0,646$ нм) и CdTe ($a_{\text{CdTe}} = 0,648$ нм). Критическая толщина псевдоморфного роста, соответствующая этой разнице в постоянных решёток, составляет более 100 нм, и, таким образом, плёнки, толщина которых меньше этого критического значения, воспроизводят постоянную решётки подложки CdTe. В результате деформация растяжения, возникающая в таких плёнках, приводит к появлению щели. Однако точка Дирака в созданном таким образом ТИ расположена не внутри запрещённой зоны, а глубоко в валентной зоне. Из-за гибридизации с валентной зоной спектр поверхностных состояний содержит только электронную ветвь, которая при приближении ко дну валентной зоны отклоняется от линейного закона, становясь квазипараболической. Рисунок 3б демонстрирует энергетический спектр 3D топологического изолятора, реализованного в 80 нм HgTe [31]. Видно, что с ростом энергии в объёме плёнки возникает непрямая запрещённая зона шириной около 15 мэВ, в которой присутствуют спектральные ветви делокализованных поверхностных электронных состояний. Поскольку толщина плёнки конечна, её спектр в разрешённых объёмных зонах состоит из последовательности размерно-квантованных подзон с малым (1 мэВ) расстоянием между ними в валентной зоне и с большим на порядок разделением в зоне проводимости.

3. Эксперимент и образцы

Квантовые ямы $\text{Cd}_{0,65}\text{Hg}_{0,35}\text{Te}/\text{HgTe}/\text{Cd}_{0,65}\text{Hg}_{0,35}\text{Te}$ с ориентацией поверхности (013) и различной номинальной толщиной ямы были получены методом молекулярно-лучевой эпитаксии. Как показано в предыдущих публикациях (см. обзор [11]), использование подложек, наклонённых к сингулярным ориентациям, способствует росту более совершенных плёнок. Поэтому рост структур осуществляется преимущественно на подложках с ориентацией поверхности [013], которая отклоняется от сингулярной ориентации примерно на 19° . На основе полученной слоистой структуры, содержащей квантовую яму HgTe, методом оптической фотолитографии и плазмохимического травления были изготовлены экспериментальные образцы различной конфигурации и размера. Макроскопические образцы прямоугольной формы 4×3 мм включали в себя обычные холловские мостики с размерами сегментов между потенциометрическими контактами $L \times W = 100 \times 50$ мкм и 250×50 мкм. Мезоскопическая структура представляла собой длинный холловский мостик, состоящий из трёх последовательных сегментов разной длины (3, 9 и 35 мкм) и семи потенциометрических контактов.

Таблица 1. Параметры образцов и типы холловских мостиков, используемых для транспортных измерений

Образец	d , нм	Холловский мостик
2D топологический изолятор	8,1–8,3	Мезоскопический
3D топологический изолятор	80	Макроскопический
2D полуметалл	21	Макроскопический
2D полуметалл Вейля	6,3–6,4	Макроскопический

Омические контакты к квантовой яме HgTe изготавливались таким же способом, как и в других 2D-системах, таких как, например, квантовые ямы GaAs, — путём вжигания индия непосредственно на поверхности контактных площадок. Подобный метод приводит к тому, что индий диффундирует вертикально вниз, обеспечивая омический контакт с нижележащей квантовой ямой, с контактным сопротивлением в диапазоне 0,1–1 кОм. Во время измерений на переменном токе Y-компонента импеданса не превышала 5% от полного импеданса, что является показателем хорошей омичности контактов. Модуляционно-легированные квантовые ямы HgTe/CdHgTe обычно выращиваются при $T = 180^\circ \text{C}$, т.е. при более низкой температуре, чем та, что используется для роста соединений $A_{\text{III}}-B_{\text{V}}$. Далее, на поверхность структуры наносился слой диэлектрика (100 нм SiO_2 и 100 нм Si_3Ni_4), а затем металлический затвор TiAu. Изменение плотности носителей заряда в зависимости от напряжения на затворе составляло $10^{11} \text{ см}^{-2} \text{ В}^{-1}$. Измерения магнитотранспорта проводились при температуре 4,2 К с использованием стандартной четырёхточечной схемы с переменным током частотой 1–13 Гц силой 1–10 нА через образец, что достаточно для предотвращения эффектов разогрева. ТермоЭДС измерялась следующим образом. На одном конце образца, вблизи одного из токовых контактов холловского мостика, находился нагреватель — тонкая металлическая полоска с сопротивлением ≈ 50 Ом. Противоположный холодный конец образца припаивался индием к медному блоку размером 5 мм^3 , который, в свою очередь, приводился в тепловой контакт с массивным медным держателем образца. Для создания градиента температуры вдоль холловского мостика через нагреватель пропусклся переменный ток силой не более 60 мА и частотой 0,4–1 Гц. Для указанного диапазона токов нагреватель работал в линейном режиме. Схема образца для измерения термоЭДС изображена на рис. 4.

Для контроля градиента температуры вдоль образца использовались два калиброванных термистора, один из которых располагался на конце нагревателя, а другой на холодном конце образца. Так, разность температур между потенциометрическими контактами, отстоящими друг от друга на 100 мкм, при температуре окружающей среды $T = 4,2 \text{ К}$ и $V_{\text{p-p}}^{\text{heater}} = 6 \text{ В}$ составляла $\Delta T \approx 0,023 \text{ К}$, что эквивалентно $\nabla T = 230 \text{ К м}^{-1}$. В рабочем диапазоне температур ($\approx 2,2\text{--}4,2 \text{ К}$) теплопроводность жидкого гелия пренебрежимо мала по сравнению с фоновой теплопроводностью подложки GaAs. Согласно нашим оценкам величина этой теплопроводности для разных подложек составляла $\kappa = 300\text{--}600 \text{ Вт м}^{-1} \text{ К}^{-1}$ при $T = 4,2 \text{ К}$, что согласуется с литературными данными. В таких условиях именно теплопроводность под-

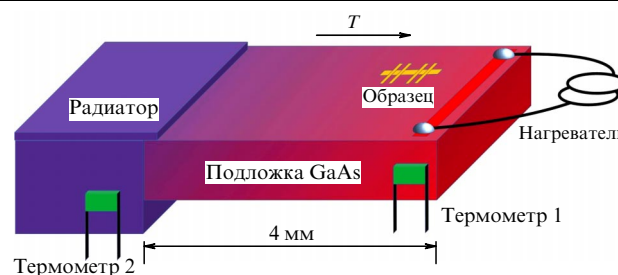


Рис. 4. Схема, используемая для измерения термоЭДС.

ложки определяет градиент температуры вдоль образца. Сигнал термоЭДС измерялся на удвоенной частоте с использованием имеющихся потенциометрических контактов. В макроскопических холловских мостиках экспериментально измерялась как продольная ($V_{xx} = S_{xx} \nabla T \times L$, где $L = 450$ или 100 мкм — расстояние между потенциометрическими контактами вдоль градиента температуры ∇T), так и поперечная ($V_{xy} = S_{xy} \nabla T \times W$, где $W = 50$ мкм — ширина образца, нормальная градиенту температуры) разность потенциалов, возникающая вследствие термоЭДС. Из V_{xx} и V_{xy} , полученных таким образом, определялся коэффициент Зеебека S_{xx} для его сравнения с теорией. Для мезоскопических образцов разница температур между потенциометрическими контактами не измерялась напрямую из-за небольшого расстояния между ними. Эта разность температур оценивалась исходя из величины градиента $\nabla T \sim 160 - 230$ К м⁻¹ для мощности нагревателя, используемой в нашем эксперименте.

4. ТермоЭДС в 2D топологическом изоляторе

4.1. Теоретическая модель

В КЯ HgTe фоновое увлечение оказывается существенно менее значительным фактором, чем в КЯ GaAs, с одной стороны из-за относительной малости деформационного потенциала и пьезоэлектрических констант в HgTe, а с другой — из-за малой плотности состояний 2D носителей (иначе говоря, из-за малости эффективной массы, поскольку термоЭДС, связанная с увлечением, пропорциональна квадрату этой массы). По порядку величины термоЭДС фонового увлечения в HgTe может быть сравнима с диффузионной термоЭДС в диапазоне температур 2–4,2 К. Однако расчёты показывают, что для данного механизма термоЭДС её зависимость от плотности носителей заряда и от температуры отличаются от наблюдаемых в эксперименте. Можно предположить, что термоЭДС фонового увлечения возра-

стает с $V_g - V_{\text{CNP}}$ вплоть до высоких концентраций 10^{12} см⁻², поэтому она может быть важной в 2D полуметаллах и 3D топологических изоляторах на основе HgTe. Мы рассмотрим её вклад в других разделах, посвящённых полуметаллу HgTe.

Фононное увлечение для краевых состояний не рассматривается, поскольку большая передача импульса от фононов к электронам предполагает обратное рассеяние с переворотом спина между краевыми состояниями, распространяющимися в противоположных направлениях. Такое рассеяние имеет очень низкую вероятность. Поэтому ниже мы сосредоточились на диффузионной термоЭДС.

В работе [32] авторы предполагают, что в 2D топологическом изоляторе может быть реализован высокий показатель добротности $ZT > 2$. Такое увеличение ZT в основном обусловлено значительной разницей во временах релаксации краевых состояний, топологически защищённых от обратного рассеяния, и 2D объёмных состояний, испытывающих сильное рассеяние. Если уровень Ферми расположен вблизи дна зоны проводимости, как показано на рис. 5а, то время релаксации высокоэнергетических электронов краевых состояний уменьшается из-за рассеяния в объёмную зону проводимости. При этом рассеяние между краевыми состояниями запрещено из-за симметрии относительно обращения времени. При значительной разнице между временами релаксации дираковских фермионов, занимающих краевые состояния выше и ниже уровня Ферми (рис. 5б), термоЭДС системы может изменить знак и стать положительной (аномальный знак), как показано на рис. 5в. Более того, величина этого эффекта может быть намного больше той, которая наблюдается в отсутствие селективного рассеяния.

Однако следует отметить, что такой механизм требует полного подавления рассеяния между краевыми состояниями, однако этого не наблюдается в реальных структурах. Проводимость длинных образцов на основе КЯ HgTe демонстрирует значительное отклонение от значения h/e^2 [11, 33], предсказанного формализмом

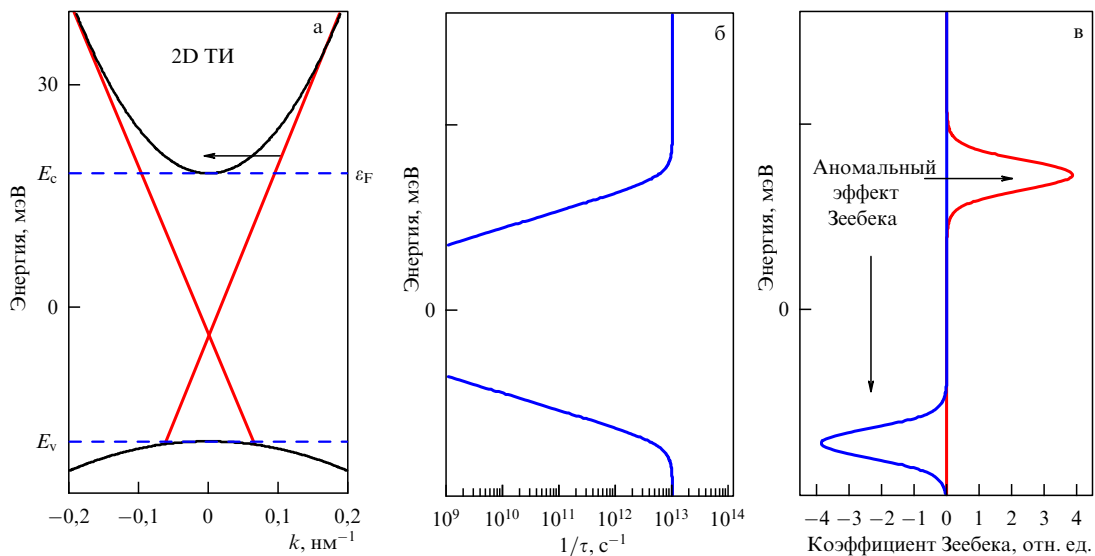


Рис. 5. (а) Схема топологических краевых состояний и объёмных зон. Края зоны проводимости и валентной зоны обозначены E_c и E_v . Когда уровень Ферми расположен вблизи дна зоны проводимости, электроны с энергией $\epsilon > E_c$ могут рассеиваться в объёмные состояния. (б) Скорость релаксации электронов краевых состояний как функция энергии. (в) Коэффициент Зеебека как функция энергии.

Ландауэра – Бюттикера. Данное отклонение от теоретических предсказаний было приписано различным факторам, таким как беспорядок, наличие зарядовых луж и многочисленные источники неупругого рассеяния [34–53].

Когда транспортный режим отличается от баллистического, необходимо учитывать рассеяние краевых состояний в объём, в дополнение к обратному рассеянию между ними. В таких случаях формализм Ландауэра – Бюттикера становится неприменим для количественного анализа. Для решения этой проблемы можно ввести два феноменологических параметра, γ и g , чтобы характеризовать скорость рассеяния между краевыми состояниями и между краевыми состояниями и объёмом. Рассеяние между краевыми и объёмными состояниями становится значительным, когда уровень Ферми лежит в пределах зоны проводимости или валентной зоны (рис. 5а), в то время как оно может быть пренебрежимо малым, когда уровень Ферми пересекает запрещённую зону. Для определения объёмной проводимости, объёмных плотностей электронов и дырок и для изучения транспортных свойств крайне важно учитывать плотность состояний. Здесь можно утверждать, что вследствие наличия случайного потенциала зона проводимости и валентная зона имеют гауссовы хвосты плотности состояний, которые простираются в запрещённую зону. Хотя электроны и дырки в хвостах зон согласно общепринятой теории должны быть локализованы, для простоты мы предполагаем конечную остаточную проводимость в хвостах зон, чтобы объяснить уменьшение нелокального транспорта вблизи точки зарядовой нейтральности (ТЗН).

Локальные и нелокальные коэффициенты прохождения зависят от вклада краевых состояний и от шунтирования краевого транспорта объёмным вкладом, причём последний становится более значимым вдали от CNP. Сравнение локальной и нелокальной проводимости [54] позволяет определить диапазон напряжений, в котором доминирует транспорт краевых состояний. Нелокальный сигнал равен нулю, когда уровень Ферми лежит в пределах зоны проводимости или валентной зоны, вдали от CNP, или когда классическая модель предсказывает пренебрежимо малое нелокальное сопротивление. Когда уровень Ферми проходит через CNP, происходят переходы между краевыми состояниями и объёмными электронными и дырочными состояниями, что позволяет нам изучать промежуточную ситуацию, соответствующую смеси краевых и объёмных вкладов в проводимость.

В статьях [55, 56] представлена модель edge + bulk, которая учитывает смешивание между краевыми и объёмными состояниями, когда уровень Ферми пересекает энергетическую щель. Эта модель была разработана для описания поведения проводимости и термоЭДС [56] в двумерных топологических изоляторах.

Для простоты мы рассмотрели 2D зонную модель с гамильтонианом Дирака, приводящую к симметричному энергетическому спектру электронов и дырок, разделённых щелью Δ , $\varepsilon = \pm \varepsilon_k$, $\varepsilon_k = [\Delta^2/4 + A^2 k^2]^{1/2}$, где $A = 360$ мэВ $\times$ нм и $\Delta = 36$ мэВ. В реалистичном случае спектр не симметричен [29]. Эффективные массы электронов и дырок были получены из экспериментов по циклотронному резонансу: $m_e \approx 0,02m_0$ и $m_h \approx 0,2m_0$ и являются зависящими от энергии из-за непараболичности спектра. Таким образом, объёмная проводимость σ_b

может быть выражена уравнением:

$$\sigma_b(\varepsilon) = \frac{e^2 v_F^2 \tau(\varepsilon) D(\varepsilon)}{2}, \quad (1)$$

где $D(\varepsilon)$ — плотность состояний, v_F — скорость Ферми. Введём обозначение $\tilde{\sigma} = \sigma_b/(e^2/h)$. Предполагая, что рассеяние носителей вызвано примесями или другими неоднородностями с короткодействующим потенциалом, описываемым независимым от импульса коррелятором d , скорость рассеяния находится как:

$$\frac{1}{\tau(\varepsilon)} = \frac{d}{\hbar A^2} \left(\frac{\varepsilon + \Delta^2}{4\varepsilon} \right). \quad (2)$$

Модель edge + bulk для термоЭДС предсказывает следующие вклады в проводимость и термоЭДС [56]:

$$G_e = \frac{e^2}{h} \mathcal{F}^{-1}, \quad \mathcal{F} = 1 + \gamma L + \frac{(L/w)\tilde{\sigma}gL}{(2L/w)\tilde{\sigma} + gL}, \quad (3)$$

$$S_e = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B}{|e|} (k_B T) \frac{\mathcal{F}'}{\mathcal{F}}, \quad (4)$$

$$S_b = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B}{|e|} (k_B T) \frac{G'_b}{G_b}, \quad (5)$$

и, таким образом, полная проводимость и термоЭДС:

$$G_{\text{tot}} = 2(G_e + G_b), \quad S_{\text{tot}} = \frac{S_e G_e + S_b G_b}{G_e + G_b}, \quad (6)$$

где $G_b = \sigma w/L = (e^2/h)(w/L)\tilde{\sigma}$ — объёмная проводимость в расчёте на одну ориентацию спина, k_B — постоянная Больцмана. Хотя теория, приводящая к уравнениям (3)–(5) изначально предполагает $gL \gg 1$, эти уравнения формально остаются справедливыми в противоположном пределе $gL \ll 1$, когда вклад краевого состояния в проводимость не зависит от объёмно-краевых токов и $G_e = e^2/h(1 + \gamma L)^{-1}$. Это означает, что уравнения (3)–(5) можно использовать в качестве разумного приближения для произвольного gL .

Основные результаты нашей теоретической модели даны уравнениями (3)–(5). Эти уравнения показывают, что функция $\mathcal{F}$ содержит два члена: первый член зависит от рассеяния между краевыми состояниями, а второй член описывает утечку с краевых состояний в объём.

Можно рассмотреть два случая:

1. Уровень Ферми лежит в пределах энергетической щели. В этом случае, если объёмный транспорт подавлен локализацией, поведение проводимости и термоЭДС определяется обратным рассеянием между краевыми состояниями.

2. Уровень Ферми пересекает зону проводимости (или валентную зону). Проводимость и термоЭДС краевого состояния определяются уравнениями (3) и (4). Если $(L/w)\tilde{\sigma} \ll gL$, наличие рассеяния от края в объём не оказывает сильного влияния ни на сопротивление, ни на термоЭДС, потому что:

$$\mathcal{F} = 1 + \gamma L + \frac{L}{w} \tilde{\sigma}.$$

Это также означает, что даже когда энергетическая зависимость g является сильной, рассматриваемого в

модели [32] изменения знака термоЭДС не происходит. Для длинного узкого образца и для высокоподвижных объёмных носителей (высокая проводимость), если $(L/w)\bar{\sigma} \gg gL$, вклад краевого состояния в функцию $\mathcal{F}$ должен быть пропорционален gL , а проводимость и термоЭДС должны быть заданы как

$$G = \frac{e^2}{h} (1 + \gamma L + g)^{-1},$$

$$S = \left(\frac{\pi^2}{3} \frac{k_B}{|e|} (k_B T) \right) \frac{\gamma' + g'}{1 + \gamma L + gL},$$

где γ' и g' означают производные величин γ и g по энергии. Отметим, что в предельном случае $\gamma' \ll g' \ll 0$ термоЭДС велика и имеет положительный аномальный знак для электронов (для обычных 2D и 3D систем коэффициент Зеебека всегда отрицателен для электронов). Этот механизм был предсказан в модели [32].

В случае баллистического транспорта ожидается отсутствие вклада краевых состояний в термоЭДС. Обычно считается, что скорость обратного рассеяния γ является плавной функцией химического потенциала, монотонно уменьшаясь при удалении последнего от CNP (точки зарядовой нейтральности). Это связано с тем, что CNP соответствует точке пересечения в спектре краевых состояний, где переданный импульс равен нулю, а скорость упругого рассеяния обычно уменьшается с увеличением переданного импульса. В результате сопротивление уменьшается со смещением $V_g - V_{\text{CNP}}$, а термоЭДС имеет отрицательный наклон вблизи CNP, что и наблюдается в эксперименте. Если мы отсчитываем энергию от точки Дирака, скорость обратного рассеяния определяется как:

$$\gamma(\varepsilon) = \frac{\gamma_0}{1 + (\varepsilon/\varepsilon_0)^2}.$$

Можно найти $\gamma'/\gamma = -(2\varepsilon/\varepsilon_0^2)/[1 + (\varepsilon/\varepsilon_0)^2]$, где γ_0 — скорость рассеяния при нулевой энергии, а ε_0 — характерный параметр сглаживания энергии. В области вблизи CNP, где в транспорте доминируют краевые состояния, термоЭДС является линейной функцией энергии Ферми. Она отрицательна в электронной части и положительна в дырочной части. Поэтому наклон термоЭДС вблизи CNP полностью определяется энергетической зависимостью скорости обратного рассеяния.

Наши результаты показывают, что объёмный транспорт играет существенную роль в наших образцах, даже вблизи CNP. Хотя мы наблюдали значительное нелокальное сопротивление, указывающее на краевой транспорт, сохранение объёмного электронного транспорта предполагает, что наши образцы имеют высокий уровень беспорядка. В результате объёмный компонент проводимости сохраняется во всём диапазоне напряжения затвора, даже в области запрещённой зоны. Эти результаты подчёркивают важность учёта объёмного транспорта при анализе наших образцов, несмотря на наличие краевого транспорта. Как мы упоминали выше, можно было бы ожидать значительного увеличения скорости рассеяния от края к объёму вблизи E_c или E_v (рис. 3б). Мы предполагаем, что

$$g(\varepsilon) = \frac{g_0}{\exp[-(\varepsilon - A/2)/2\varepsilon_0] + 1} + g_b,$$

где g_0 и g_b — скорости рассеяния при бесконечной и нулевой энергии.

Как упоминалось ранее, в случае узкого и длинного образца и $(L/w)\bar{\sigma} \gg gL$ как γ' , так и g' вносят одинаковый вклад в транспортные свойства. Однако наблюдение нелокального сопротивления [15, 54, 57] даёт чёткое свидетельство наличия транспорта краевых состояний в пределах щели подвижности $(-1,5V < V_g < 1,5V)$. Предполагая $gL \sim \gamma L \sim 1$, смешивание между краевыми состояниями и объёмом становится значительным для потенциометрических контактов $3-2$ ($L/w = 10$), когда объёмная проводимость составляет $\sigma \gg 0,1e^2/h$. Согласно нашей модели [55], расчётное значение объёмной проводимости составляет приблизительно $\sim 0,08e^2/h$.

Качественная зависимость термоЭДС, наблюдаемая в экспериментах, воспроизводится любой физически разумной моделью плотности состояний. Например, использование спектральной функции Лоренца для учёта уширения электронных состояний приводит к следующему уравнению:

$$D_\varepsilon = \frac{1}{\pi A^2} \left[\varepsilon \tan \frac{\varepsilon - A/2}{\delta} + \beta \varepsilon \tan \frac{\varepsilon + A/2}{\delta} + \frac{1}{2} \delta C_\varepsilon \right], \quad (7)$$

где

$$C_\varepsilon = \ln \left(\frac{(\varepsilon - E_c)^2 + \delta^2}{(\varepsilon - A/2)^2 + \delta^2} \right) + \ln \left(\frac{(\varepsilon + E_c)^2 + \delta^2}{(\varepsilon + A/2)^2 + \delta^2} \right), \quad (8)$$

а δ — энергия уширения, E_c — большая энергия отсечки. В области дырок ($\varepsilon < 0$) добавляется дополнительный коэффициент $\beta \approx 6$, и плотность зонных состояний больше.

Рисунок 6а показывает термоЭДС, рассчитанную по уравнениям (3)–(8) с учётом лоренцевой зависимости скорости обратного рассеяния от энергии для различных параметров γ_0 со следующими параметрами: $E_c = 150$ мэВ, $\delta = 6$ мэВ, $\beta = 6$, $g_b = 0,1$ мкм⁻¹, $\varepsilon_0 = 10$ мэВ. Рассеяние от края к объёму зафиксировано. В сигнале термоЭДС наблюдается пик, когда химический потенциал приближается к краям валентной зоны и зоны проводимости. ТермоЭДС имеет аномальный характер, являясь отрицательной для дырок и положительной для электронов, как и было предсказано в модели [32]. Рисунок 6б показывает термоЭДС для различных значений g_0 с фиксированным рассеянием от края к краю. Из рисунка видно, что термоЭДС внутри щели остаётся постоянной, поскольку рассеяние между краями остаётся неизменным.

Закон Видемана–Франца предписывает, что электронная теплопроводность квантовой ямы должна быть относительно высокой, в то время как решёточная теплопроводность может быть уменьшена из-за рассеяния фононов. В результате грубые оценки можно получить, пренебрегая решёточной теплопроводностью. Мы можем выразить безразмерную добротность:

$$ZT = \frac{S^2 \sigma}{\kappa} T = \frac{3}{\pi^2} \left(\frac{S}{k_B/e} \right)^2.$$

В экспериментах по разогреву краевых состояний [58] была проверена справедливость соотношения Лоренца и было обнаружено, что закон Видемана–Франца применим как к краевым состояниям, так и к режиму объём-

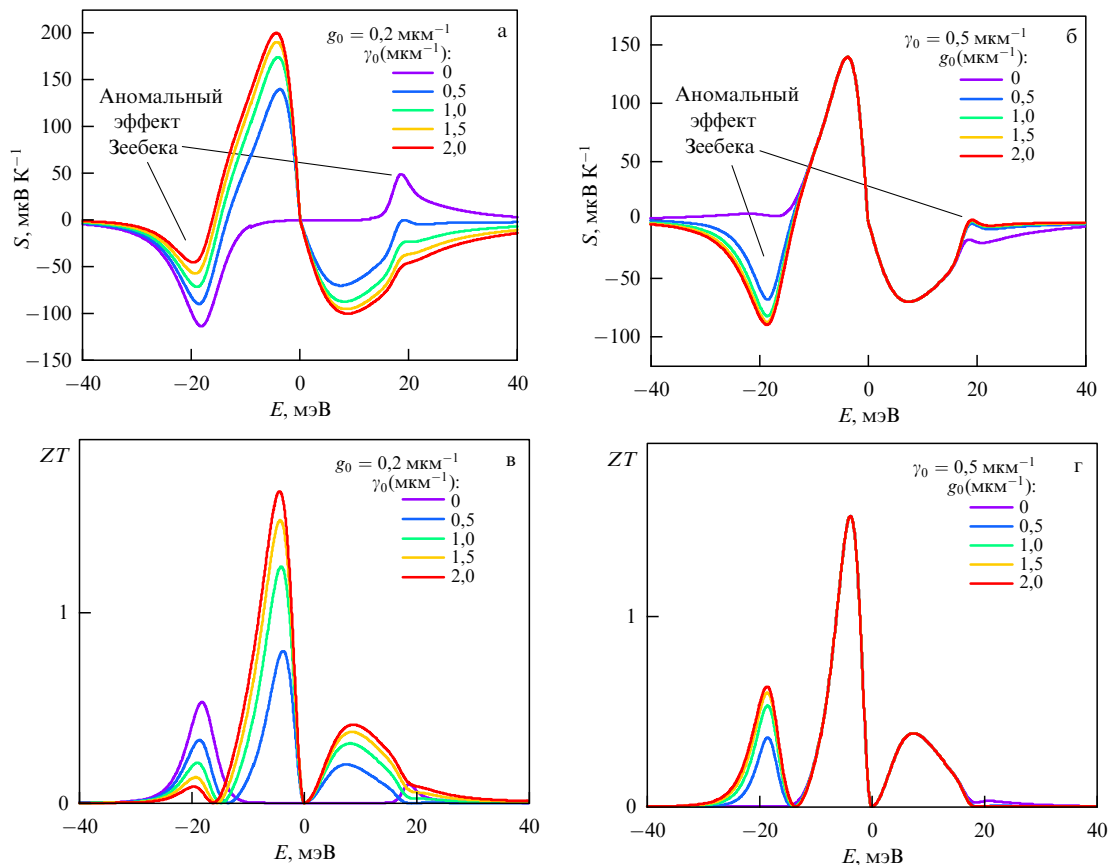


Рис. 6. Диффузионная термоЭДС, рассчитанная по уравнениям (3)–(5) как функция энергии Ферми для различных параметров рассеяния, $L = 5$ мкм, $T = 4,2$ К: (а) параметр рассеяния от края к объёму g_0 фиксирован, в то время как параметр рассеяния от края к краю γ_0 варьируется, (б) параметр рассеяния от края к краю γ_0 фиксирован, в то время как параметр рассеяния от края к объёму g_0 варьируется. Соответствующий показатель качества ZT как функция энергии Ферми для различных параметров рассеяния, $L = 5$ мкм, $T = 4,2$ К: (в) параметр рассеяния от края к объёму g_0 фиксирован, в то время как параметр рассеяния от края к краю γ_0 варьируется, (г) параметр рассеяния от края к краю γ_0 фиксирован, в то время как параметр рассеяния от края к объёму g_0 варьируется.

ного переноса. Важно отметить, что в нашем текущем анализе мы не учитывали теплопроводность подложки. Однако в реальных сценариях подложка может оказывать значительное влияние на общую термоэлектрическую проводимость. Рисунок 6в, г отображает коэффициент качества для различных значений γ_0 (в) и g_0 (г), следовательно, с фиксированным рассеянием от края к объёму (от края к краю). Видно, что ZT может быть значительно улучшен до $\sim 1,6$ благодаря сильной энергетической зависимости параметра $\gamma(\varepsilon)$. Это разумное предположение, подкреплённое недавними исследованиями, в которых рассматривались различные механизмы обратного рассеяния, используемые для объяснения рассеяния между топологически защищёнными состояниями [33]. Следует отметить, что энергетическая зависимость параметра $g(\varepsilon)$ (который учитывает рассеяние от края к объёму) может значительно повысить термоэлектрическую эффективность. Тонкая настройка такой зависимости позволяет достичь схожих значений ZT . Рисунок 7а, б изображает термоЭДС (а) и добротность (б) для различных длин образцов, при фиксированных параметрах γ_0 (в) и g_0 (г). Чтобы минимизировать аномальный эффект Зеебека, возникающий из-за интенсивного рассеяния между краем и объёмом, мы выбрали малый параметр рассеяния от края к объёму. Наблюдается насыщение сигнала термоЭДС с увеличением длины образца. Подводя итог, можно сказать, что коэффициент

Зеебека меняет знак из-за сильного селективного рассеяния. Последнее приводит к тому, что парциальные термоэлектрические мощности, обусловленные рассеянием от края к краю и от края к объёму, имеют разные знаки и в значительной степени компенсируют друг друга. Кроме того, максимальные термоэлектрические показатели качества различаются, когда присутствует только рассеяние от края к краю или от края к объёму, и достигаются при разных значениях химического потенциала. Если есть несколько каналов рассеяния с различными термоэлектрическими свойствами, эффективность всей электронной системы может быть меньше наибольшей парциальной эффективности.

4.2. Обсуждение и сравнение с экспериментом

Экспериментальная установка и методы измерения сопротивления и термоЭДС были описаны в предыдущем разделе. Были изучены четыре различных мезоскопических образца, и ниже представлены результаты, полученные на двух репрезентативных образцах (А и В).

Изменение сопротивления в зависимости от напряжения на затворе и температуры решётки (среда) для двух разных образцов (образцы А и В) показано на рис. 8. Самый короткий сегмент образца А демонстрирует широкий пик сопротивления с амплитудой, большей, чем ожидаемое значение $h/2e^2$ в баллистическом случае. По мере увеличения длины образца сопротивление также

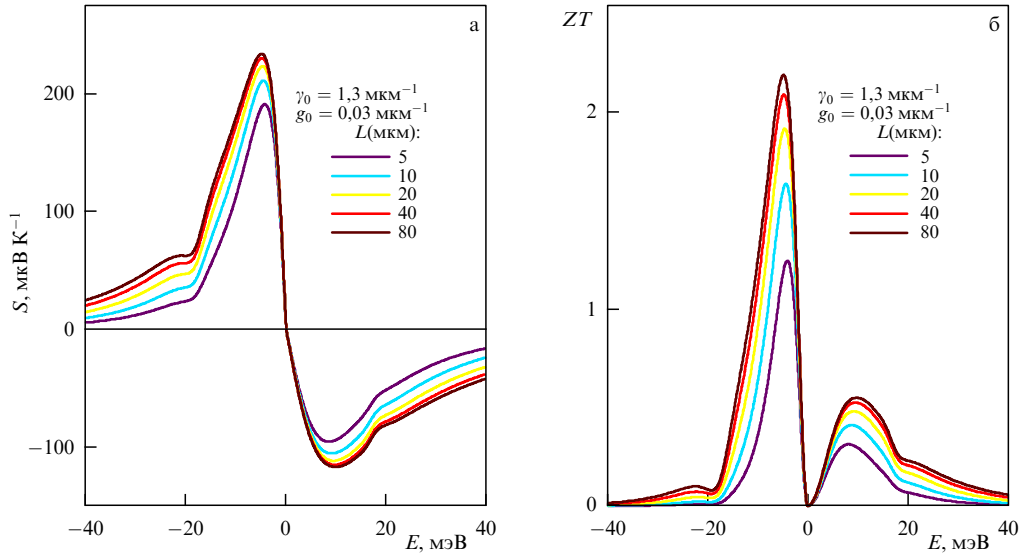


Рис. 7. (а) Диффузионная термоЭДС, рассчитанная по уравнениям (3)–(5) как функция энергии Ферми для образца длиной L , 4,2 К. (б) Соответствующий показатель добротности ZT как функция энергии Ферми для образцов различной длины, $T = 4,2$ К.

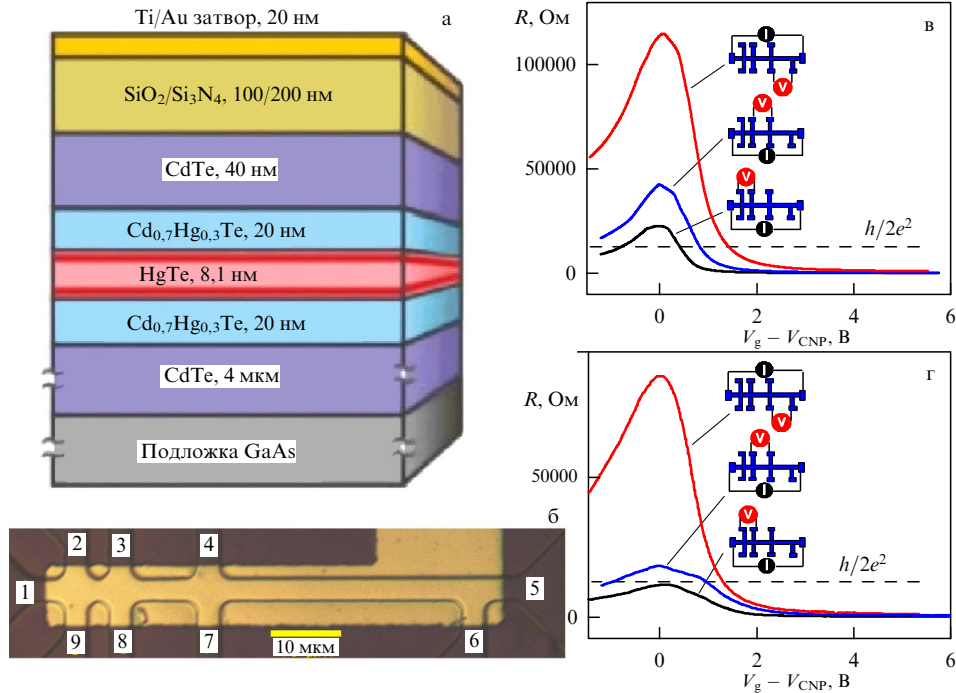


Рис. 8. Послойная схема структуры (а) и вид образца сверху (б). Сопротивление при $T = 4,2$ К как функция напряжения на затворе V_g для разных конфигураций измерений и для разных устройств: образцы А (в) и В (г).

увеличивается, что соответствует диффузионному случаю. В случае образца В мы наблюдаем баллистическое поведение для сопротивления между контактами 2–3 (9–8), причём сопротивление приближается к квантованному значению $h/2e^2$ (рис. 8г). Однако важно отметить, что сопротивление увеличивается с расстоянием между зондами, что указывает на сильное рассеяние от края к краю. Мы также измерили температурную зависимость кривых $R(V_g)$ и наблюдали, что сопротивление резко уменьшается при температурах выше 15 К и насыщается ниже 10 К [59]. Профиль зависимостей сопротивления от температуры выше $T > 15$ К хорошо соответствует закону активации $R \sim \exp(\Delta/2kT)$, где

Δ — активационная щель. Термически активированное поведение сопротивления выше 15 К соответствует щели в 10 мэВ между зоной проводимости и валентной зоной в яме HgTe. Щель подвижности может быть меньше энергетической щели из-за беспорядка.

На рисунке 9а, б сопротивление и термоЭДС, измеренные для обоих образцов между зондами 4 и 5 при $T = 4,2$ К, приведены как функции напряжения на затворе. Обнаружено, что термоЭДС увеличивается почти линейно с мощностью нагревателя, что указывает на то, что измеряется продольный (зеебековский) термоэлектрический эффект. Сигнал характеризуется амбиплярным поведением, как и в других электронно-дырочных

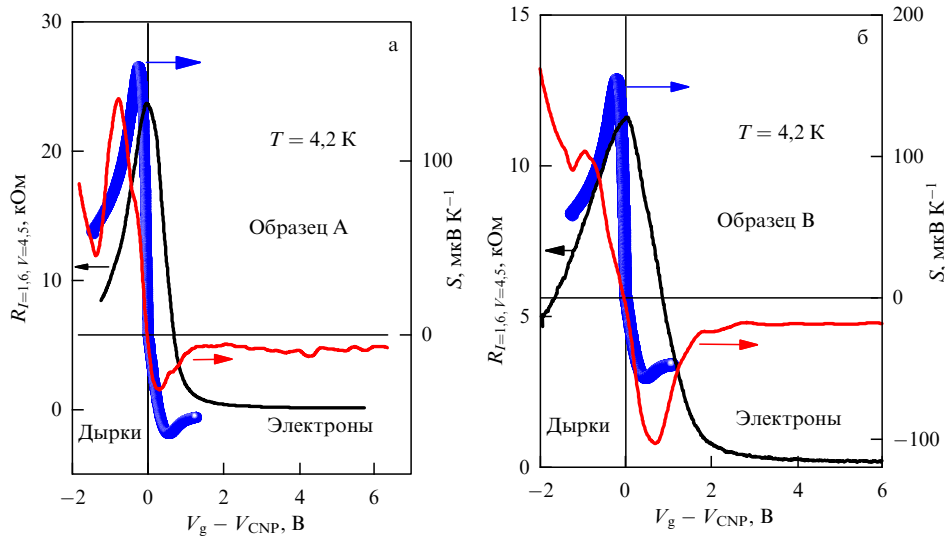


Рис. 9. Сопротивление и термоЭДС как функции напряжения на затворе, $T = 4,2$ К, образец А (а) и образец В (б). Синие символы — теоретическая зависимость, рассчитанная по уравнениям (3)–(9) с параметрами, указанными в тексте (модель edge + bulk).

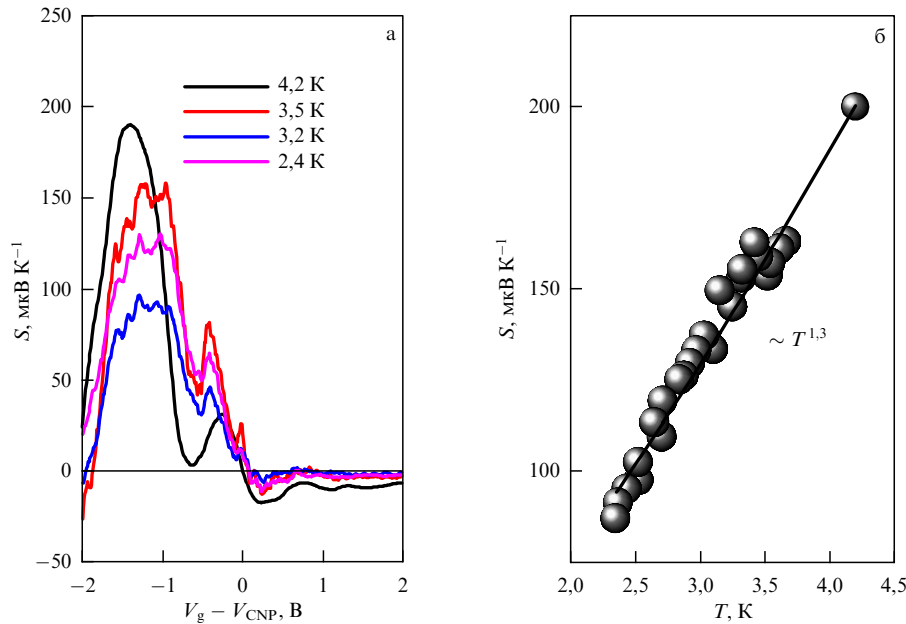


Рис. 10. (а) ТермоЭДС для разных температур (образец А). (б) Температурная зависимость термоЭДС при $V_g - V_{CNP} = -1,2$ В.

системах, таких как графен. Он меняет знак в точке нейтральности заряда (CNP) и уменьшается с увеличением плотности носителей. Интервал напряжения между электронноподобным и дырочноподобным режимами ($\Delta V_g \sim 1$ В) почти в два раза меньше полуширины пика сопротивления. На рисунке 10а приведены зависимости термоЭДС от V_g при разных температурах, а на рис. 10б приведена температурная зависимость термоЭДС, измеренная на более длинном мостике при выбранном напряжении затвора $V_g - V_{CNP} = -1,2$ В (на дырочной стороне), где термоЭДС достигает своего максимума. Следует отметить, что температурный интервал $2,2 < T < 4,2$ К был выбран в связи с тем, что сопротивление становится зависимым от температуры выше $T > 10$ К, и металлическое приближение для термоЭДС больше не действует. Сигнал растёт почти линейно с температурой в данном интервале, при этом $S \sim T^{1,3 \pm 0,1}$ (рис. 10б). Перед термоэлектрическими измерениями были прове-

дены измерения теплопроводности образца и было обнаружено, что теплопроводность определяется фоновым транспортом в подложке, причём вклад диффузионного переноса тепла электронами пренебрежимо мал. Теплопроводность подложки GaAs обычно определяется граничным рассеянием при низких температурах и может быть рассчитана с помощью следующего уравнения:

$$\kappa = \frac{2\pi^2}{15} \frac{k\Lambda}{v_{ph}^2} \left(\frac{kT}{h} \right)^3,$$

где Λ — длина свободного пробега фононов, а $v_{ph} = 3300$ м с⁻¹ — соответствующая средняя скорость акустических фононов. Мы определили значение κ примерно равным 600 Вт м⁻¹ К⁻¹ при температуре $4,2$ К, что согласуется с ранее измеренной теплопроводностью чистой подложки GaAs. Для расчёта термоЭДС нашей системы мы используем уравнения (2)–(6) в модели

объём + край. Однако важно отметить, что невозможно просто перевести зависимость от энергии в зависимость от плотности носителей, поскольку энергия Ферми не меняется линейно с числом состояний в области объёмной запрещённой зоны (n_s). Без какого-либо беспорядка химический потенциал μ перешёл бы из зоны проводимости в валентную зону, что привело бы к резкому пику сопротивления, а не к широкому максимуму, наблюдаемому в эксперименте. Чтобы учесть это, нам необходимо рассчитать зависимость μ от n_s и p_s , используя уравнения:

$$n_s = \int_0^\infty D_\varepsilon(\varepsilon) \left(1 + \exp \left(\frac{\varepsilon - \mu}{kT} \right) \right)^{-1} d\varepsilon,$$

$$p_s = \int_{-\infty}^0 D_\varepsilon(\varepsilon) \left(1 + \exp \left(-\frac{\varepsilon - \mu}{kT} \right) \right)^{-1} d\varepsilon.$$

Уравнения (7)–(8) дают значения плотности состояний, $D_\varepsilon(\varepsilon)$. Для расчёта термоЭДС указанные уравнения

используются вместе с параметрами $\gamma_0 = 1,3 \text{ мкм}^{-1}$ и $g_0 = 0,03 \text{ мкм}^{-1}$, как показано на рис. 7. Параметры для плотности состояний составляют $E_c = 150 \text{ мэВ}$, $\delta = 6 \text{ мэВ}$, $\beta = 6$, $g_b = 0,1 \text{ мкм}^{-1}$, $\varepsilon_0 = 10 \text{ мэВ}$. В дырочной области ($\varepsilon < 0$) добавляется дополнительный коэффициент $\varepsilon_0 = 16 \text{ мэВ}$ для сглаживания энергии. Этот расчёт находится в разумном согласии с экспериментом в области, близкой к CNP. Очевидно, что термоЭДС, рассчитанная для объёмных электронов, превышает экспериментальные значения. Такое завышение объясняется предположением о линейной зависимости плотности состояний от энергии, что, вероятно, неточно вдали от точки нейтральности заряда.

На рисунке 11 приведено резюме поведения диффузионной термоЭДС как функции плотности для различных предположений, рассматриваемых теорией. Цель этого рисунка — продемонстрировать, как различные особенности модели влияют на коэффициент Зеебека. На рисунке 11а изображён аномальный эффект Зеебека, предложенный для идеального случая геликоидальных топо-

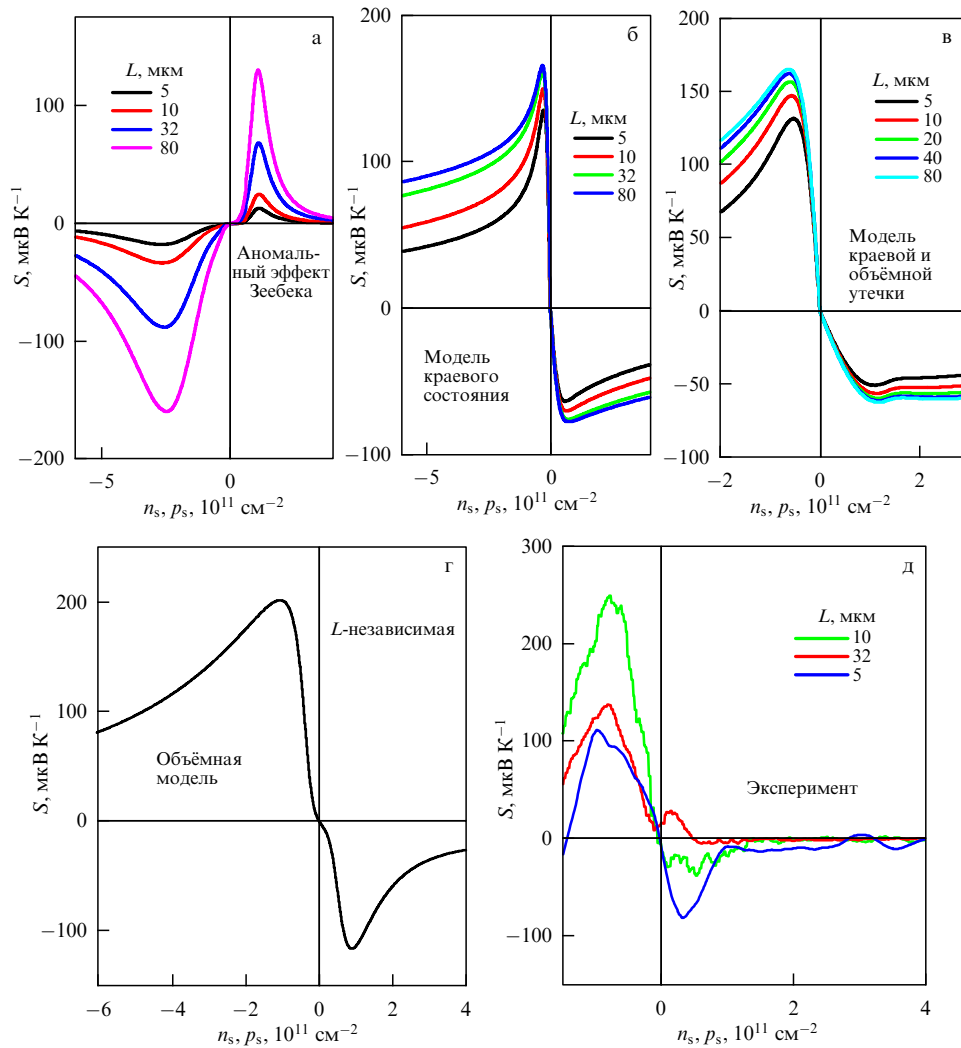


Рис. 11. Сравнение различных теоретических модельных предсказаний для термоЭДС как функции плотности носителей: (а) диффузионная термоЭДС, рассчитанная по уравнениям (3)–(8) для различных длин образцов L , $T = 4,2 \text{ К}$: $\gamma_0 = 0 \text{ мкм}^{-1}$ и $g_0 = 0,03 \text{ мкм}^{-1}$. (б) Диффузионная термоЭДС, рассчитанная по уравнениям (3)–(8) для различных длин образцов L , $T = 4,2 \text{ К}$: $\gamma_0 = 1,6 \text{ мкм}^{-1}$ и $g_0 = 0 \text{ мкм}^{-1}$. (в) Диффузионная термоЭДС, рассчитанная по уравнениям (3)–(8) для разной длины образца L , $T = 4,2 \text{ К}$: $\gamma_0 = 1,3 \text{ мкм}^{-1}$ и $g_0 = 0,03 \text{ мкм}^{-1}$. (г) Диффузионная термоЭДС, рассчитанная по уравнениям (9). Параметры для плотности состояний: $E_c = 150 \text{ мэВ}$, $\delta = 6 \text{ мэВ}$, $\beta = 6$, $g_b = 0,1 \text{ мкм}^{-1}$, $\varepsilon_0 = 10 \text{ мэВ}$. В области дырок ($\varepsilon < 0$) мы добавляем дополнительный коэффициент $\varepsilon_0 = 16 \text{ мэВ}$ для сглаживания энергии. (д) ТермоЭДС как функция напряжения затвора, измеренная между различными зондами напряжения с разной длиной, $T = 4,2 \text{ К}$.

логически защищённых краевых состояний, где происходит значительное увеличение скорости рассеяния от края к объёму вблизи E_c или E_v [32]. Можно наблюдать аномальный противоположный знак для термоЭДС электронов и дырок вблизи краев зон. На рисунке 10б показан эффект Зеебека, рассчитанный в предположении о наличии сильного смешивания геликоидальных состояний и отсутствии рассеяния от края к объёму. В таком случае термоЭДС демонстрирует амбиполярное поведение, что похоже на наши наблюдения. Рисунок 10в отображает более реалистичный случай, в котором рассматриваются оба механизма рассеяния (перемешивание геликоидальных состояний и утечка из края в объём). Видно, что модель край + объём успешно воспроизводит ключевые особенности термоЭДС. Это важно, поскольку обеспечивает теоретическую основу для понимания поведения термоЭДС в данной системе. Однако следует отметить, что наша модель опирается на сильную энергетическую зависимость рассеяния от края к краю, которая может отсутствовать в чисто баллистическом случае.

Как мы упоминали в предыдущих разделах, образцы HgTe демонстрируют нелокальное сопротивление, что указывает на наличие краевого транспорта, но объёмный транспорт также, по-видимому, важен даже вблизи CNP. Это говорит о том, что наши образцы имеют значительный уровень беспорядка, приводящий к сохранению объёмного электронного транспорта даже внутри щели, и поэтому объёмная составляющая проводимости существует во всём диапазоне напряжения на затворе. Хотя объёмный транспорт может иметь прыжковый характер вблизи центра щели, мы не видим экспоненциальной температурной зависимости вида $R \sim \exp[(T_c/T)^{1/3}]$, что соответствует закону Мотта для 2D-носителей, поскольку объёмная проводимость закорочена краевыми состояниями.

Однако температурное поведение объёмной термоЭДС, как ожидается, не изменится существенно при переходе от зонного транспорта к прыжковому. Для зонного транспорта $S_b \sim T$, тогда как для прыжкового термоЭДС рассчитывалась в [60]. Применительно к двумерным электронам результат [60] можно записать как:

$$S_b = -\frac{\lambda}{e} \left[\frac{\pi - 2}{\pi} (T^2 T_c)^{1/3} + \frac{2\pi}{3} T \right] \left(\frac{d \ln D_e(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right). \quad (9)$$

Уравнение (9) описывает поведение термоЭДС S_b в неупорядоченной системе. Первый член в уравнении представляет вклад закона Мотта, зависящий от числовой константы λ , плотности состояний $1/D_e(\varepsilon)a_0^2$ и характерной температуры T_c , обратно пропорциональной произведению плотности состояний, подвижности носителей μ и квадрату длины локализации a_0 волновой функции электрона. Второй член учитывает слабую локализационную поправку к закону Мотта, которая становится доминирующей в режиме, близком к началу зонного транспорта, когда длина локализации становится большой, а T_c того же порядка или меньше T . Следовательно, в этом режиме второй член является единственным значимым вкладом в термоЭДС, а S_b пропорциональна T .

Используя уравнение (9) с масштабной константой λ , приблизительно равной 1, можно построить график термоЭДС в режиме прыжкового транспорта, который изображён на рис. 11г. Это вычисление разумно согласуется с

экспериментальными результатами вблизи CNP. Однако численная константа ближе к таковой для металлического случая. Стоит отметить, что ни прыжковые, ни металлические модели транспорта не должны быть надёжными в таком промежуточном режиме. Тем не менее важно понять, как термоЭДС около CNP может меняться в зависимости от электронной плотности. Более того, для достижения лучшего соответствия между экспериментальными результатами и уравнением (9), необходимо иметь точные представления о поведении объёмной проводимости как в области щели, так и в валентной зоне. Следует отметить, что коэффициент термоЭДС, рассчитанный как для модели края, так и для модели края + объёма (рис. 11а, б и в), показывает наличие зависимости от длины образца, что также наблюдается в эксперименте (рис. 11д). Однако чисто объёмная модель не демонстрирует такого поведения. Важно отметить, что наши образцы демонстрируют баллистическое поведение только для небольших расстояний между зондами, поэтому наблюдаемая зависимость от длины может быть обусловлена переходом между различными режимами транспорта.

Таким образом, когда уровень Ферми попадает в энергетический зазор вблизи CNP, сопротивление образца обычно сопоставимо или превышает $h/2e^2$. В этой точке объёмные состояния в образце, скорее всего, локализованы, а транспорт по краю является доминирующим фактором, влияющим на сопротивление. И наоборот, когда уровень Ферми находится вдали от CNP, основным механизмом, как правило, является объёмный диффузионный транспорт.

Интересно, что термоЭДС образца, по-видимому, в значительной степени определяется объёмными свойствами независимо от положения уровня Ферми. Однако недавние теоретические работы указывают на то, что могут быть сильные усиления и изменения знака термоЭДС при переходе системы из локализованного состояния в проводящее состояние. Наша теория термоэлектрического отклика в 2D ТИ объясняет отсутствие таких аномалий и подтверждает идею о том, что наблюдаемая термоЭДС имеет в основном объёмное происхождение.

4.3. Выводы

В настоящее время нет окончательных экспериментальных доказательств, подтверждающих предположение о том, что топологические краевые состояния значительно повышают эффективность термоэлектрических материалов. Хотя теоретические расчёты безразмерной термоэлектрической эффективности дали результаты в диапазоне от значений ZT менее единицы до значений, которые примерно на порядок больше, чем у обычных объёмных термоэлектриков, последние результаты основаны на нескольких предположениях, таких как сильная зависимость утечки от края к краю или от края к объёму от энергии. Поэтому сомнительно, что вклад топологических спиральных состояний ТИ действительно может, как утверждается, умножить термоэлектрическую эффективность. Проанализировав экспериментальные данные и проведя теоретический анализ, мы пришли к выводу, что наблюдаемая термоЭДС имеет в основном объёмное происхождение или является результатом сильной энергетической зависимости утечки от края к краю. При этом как краевой, так и объёмный транспорт вносят вклад в сопротивление.

5. ТермоЭДС в трёхмерном топологическом изоляторе

5.1. Введение

Трёхмерный топологический изолятор (3D ТИ) характеризуется наличием бесщелевых поверхностных состояний внутри объёмной запрещённой зоны [3–5]. Такие поверхностные состояния имеют энергетический спектр в виде конуса Дирака, который соответствует безмассовым частицам. Примечательно, что спин поверхностных дираковских электронов ориентирован перпендикулярно волновому вектору k в 2D-плоскости, а это приводит к подавлению рассеяния электронов на примесях. Среди материалов, используемых для изготовления 3D ТИ напряжённые плёнки с широкими КЯ HgTe считаются одними из лучших, с подвижностью 2D-поверхностных электронов, достигающей значений $\mu \sim 100 \text{ м}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$ [12, 61–65].

Термоэлектрические измерения предоставляют ценную информацию о знаке носителей заряда и механизмах транспорта в металлах и полупроводниках. Значение термоэлектрического коэффициента сильно зависит от энергетического спектра и механизма релаксации времени через соотношение Мотта.

В предыдущем разделе, посвящённом двумерным топологическим изоляторам, мы упомянули, что в данной системе на основе соотношения Мотта [32] была предсказана аномально большая термоЭДС. Двумерный ТИ характеризуется парой встречных бесщелевых краевых геликоидальных состояний внутри объёмной щели, которые, как предполагается, устойчивы к обратному рассеянию [3–5, 11]. Когда уровень Ферми приближается к краю зоны проводимости или валентной зоны, предположительно, скорость рассеяния электронов в этих геликоидальных одномерных модах значительно увеличивается из-за 1D–2D рассеяния, что приводит к аномальному росту амплитуды сигнала Зеебека и изменению его знака. Однако такой механизм требует полного подавления рассеяния между краевыми состояниями, что не наблюдается в реалистичных структурах [11]. Экспериментальные данные показали, что наблюдаемая термоЭДС в основном обусловлена объёмным вкладом, тогда как сопротивление определяется как краевым, так и объёмным переносом [56].

В 3D топологическом изоляторе ожидается аналогичный сценарий, когда уровень Ферми пересекает границу объёмных зон (рис. 3б в разделе 2). В пределах диапазона энергий, обозначенного серой штриховкой, энергетические спектры как квазитрёхмерных дырок, так и топологических поверхностных электронных состояний перекрываются. Это должно приводить к дополнительному 2D–3D рассеянию, которое может потенциально улучшить коэффициенты термоэлектрической мощности. Такое взаимное рассеяние было непосредственно обнаружено в поведении сопротивления [63, 64]. Недавно 2D электрон–3D дырочное рассеяние было выведено из немонотонного дифференциального сопротивления узких каналов 3D ТИ HgTe [66].

Другая система, где сосуществование двух различных типов носителей с разным знаком заряда влияет на транспортные свойства, — это 2D полуметаллическая яма HgTe промежуточной ширины ($\sim 20 \text{ нм}$) [16, 67]. В данной системе 2D рассеяние электронов на

2D дырках напрямую приводит к температурно-зависимому сопротивлению ρ , которое увеличивается с температурой как $\rho \sim T^2$ в соответствии с предсказанием для поведения коэффициента взаимного трения электронов и дырок [68]. Мы опишем такую ситуацию в разделе 6.

Таким образом, термоэлектродвижущая сила является очень важным инструментом для изучения механизма рассеяния между носителями заряда разных знаков и даже между носителями разных размерностей, как, например, 1D–2D (2D топологические изоляторы [32]) и 2D электрон–2D дырки (2D полуметаллы [69]).

5.2. Результаты

Сопротивление и термоЭДС в макроскопических образцах измерялись методами, подробно описанными в разделе 3. Образцы имели слоистую структуру, показанную на рис. 12а, и представляли собой макроскопические холловские мостики (рис. 12б). На рисунке 12в, г приведены зависимости сопротивления затворного напряжения в нулевом магнитном поле для двух образцов (обозначенных как А и В) при разных температурах. Ток I протекает между контактами 1 и 6, в то время как напряжение V измеряется между близкорасположенными контактами 2 и 3, что соответствует сопротивлению $R = R_{1,6}^{2,3}$ (рис. 12б). Температурная зависимость $R(V_g, T)$ определяется особенностями транспорта, соответствующими различным областям энергетического спектра, которые были ранее исследованы в [63, 54]. Рисунок 3б во введении показывает специфические характеристики энергетического спектра напряжённого слоя HgTe толщиной 80 нм, схематически воспроизведённого на рис. 12а. Когда напряжение затвора смещается от отрицательных к положительным значениям, электрохимический потенциал $\bar{\mu}$ перемещается из зоны проводимости ($\bar{\mu} > E_c$) через объёмную щель ($E_v < \bar{\mu} < E_c$) в валентную зону ($\bar{\mu} < E_v$), границы зон обозначены на рис. 12в, г вертикальными линиями. Сопротивление в области объёмной щели обусловлено геликоидальными поверхностными электронными состояниями с различной плотностью на верхней и нижней поверхности [63]. В области $E_{DF} < \bar{\mu} < E_v$ двумерные поверхностные электроны и трёхмерные объёмные дырки сосуществуют, и мы наблюдаем немонотонную температурную зависимость сопротивления: $R(T)$ увеличивается ниже 15 К и уменьшается выше 20 К. Такое поведение является следствием рассеяния двумерных электронов на трёхмерных дырках, аналогичного рассеянию двумерных электронов на двухмерных дырках в полуметаллических ямах HgTe [67, 68]. В области $\bar{\mu} < E_{DF}$ в транспорте доминируют трёхмерные объёмные дырки, и никаких особенностей в поведении сопротивления или термоЭДС не ожидается.

После определения диапазонов затворного напряжения и плотности носителей заряда, соответствующих различным транспортным режимам, был исследован термоэлектрический отклик в плёнках. При этом измерялось продольное термонапряжение $V_{xx} = S_{xx} \nabla T L$, где $L = 450 \text{ мкм}$ — расстояние между контактами 1 и 6 вдоль градиента температуры ∇T (как показано на рис. 12б). Для проверки однородности градиента температуры мы также измерили продольное термонапряжение между контактами 2–3 и 2–5 и обнаружили удовлетворительную пропорциональность сигнала длине L .

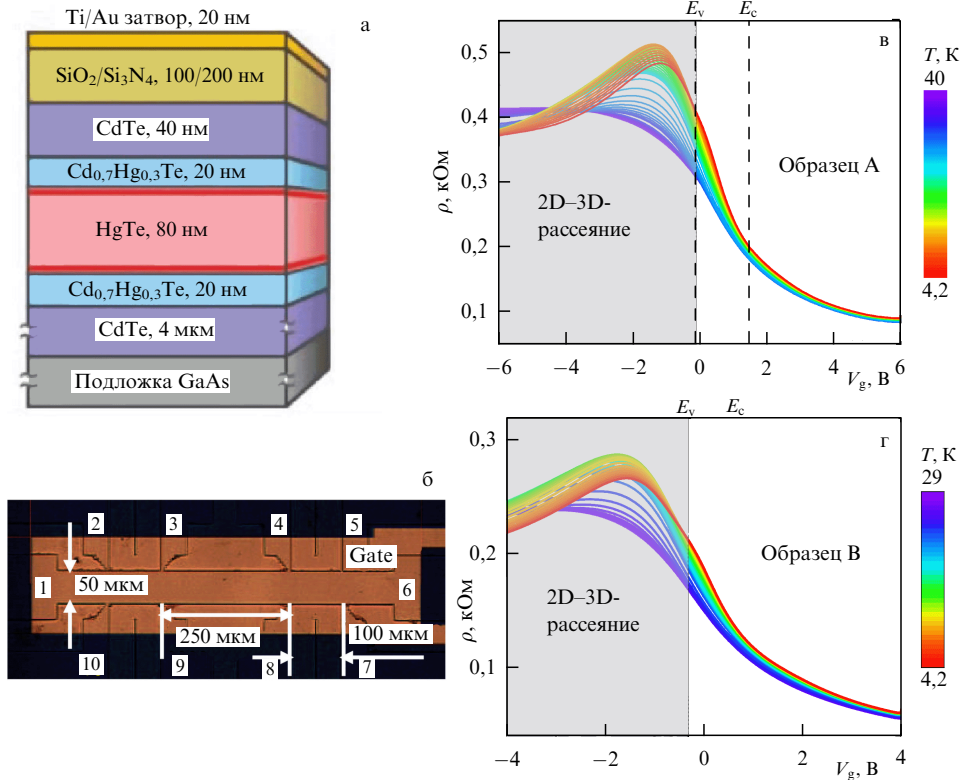


Рис. 12. (а) Послойная структура. (б) Вид образца сверху. (в, г) Удельное сопротивление ρ как функция напряжения на затворе, измеренное при различных температурах для образца А (в) и В (г). Диапазон энергии, где сосуществуют поверхностные электроны и объёмные дырки, отмечен серой заливкой.

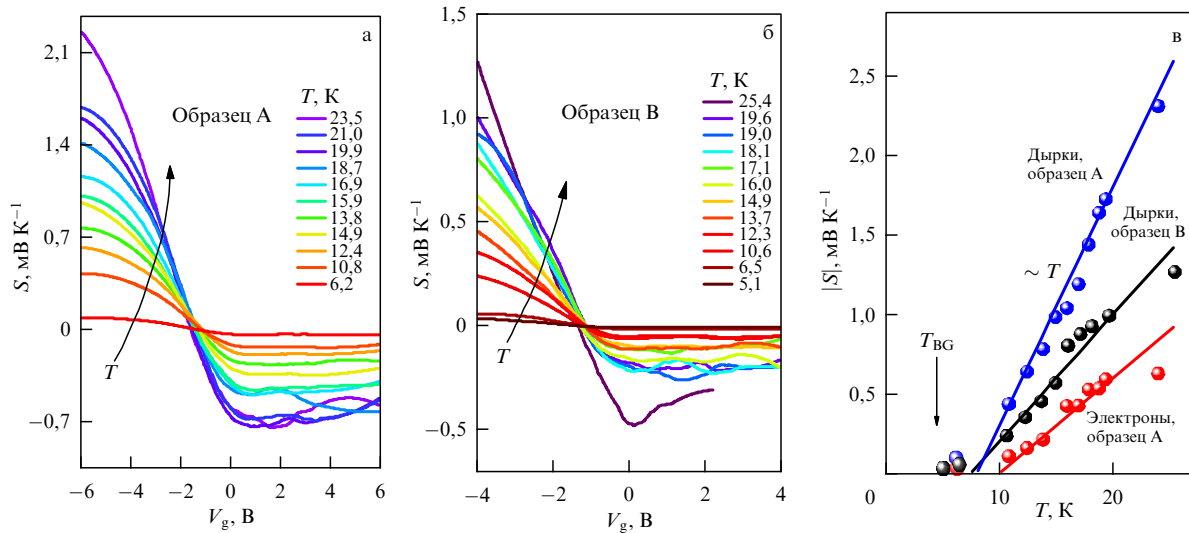


Рис. 13. Коэффициент Зеебека как функция напряжения на затворе при различных температурах для образцов А (а) и В (б). (в) Температурная зависимость коэффициента Зеебека для различных затворных напряжений и образцов: синие символы ($V_g = -6$ В, образец А), чёрные символы ($V_g = 4$ В, образец В), красные символы ($V_g = 6$ В, образец А). Сплошные линии соответствуют $S_{xx} \sim T$. Стрелки указывают температуру Блоха – Грюнрайзена.

Рисунки 13а,б показывают зависимости коэффициента Зеебека S_{xx} от напряжения на затворе при различных температурах в нулевом магнитном поле для двух образцов, демонстрирующих похожее поведение. ТермоЭДС отрицательна в области $E_v < \bar{\mu}$. По мере смещения напряжения на затворе в сторону дырок коэффициент Зеебека меняет знак, пересекая ноль при напряжении, соответствующем переходу от электрон-

но-доминантного к дырочно-доминантному вкладу. Этот переход не совпадает с точкой зарядовой нейтральности, которая была определена из измерения нулевого сопротивления Холла в магнитном поле [64, 65], или с положениями энергий E_v или E_{DF} . Величина коэффициента Зеебека оказывается более значительной для дырок. Рисунки 13а,б показывают зависимости S_{xx} от V_g для различных температур и для двух образцов.

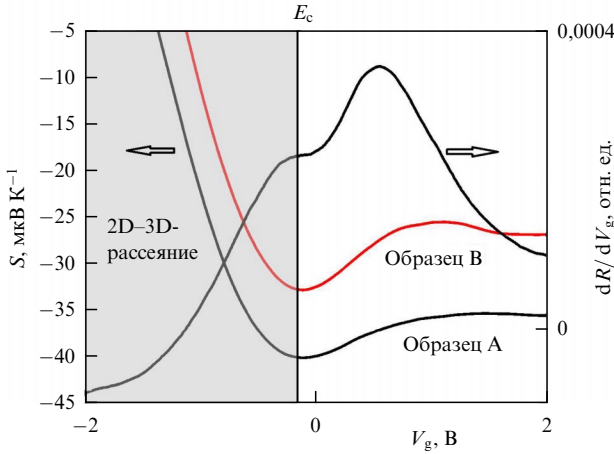


Рис. 14. Производная сопротивления dR/dV_g как функция затворного напряжения при $T = 4.2$ К для образца В и коэффициент Зеебека как функция затворного напряжения для образцов А (чёрный) и В (красный). Диапазон энергии, в котором сосуществуют поверхностные электроны и объёмные дырки, отмечен серой заливкой.

Температурная зависимость модуля коэффициента Зеебека показана на рис. 13в для выбранных затворных напряжений $V_g = 6$ и -6 В, соответствующих электронно- и дырочно-доминантным областям. Мы обнаружили, что S_{xx} линейно растёт с температурой как $S_{xx} \sim T$ в интервале $10 < T < 25$ К.

В области $E_{DF} < \bar{\mu} < E_v$, где сосуществуют 2D-электроны и 3D-дырки, идентификация механизма термоЭДС оказывается затруднительной из-за рассеяния электронов на дырках, которое может влиять на температурную зависимость $S_{xx}(T)$. Для анализа эксперимента в данном случае требуется более развитая теория. Следует отметить, что предыдущие исследования в 3D ТИ не выявили полуметаллического поведения и особенностей в сопротивлении и термоЭДС из-за трения электронно-дырочного рассеяния, поскольку образцы имели более низкую подвижность [70]. Для дальнейшего изучения особенностей, наблюдаемых в поведении сопротивления и термоЭДС, была измерена производная сопротивления dR/dV_g , как показано на рис. 14. Особенности в точках E_c и E_v отчётливо видны в обоих образцах. Интересно, что эти особенности совпадают с локальным минимумом в измерениях термоЭДС.

На основании этих наблюдений мы связываем наблюдаемые локальные минимумы в термоЭДС с 2D–3D рассеянием. Ожидается, что такое рассеяние должно увеличивать абсолютное значение термоЭДС из-за различия в термоэлектрических свойствах 2D и 3D носителей. Далее будет приведён более подробный анализ, позволяющий оценить роль 2D–3D рассеяния в термоЭДС в исследуемых образцах.

В области $\bar{\mu} < E_{DF}$ транспорт определяется 3D объёмными дырками, и не ожидается никаких особенностей в поведении сопротивления и термоЭДС.

5.3. Обсуждение

Подробные расчёты термоЭДС в двумерных полуметаллах были выполнены в работах [69, 71], где были учтены оба вклада (диффузия и фононное увлечение). Коэффициент Зеебека в нулевом магнитном поле определяется

следующим образом:

$$S_{xx} = \frac{A_x}{Z}, \quad (10)$$

$$Z = [m_e n_e \tau_h + m_h n_e \tau_e + (n_e - n_h)^2 \eta \tau_e \tau_h]^2, \quad (11)$$

$$A_x = \frac{1}{e} \left\{ [A^e \tau_e m_h - A^h \tau_h m_e + (A^e + A^h)(n_e - n_h) \eta \tau_e \tau_h] \times \right. \\ \left. \times [m_h \tau_e n_e + m_e \tau_h n_h + (n_e - n_h)^2 \eta \tau_e \tau_h] \right\}, \quad (12)$$

где $A^{e,h} = A_{\text{dif}}^{e,h} + A_{\text{ph-dr}}^{e,h}$ — электронные и дырочные члены, соответствующие вкладам диффузии и фононного увлечения в коэффициент Зеебека соответственно, n_e и n_h — плотности электронов и дырок, $m_e = 0.03m_0$ и $m_h = 0.3m_0$ — эффективная масса электронов и дырок, $g_e = 1$ и $g_h = 2$ — долиное вырождение электронов и дырок, τ_e и τ_h — время рассеяния электронов и дырок, определяемое из подвижностей электронов и дырок соответственно, k — постоянная Больцмана, $\eta = \Theta T^2$ — коэффициент трения электронов и дырок.

Диффузионный вклад не содержит никаких регулируемых параметров и определяется выражением:

$$A_{\text{dif}}^{e,h} = -\frac{\pi}{3\hbar^2} k^2 T m_{e,h} g_{e,h}. \quad (13)$$

Вклад фононного увлечения зависит от конкретного для данного материала времени релаксации фононов и температурного режима. Система входит в режим Блоха–Грюнайзена (BG) при очень низкой температуре T , когда волновой вектор акустического фонона $q = 2k_F$, где k_F — волновой вектор Ферми. В исследуемой системе обнаружено, что для плотностей $n_s \sim 10^{12} \text{ см}^{-2}$ характерная температура $T_{BG} = 2k_F \hbar / k$ (s — скорость звука) составляет около 4–6 К (рис. 13г). Если предположить, что $\tau_{ph} = \text{const}$, то для температур $T \gg T_{BG}$ получим:

$$A_{\text{ph-dr}}^{e,h} = -\frac{1}{3\hbar^5} k \tau_{ph} m_{e,h}^2 s p_{F_{e,h}}^2 g_{e,h} B_{e,h}(q_T), \quad (14)$$

где $q_T = kT/\hbar s$ — тепловой волновой вектор фонона, а для акустических фононов в кубических кристаллах функция $B_{e,h}(q_T)$ имеет вид:

$$B_{e,h}(q_T) = \frac{A_{e,h}^2 q_T}{2\delta s}, \quad (15)$$

здесь $A_{e,h}$ — константы деформационного потенциала, δ — плотность кристалла. Данные для деформационного потенциала: $A_e = -4.8$ эВ и $A_h = -0.92$ эВ. Для δ и s имеем: $\delta = 8.2 \text{ г см}^{-3}$, $s = 3.2 \times 10^5 \text{ см с}^{-1}$. Видно, что в температурном режиме $T \gg T_{BG}$ оба вклада $A_{\text{dif}}^{e,h}$ и $A_{\text{ph-dr}}^{e,h}$ линейно зависят от температуры. Следует отметить, что монополярному пределу в областях $\bar{\mu} < E_{DF}$, где транспорт определяется объёмными дырками, соответствуют следующие уравнения для диффузионного вклада и для вклада фононного увлечения (нижний индекс h):

$$S_{\text{diff, ph-dr}}^{e,h} = \pm \frac{A_{\text{dif, ph-dr}}^{e,h}}{en_{e,h}}. \quad (16)$$

В зоне проводимости, где $\bar{\mu} > E_c$, объёмные и поверхностные носители сосуществуют. Для простоты полагаем, что они описываются единой плотностью n_e , и используем уравнение (16) для расчёта коэффициента Зее-

бека. Поскольку исследуемые плёнки HgTe не слишком толстые, объёмные носители можно рассматривать как квазидвумерную систему. На рисунке 15а показано сравнение теоретических коэффициентов Зеебека, рассчитанных по уравнениям (10)–(16) для различных значений параметра Θ , и экспериментальной кривой, измеренной при $T = 10,8$ К в зависимости от V_g . Параметр Θ связан с коэффициентом трения электрон–дырка η и отвечает за особенности термоэлектродвижущей силы в области $E_{DF} < \bar{\mu} < E_c$, где сосуществуют поверхностные электроны и объёмные дырки. Рисунок 15б показывает сравнение теоретических и экспериментальных коэффициентов Зеебека, рассчитанных согласно уравнениям (10)–(16) для разных температур в зависимости от V_g . Наблюдается хорошее количественное и качественное согласие с теорией.

Для расчёта вкладов диффузии и фононного увлечения в монополярной области применяются уравнения (13)–(16) с использованием параметров образца, определённых из измерений проводимости. При этом никаких подгоночных параметров в расчётах диффузионной термоЭДС не используется. Для оценки вклада фононного увлечения время релаксации фононов предполагается постоянным: $\tau_{ph} = 0,6 \times 10^{-7}$ с, что соответствует длине релаксации $l_{ph} = s\tau_{ph} = 0,2$ мм, близкой к размеру образца. Мы исходим из того, что длина релаксации фононов определяется их рассеянием на границах подложки. Из соотношения $S_{diff}^{e,h} \ll S_{ph-dr}^{e,h}$ следует вывод, что вклад фононного увлечения доминирует при высоких температурах $T > 4,2$ К. Также следует отметить, что температурная зависимость коэффициента Зеебека является линейной при температурах выше T_{BG} для обоих вкладов.

В биполярной области $E_{DF} < \bar{\mu} < E_c$, где сосуществуют как поверхностные электроны, так и объёмные дырки, термоЭДС рассчитывается с помощью уравнений (10)–(15). Однако используемая нами модель предполагает постоянный коэффициент трения электронов и

дырок η , который не зависит от плотности электронов и дырок. Такая модель является слишком упрощённой для того, чтобы адекватно описать поведение термоЭДС в этой области. Рисунок 15а показывает, что форма кривой $S(V_g)$ ближе к экспериментальной для значения $\Theta = 1,0 \times 10^{-38}$ Дж с К⁻², что меньше значения коэффициента трения для 2D электронно-дырочной системы $\Theta = 4,8 \times 10^{-38}$ Дж с К⁻² [68]. На вставке показан коэффициент Зеебека, соответствующий интервалу $E_v < \bar{\mu} < E_c$ для $T = 4,2$ К. Видно, что термоЭДС усиливается вблизи точки $\bar{\mu} \simeq E_v$, что мы приписываем рассеянию 2D-дираковских электронов на 3D-дырках. Однако при более высоких температурах эта особенность вблизи E_v размывается.

Важно отметить, что уравнения в монополярном режиме (16) не могут быть получены из уравнения (11), (12) путём перехода к монополярному случаю. Это связано с тем, что они выведены в предположении о вырожденности систем носителей заряда. Переход к монополярному пределу при низких температурах происходит в относительно узком диапазоне химического потенциала $\Delta\bar{\mu} \sim T$ (рис. 15б), что может привести к разрыву вычисленной термоЭДС в окрестности точек перехода. Хотя наш эксперимент предлагает интересный взгляд на термоЭДС в указанной области, требуется больше экспериментальной и теоретической работы, чтобы понять роль трения между 2D-электронами и 3D-дырками в 3D-топологическом изоляторе.

Мы провели сравнение между экспериментом и монополярной моделью (уравнения (16)), которая учитывает только независимые вклады 2D-электронов и 3D-дырок в термоЭДС (не приводится в данном обзоре). Однако мы обнаружили существенное несоответствие между теорией и экспериментом, что ещё раз подтверждает наличие взаимного трения электронов и дырок в исследуемой системе, как сообщалось в предыдущих исследованиях [12, 63, 66].

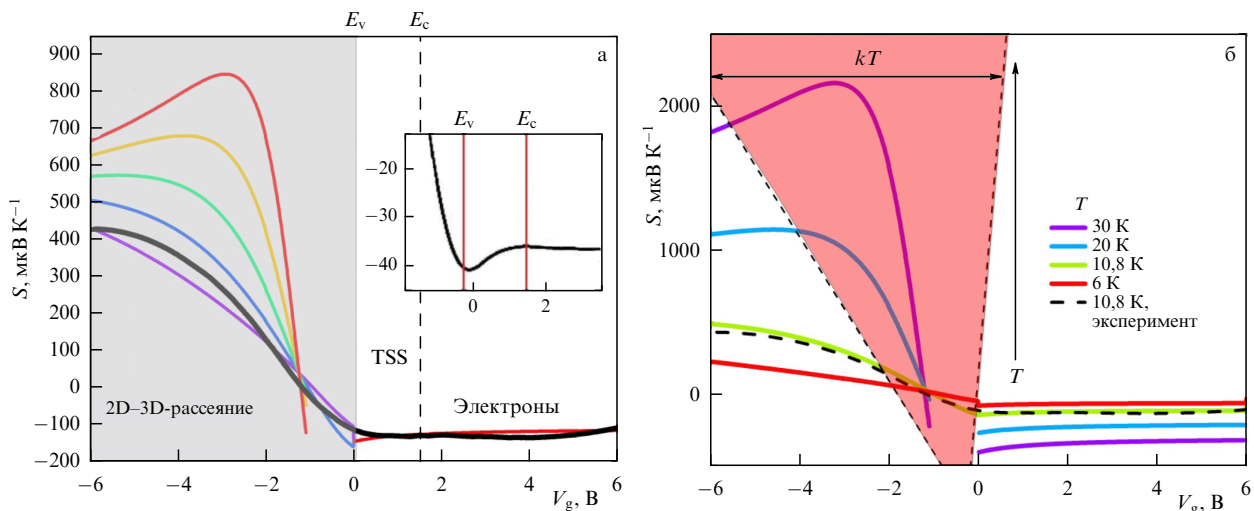


Рис. 15. (а) Коэффициент Зеебека как функция напряжения на затворе, рассчитанный из уравнений (10)–(16) с параметрами, указанными в тексте, и для различных значений Θ : 0,1; 0,25; 0,5; 1; 2 ($\times 4,8 \times 10^{-38}$ Дж с К⁻²). Чёрная кривая — коэффициент Зеебека, измеренный при $T = 10,8$ К. Диапазон V_g , в котором сосуществуют поверхностные электроны и объёмные дырки, отмечен серым фоном. Вставка показывает экспериментальную зависимость коэффициента Зеебека при $T = 4,2$ К в интервале $E_v < \mu < E_c$, где в транспорте доминируют топологические поверхностные состояния (TSS). (б) Коэффициент Зеебека как функция напряжения затвора, рассчитанный из уравнений (10)–(16) с параметрами, указанными в тексте, и для различных температур. Диапазон энергии $\mu \sim kT$, в котором представление о вырожденных электронах и дырках более не справедливо, отмечен красным фоном. Уравнения (10)–(16) не могут быть применены к этой области. Пунктирная кривая соответствует коэффициенту Зеебека, измеренному при $T = 10,8$ К.

На рисунке 15б представлена теоретическая температурная зависимость кривых $S(V_g)$. Как и ожидалось, в монополярной области $S(V_g)$ пропорциональна температуре, что согласуется с экспериментальными наблюдениями (рис. 13в). С другой стороны, в биполярной области $E_{DF} < \bar{\mu} < E_c$ коэффициент Зеебека $S(V_g)$ растёт быстрее с температурой из-за коэффициента взаимного трения η , имеющего температурную зависимость $\eta = \Theta \times T^2$. Следует отметить, что модель справедлива только для вырожденных ферми-газов и не может быть применена при высоких температурах вблизи точки зарядовой нейтральности. Поэтому для точного описания этого поведения требуется более продвинутый теоретический подход, что выходит за рамки нашего экспериментального исследования.

5.4. Выводы

Итак, в настоящем обзоре приведены результаты комплексного исследования термоэлектрических свойств трёхмерного топологического изолятора на основе толстой плёнки HgTe. Экспериментальные результаты сравниваются с теоретической моделью, и поведение термоэлектрических коэффициентов анализируется как в монополярном, так и в биполярном режимах. Показано, что в монополярном режиме вклад фононного увлечения доминирует над диффузионной термоЭДС, и длину релаксации фононов определяем, принимая во внимание этот вклад. Результаты показывают, что рассеяние фононов на границах структуры играет значительную роль, а длина релаксации фононов не зависит от температуры. В биполярной области мы наблюдаем модификацию коэффициента Зеебека из-за рассеяния 2D электронов на 3D дырках, и теоретический анализ показывает хорошее согласие с экспериментальными данными. Однако для полного понимания термоЭДС в таком нетривиальном режиме необходимо более детальное понимание поведения взаимного трения. В целом, данная работа проливает свет на фундаментальные термоэлектрические свойства топологических изоляторов и даёт ценную информацию для разработки будущих термоэлектрических устройств.

6. ТермоЭДС в двумерном полуметалле в квантовой яме HgTe

Сосуществование двух типов носителей заряда противоположного знака в 2D полуметалле в квантовой яме HgTe создаёт довольно интересную ситуацию с точки зрения влияния их взаимодействия на различные транспортные явления. В частности, можно было бы ожидать влияния бинарных столкновений между квазичастицами разного типа. Согласно принципу Паули, в таких столкновениях могут участвовать только носители в интервале энергий порядка kT около энергии Ферми, что предположительно должно приводить к температурной зависимости сопротивления $\sim T^2$. Сопротивление однокомпонентной системы не зависит от бинарных столкновений, если только не разрешены процессы Umklapp, включающие вектор обратной решётки в уравнении сохранения импульса. Это связано с тем, что в однокомпонентной системе все носители имеют одинаковую эффективную массу, а сохранение импульса автоматически подразумевает сохранение полного тока. Однако если в системе присутствуют носители более чем одного типа, то сохранение импульса в актах бинарного рассея-

ния с участием частиц разного типа уже не обеспечивает сохранение электрического тока. В таком случае сопротивление должно определяться в том числе и столкновениями между частицами разного типа [72–77].

Ожидаемым экспериментальным доказательством влияния взаимного рассеяния носителей разного типа на величину сопротивления было обнаружение температурной зависимости сопротивления $\sim T^2$ в 2D полуметалле (вырожденной электронно-дырочной системе) на основе квантовой ямы HgTe, успешно описанное теорией [67, 68], где бинарные столкновения были учтены в виде коэффициента трения, пропорционального T^2 (рис. 16а). Термоэлектрические свойства полуметаллов исследовались в многочисленных теоретических работах, где особое внимание уделялось влиянию неупругого рассеяния электронов на дырках на отклонения от закона Видемана–Франца [78–80]. Недавние исследования показали, что рассеяние электронов на дырках оказывает существенное влияние на термоЭДС, приводящее к критическому подавлению соотношения Лоренца.

В последние годы экспериментально исследована термоЭДС в двумерной электронно-дырочной системе в квантовой яме HgTe [69]. Разработана соответствующая теория, учитывающая важную роль межчастичного рассеяния в двух основных вкладах в термоЭДС. Сравнение теории с экспериментом показало, что термоЭДС в двумерной электронно-дырочной системе определяется двумя вкладами: диффузией и фононным увлечением, причём последний механизм термоЭДС преобладает над первым. Сделаны выводы о важной роли электронно-дырочного рассеяния в формировании обоих механизмов термоЭДС.

6.1. Сопротивление и подвижность в 2D полуметаллах

Транспортные и термоэлектрические измерения, обсуждаемые в данном разделе, были выполнены с использованием макроскопического типа образцов с шириной квантовой ямы 21 нм и методов, подробно описанных в разделе 3.

На рисунке 16а показана типичная зависимость сопротивления двумерного полуметалла от напряжения на затворе и температуры. При $V_g \approx -0,6$ В происходит переход между двумерным металлом и двумерным полуметаллом, сопровождающийся резким изменением характера температурной зависимости сопротивления. Справа от перехода зависимость $\rho(T)$ слабая и представляет собой типичную температурную зависимость двумерного металла при $k_F l \gg 1$ (k_F и l — волновой вектор и длина свободного пробега электрона) и низких температурах, когда рассеяние на фононах практически отсутствует, а температурная зависимость определяется эффектами слабой локализации. Заметное изменение $\rho(T)$ наблюдается слева от перехода в полуметаллическое состояние. Здесь $\rho(T)$ обусловлена рассеянием электронов на дырках и, таким образом, пропорциональна квадрату температуры (рис. 16б).

Зависимость от затворного напряжения таких параметров, как электронная плотность $n_e(V_g)$, дырочная плотность $n_h(V_g)$, электронная подвижность $\mu_e(V_g)$, дырочная подвижность $\mu_h(V_g)$, может быть определена из подгонки двухкомпонентной модели Друде к классическим магнетопольным зависимостям $\rho_{xx}(B)$ и $\rho_{xy}(B)$. $\Theta(V_g)$ — коэффициент, характеризующий силу электронно-дырочного трения, находится из подгонки экспе-

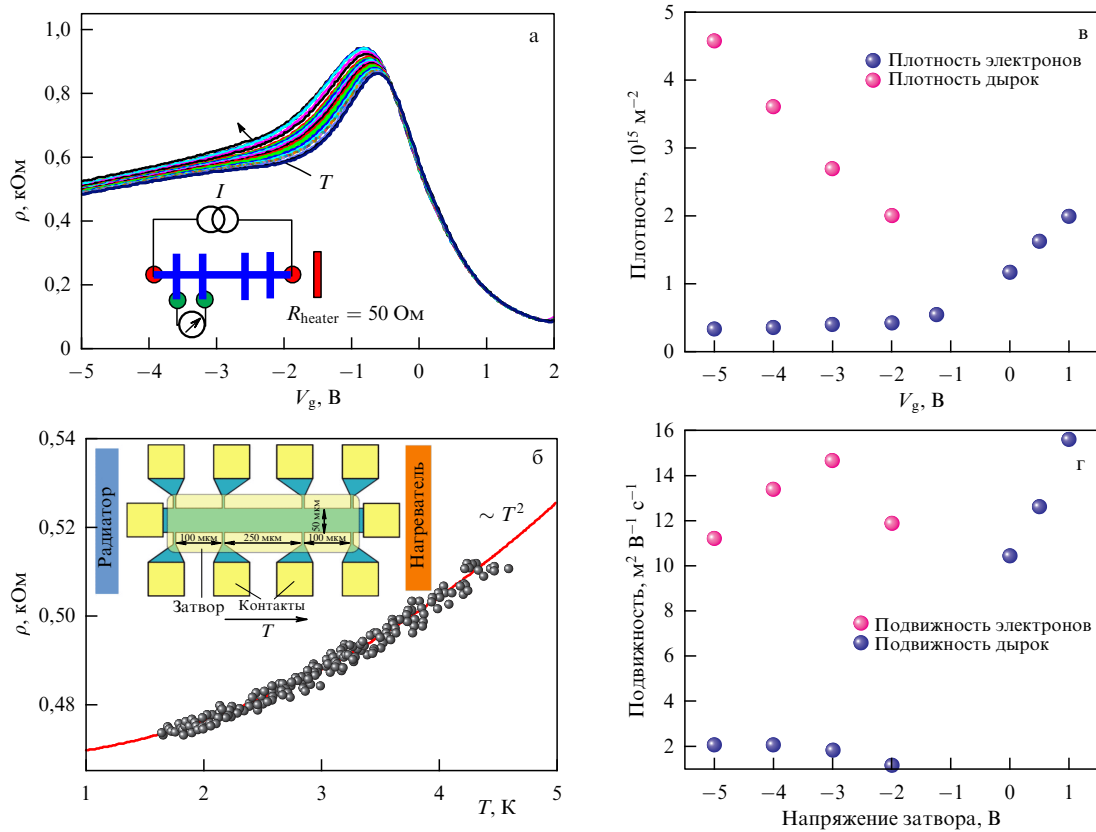


Рис. 16. (а) Сопротивление в зависимости от напряжения на затворе при различных температурах в диапазоне $T = 2,1\text{--}6$ К. (б) Температурная зависимость сопротивления при $V_g = -5$ В. На вставке показана изучаемая структура и направление градиента температуры, создаваемого нагревателем (справа) и холодным якорем (слева). (в) Плотность электронов и дырок, (г) подвижность электронов и дырок в зависимости от напряжения на затворе. Параметры были определены путём подгонки двухкомпонентной модели Друде к зависимостям классического магнитосопротивления в слабом поле $\rho_{xx}(B)$ и $\rho_{xy}(B)$.

риментальной зависимости $R(T)$ в области перекрытия зон к теоретической модели, учитывающей рассеяние между дырками и электронами [67, 68].

Определённые таким образом зависимости транспортных параметров приведены на рис. 16в,г, из которого можно сделать следующие выводы: 1) полуметаллическое состояние начинается примерно с $V_g \approx -1$ В; 2) в точке нейтральности заряда $P_s = N_s \approx 10^{11} \text{ см}^{-2}$; 3) область перекрытия зоны проводимости и валентной зоны составляет около 10 мэВ, что согласуется с более ранними исследованиями 20 нм квантовых ям HgTe [16, 67]; 4) для всех отрицательных смещений на рис. 16а уровень Ферми никогда полностью не покидает зону проводимости вследствие высокой плотности дырочных состояний в валентной зоне.

6.2. ТермоЭДС в двумерном полуметалле

На рисунке 17а показаны зависимости разности потенциалов V_{th} , вызванной градиентом температуры, от напряжения на затворе между потенциометрическими контактами холловского мостика длиной $L = 100$ мкм. На вставке данного рисунка показана зависимость сигнала термоЭДС от мощности, приложенной к нагревателю. Хорошо видно, что измеренный сигнал пропорционален этой мощности, а значит, он действительно обусловлен термоЭДС, а не возможными наводками. Качественно проанализируем поведение термоЭДС, показанное на рис. 17а. Начнём с зависимости от

затворного напряжения. При напряжениях на затворе, соответствующих электронному металлу, термоЭДС относительно мала и уменьшается с увеличением плотности носителей в соответствии с формулой Мотта для термоЭДС металлов. ТермоЭДС меняет знак вблизи точки перехода и начинает возрастать почти линейно с увеличением отрицательного смещения на затворе (с ростом плотности дырок). На рисунке 17б показаны зависимости коэффициента Зеебека $S = V_{th}/\Delta T$ от напряжения на затворе (ΔT — разность температур между потенциальными контактами, на которых измеряется сигнал V_{th}) при различных температурах. Видно, что коэффициент Зеебека увеличивается с ростом температуры образца.

Для более точного описания экспериментальных результатов, полученных в данной работе, нами разработана теория диффузионной составляющей термоЭДС для двумерной электронно-дырочной системы, состоящей из двух типов вырожденных частиц: электронов и дырок. При наличии градиента температуры, химического потенциала и электронно-дырочного трения средние скорости в подсистемах удовлетворяют уравнению

$$n_v e_v \mathbf{E} - g_v m_v \frac{\pi T}{3\hbar^2} \nabla T - \frac{m_v n_v}{\tau_v} \mathbf{V}_v = \eta n_v n_{\bar{v}} (\mathbf{V}_v - \mathbf{V}_{\bar{v}}). \quad (17)$$

Здесь нижний индекс $v = (e, h)$ указывает величины, относящиеся к электронам (e) и дыркам (h); n_e (n_h) —

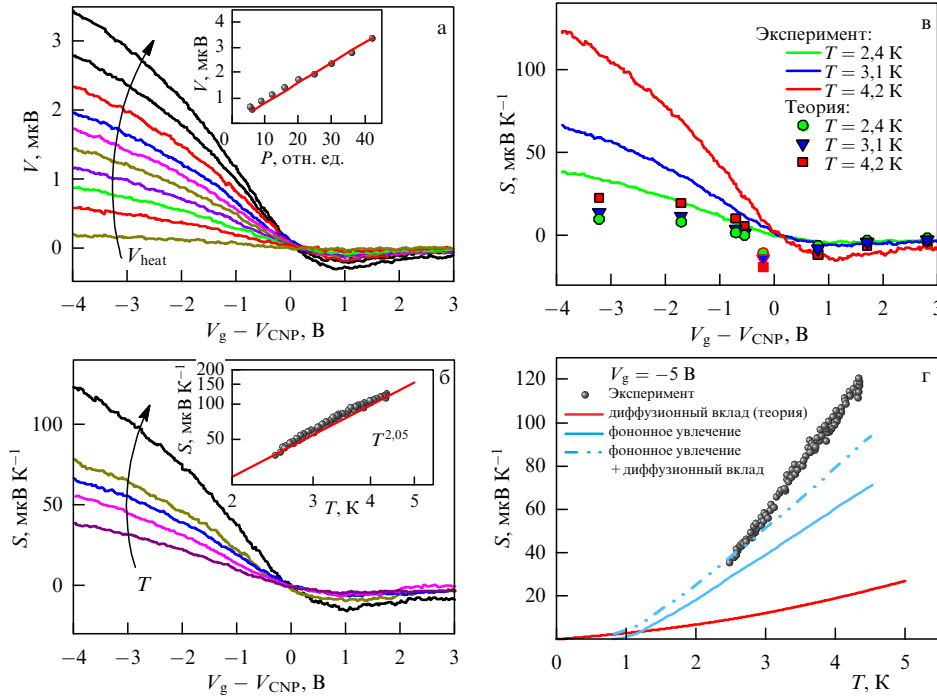


Рис. 17. (а) ТермоЭДС в зависимости от напряжения на затворе для напряжений, приложенных к нагревателю V_{heat} , увеличивающихся (как показано стрелкой) от 2 до 6,5 В с шагом 0,5 В, при температуре $T = 4,2$ К. На вставке показана термоЭДС в зависимости от мощности нагревателя при $V_g = -5$ В. (б) Коэффициент Зеебека в зависимости от напряжения на затворе при температурах $T = 2,4; 2,8; 3,1; 3,3$ и $4,2$ К. $V_{\text{CNP}} = -1,1$ В. (в) Коэффициент Зеебека в зависимости от напряжения на затворе при температурах $T = 2,4; 2,8; 3,1; 3,3$ и $4,2$ К; линии — эксперимент, символы — расчёт с помощью уравнений (18) и (19) слева и справа от точки нейтральности заряда соответственно с использованием параметров, полученных из транспортных измерений. (г) Температурная зависимость коэффициента Зеебека в двумерном полуметалле: символы — эксперимент для $V_g = -5$ В; нижняя красная линия — диффузионный вклад, который соответствует указанному напряжению на затворе и рассчитывается по уравнению (18); сплошная синяя линия представляет собой рассчитанный вклад фононного увлечения, как объяснено в тексте; штрихпунктирная голубая линия представляет собой сумму фононного увлечения, показанного сплошной синей линией, и диффузионного вклада, показанного красной линией.

плотность электронов (дырок); g_v — число долин ($g_e = 1$, $g_h = 2$); V_v , m_v , e_v — средняя скорость, эффективная масса и заряд частиц типа v ($e_{e,h} = \mp e$, e — заряд дырки) соответственно; τ_v — время релаксации импульса при рассеянии на примесях; η — коэффициент трения; а T — температура в энергетических единицах. Коэффициент трения $\eta = \theta T^2$ определяется электронно-дырочным рассеянием через механизм Ландау. Уравнение (17) является обобщением уравнений, представленных в [68, 81], на случай существования градиента температуры.

Из условия, что полная плотность тока $\mathbf{j} = e(-n_e \mathbf{V}_e + n_h \mathbf{V}_h)$ равна нулю, коэффициент Зеебека получается в виде

$$S = -\frac{\pi}{3e\hbar^2} T \times \frac{m_e m_h (g_e \tau_e - g_h \tau_h) + \eta \tau_e \tau_h (g_e m_e + g_h m_h) (n_e - n_h)}{m_h n_e \tau_e + m_e n_h \tau_h + (n_e - n_h)^2 \eta \tau_e \tau_h}. \quad (18)$$

Отметим, что в формуле (18) вклад в ток от любого типа носителей не равен нулю при обращении в нуль его концентрации, т.е. формула не имеет перехода в монополярный предел:

$$S_{e,h}^{(0)} = \mp \frac{\pi}{3e\hbar^2} T \frac{m_{e,h} g_{e,h}}{n_{e,h}}. \quad (19)$$

В этом пределе, в отличие от (18), отсутствуют слагаемые, обусловленные вторым сортом носителей, в частности, его время релаксации и взаимное трение. Причина отличия формул состоит в том, что формулы (18) и (19) получены в предположении о вырожденности ферми-газов. На самом деле при низкой температуре переход в монополярный случай происходит в относительно узком диапазоне изменения химического потенциала $\Delta\mu \sim T$. Присутствие межсортного трения искажает линейную зависимость S от температуры. В пределе низкой температуры $\eta \propto T^2$ приводит к кубическим по температуре поправкам к линейной зависимости.

Трение может стать преобладающим механизмом рассеяния ($\eta \rightarrow \infty$) при более высоких температурах. В таком случае уравнение (18) становится независимым от всех релаксационных констант:

$$S = -\frac{\pi}{3e\hbar^2} T \frac{m_e g_e + m_h g_h}{(n_e - n_h)}. \quad (20)$$

Данная формула справедлива вдали от точки зарядовой нейтральности (ТЗН). Вблизи неё происходит смена знака S (более точно, в точке смены знака числителя (18)). Коэффициент Зеебека в области применимости (20) имеет линейную температурную зависимость, так же как при низкой температуре, но с более сильным наклоном. Это приводит к тому, что в промежуточном диапазоне температур зависимость может быть близка к квадратичной.

На рисунке 17в представлены результаты сравнения рассчитанных с помощью выражений (18) и (19) зависимостей коэффициента Зеебека $S(V_g)$ с экспериментальными. Все необходимые для расчёта по формулам (18) и (20) параметры (подвижность и концентрация электронов и дырок, коэффициент взаимного трения) и их зависимость от затворного напряжения были получены ранее из транспортных измерений [68], а также из циклотронного резонанса (эффективные массы электронов и дырок) [63]. Градиент температуры, необходимый для определения коэффициента Зеебека, измерялся экспериментально согласно описанной в начале статьи методике. Таким образом, в сравнении теории и эксперимента, представленном на рис. 17в, подгоночные параметры отсутствуют.

Качественное поведение коэффициента Зеебека справа от точки зарядовой нейтральности, где находится электронный металл, соответствует теории Мотта для металлов, которая предсказывает уменьшение коэффициента Зеебека с ростом плотности носителей. Для сравнения с экспериментальными данными в этом диапазоне напряжений затвора мы использовали монополярную формулу (19) для электронов, которая является формулой Мотта в предположении, что $\tau(\varepsilon) = \text{const}$ (τ — время релаксации импульса, ε — энергия). Как видно, коэффициенты Зеебека, рассчитанные по уравнению (19), удовлетворительно согласуются с экспериментальными зависимостями (рис. 17в).

Напротив, левее точки зарядовой нейтральности на рис. 17в, т.е. в области затворных напряжений, соответствующих формированию двумерного полуметалла, согласие эксперимента и теории (уравнение (18)) значительно ухудшается. В этом диапазоне затворных напряжений теория даёт коэффициенты Зеебека, заниженные примерно в 4 раза по сравнению с полученными экспериментально (рис. 17в). Такое расхождение, по-видимому, возникает из-за того, что уравнение (18) описывает только диффузионный вклад в термоЭДС полуметалла. Однако измеренная термоЭДС может включать в себя не только диффузионный вклад, но и вклад фононного увлечения [82], который в нашей теории не учитывается. Как известно, фононное увлечение пропорционально квадрату массы носителей заряда. Массы электронов и дырок в 20-нм квантовой яме HgTe составляют $m_e = 0,025m_0$ и $m_h = 0,15m_0$ соответственно. По этой причине вклад фононного увлечения слева от точки нейтральности заряда (т.е. в области, где доминируют дырки) является значительным, тогда как справа от точки нейтральности заряда, где существует двумерный металл, он малозаметен.

На рисунке 17г символами показана экспериментальная температурная зависимость коэффициента Зеебека при $V_g = -5$ В, когда в системе преобладают дырки. Экспериментальная зависимость $S(T)$ линейна и экстраполируется к $S = 0$ при $T_0 \approx 1,5$ К. Полученные экспериментальные данные сравниваются с предсказаниями теории, полученными для различных условий [83]. Теоретические кривые на рис. 17г соответствуют рассчитанным вкладам в S_{xx} от диффузионной компоненты и от фононного увлечения. Мы используем следующие значения параметров, соответствующие $V_g = -5$ В: $n_e = 3,3 \times 10^{10} \text{ см}^{-2}$, $n_h = 4,57 \times 10^{11} \text{ см}^{-2}$, $m_e = 0,025m_0$, $m_h = 0,15m_0$, $\mu_e = 11,2 \text{ м}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$, $\mu_h = 2,1 \text{ м}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$, $\Theta = 4,8 \times 10^{-38} \text{ Дж с К}^{-2}$. Вклад фононного увлечения был получен для механизма релаксации фононов с постоянной длиной свободного пробега.

Также при расчётах использовались следующие данные, взятые из литературы: деформационный потенциал: $A_c = -4,6$ эВ [84] и $A_h = -0,92$ эВ [85]; плотность HgTe $\rho = 8,2 \text{ г см}^{-3}$ и скорости звука $s = 3,2 \times 10^5 \text{ см с}^{-1}$. Согласно рис. 17г, экспериментальная зависимость не описывается диффузионным вкладом. Расчётная величина диффузионной компоненты существенно меньше величины термоЭДС, определённой экспериментально. Кроме того, температурная зависимость существенно отличается от экспериментальной: плавно растущий наклон в теории вместо линейной экспериментальной зависимости, экстраполирующейся к 0 при $T = 1,5$ К. При расчёте вклада фононного увлечения мы пренебрегли механизмом релаксации фононов Херринга: его учёт приводит к результату, на много порядков превышающему экспериментальные данные. Кроме того, подобный расчёт имеет слишком сильную (и обратную по сравнению с экспериментом) температурную зависимость. Поэтому мы рассчитали вклад фононного увлечения для постоянной длины свободного пробега фононов. Фононное увлечение для постоянной длины свободного пробега фононов даёт результат, наиболее соответствующий экспериментальной кривой. Коэффициент η слабо влияет на зависимость, и им можно пренебречь. Для получения достаточно большого вклада увлечения длина свободного пробега фононов l_{ph} также должна быть большой. Однако она ограничена сверху размером образца $\sim 0,1$ см. Другое, более сильное, ограничение по поперечной ширине образца $\sim 10^{-5}$ см не актуально, потому что фононы могут проникать за пределы металлического затвора. Таким образом, разрешённая область l_{ph} составляет $10^{-5} \text{ см} < l_{ph} < 0,1 \text{ см}$. Удовлетворительное соответствие экспериментальной кривой достигается при $l_{ph} = 0,06 \text{ см}$. Данное значение попадает в допустимый диапазон. Видно, что линейная зависимость от температуры при относительно высокой температуре сменяется сильным степенным поведением при низкой температуре. Это соответствует экспериментальному наблюдению. Отсюда следует вывод о доминировании в термоЭДС фононного увлечения, а линейная температурная зависимость объясняется тем, что длина свободного пробега является ограниченной. Баллистическое фононное увлечение, которое имеет нелинейную температурную зависимость, хуже соответствует эксперименту.

6.3. Выводы

В заключение следует отметить, что в работе изучено поведение термоЭДС двумерного полуметалла в квантовой яме HgTe в нулевом магнитном поле. Проведён анализ экспериментальных зависимостей термоЭДС от напряжения на затворе при различных температурах. Полученные экспериментальные зависимости сопоставлены с теорией, в которой поведение соответствующих коэффициентов переноса объясняется с учётом взаимного трения двух групп носителей разного знака, присутствующих в квантовой яме. Показано, что расчётные значения коэффициентов переноса, соответствующие диффузионному вкладу, примерно на порядок меньше полученных в эксперименте. Таким образом, термоЭДС двумерного полуметалла в квантовой яме HgTe определяется в основном вкладом фононного увлечения. Учёт этого вклада позволяет определить длину релаксации фононов, которая оказывается не зависящей от температуры и обусловлена рассеянием фононов на границах структуры.

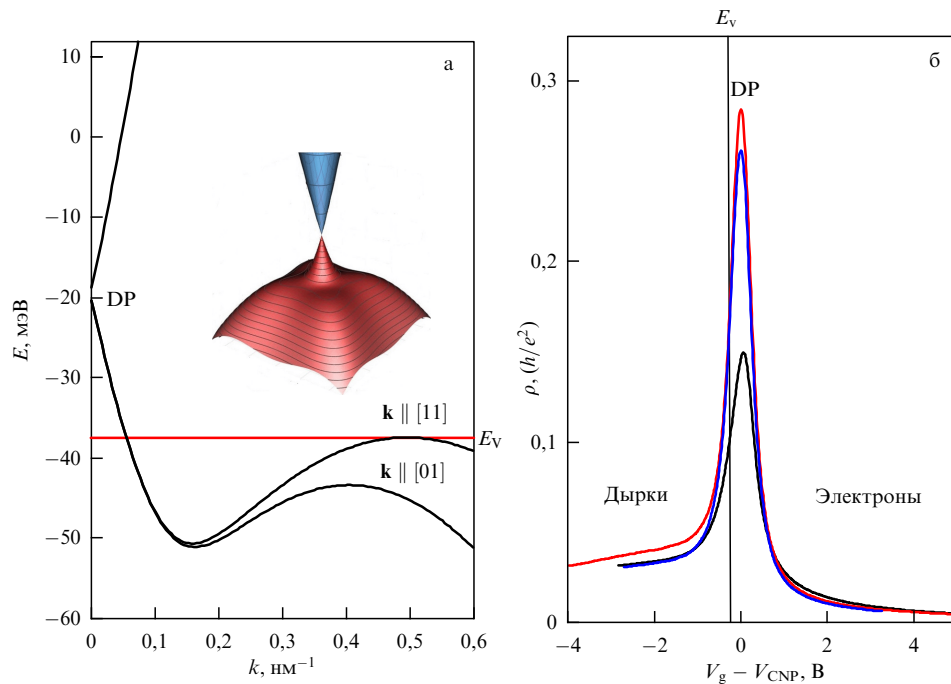


Рис. 18. (а) Энергетический спектр квантовой ямы HgTe шириной 6,3 нм. (б) Сопротивление как функция затворного напряжения для разных образцов, $T = 4,2$ К. Красная кривая — образец А, синяя — образец В, чёрная — образец С.

7. ТермоЭДС в 2D полуметалле Вейля

7.1. Введение

Недавние теоретические и экспериментальные исследования показывают, что в квантовых ямах HgTe толщиной 6,3 нм возможна реализация двумерного полуметалла Вейля. Двумерный полуметалл Вейля — топологически нетривиальная система, двумерная зонная структура которого характеризуется наличием особых точек Вейля в зоне Бриллюэна. Точки Вейля — это точки в импульсном пространстве, где валентная зона и зона проводимости соприкасаются друг с другом, что приводит к ненулевой кривизне Берри и топологически защищённым поверхностным состояниям.

В отличие от трёхмерных полуметаллов Вейля, двумерные полуметаллы Вейля не имеют объёмной запрещённой зоны. Их топологически нетривиальная зонная структура описывается дираковским дисперсионным соотношением вблизи точек Вейля.

Ниже представлены результаты экспериментального исследования транспортных свойств бесщелевой квантовой ямы HgTe толщиной 6,3–6,5 нм. На рисунке 18а схематически изображён энергетический спектр данной системы, представляющий собой одиночный дираковский конус в центре зоны Бриллюэна, с которым во многом связаны специфические свойства электронного транспорта в данной системе [12, 18, 63, 86]. При этом валентная зона имеет боковые локальные максимумы, в которых формируются долины тяжёлых дырок в дополнение к дыркам дираковского типа в центре зоны Бриллюэна. Минимум энергии тяжёлых дырок отмечен как E_v . Сосуществование 2D электронов и дырок ранее наблюдалось в широких квантовых ямах на основе HgTe в полуметаллическом режиме, причём модификация спектра зависела от толщины ямы [12]. Как отмеча-

лось в разделе 2, при толщинах КЯ $d_c > 6,3–6,5$ нм происходит инверсия энергетического спектра, соответствующая формированию 2D топологического изолятора. При дальнейшем увеличении толщины КЯ, $d > 12$ нм не прямое перекрытие боковых максимумов валентной зоны с минимумом зоны проводимости приводит к появлению 2D полуметаллического состояния [67, 68]. Более толстые плёнки напряжённого HgTe ($d \sim 50–60$ нм) представляют собой трёхмерный топологический изолятор [61, 64, 71]. Общая картина модификации спектра КЯ с изменением её толщины показана на рис. 1 в разделе 2.

Сосуществование электронов и дырок в 2D полуметалле HgTe приводит к ряду необычных свойств, включая квадратичную температурную зависимость сопротивления при низких температурах из-за взаимного рассеяния электронов и дырок [67, 68]. В трёхмерных топологических изоляторах перекрытие между 2D-топологическим поверхностным состоянием и 3D-объёмными дырками также приводит к специфической температурной зависимости сопротивления, обусловленной рассеянием электронов на дырках [56, 64]. Сосуществование дырок дираковского типа и тяжёлых дырок при конечном волновом векторе k приводит к увеличению сопротивления с температурой, поскольку малоподвижные тяжёлые дырки поглощают импульс во время столкновения [68]. Таким образом, бесщелевая яма HgTe позволяет исследовать эффекты, связанные с рассеянием между обычными и дираковскими частицами.

Термоэлектрические свойства материалов очень чувствительны к механизму рассеяния и могут быть использованы для получения дополнительной информации о столкновениях между носителями. Предыдущие исследования сопротивления и термоэлектрических транспортных свойств в 2D полуметалле HgTe [56, 67] и в

трёхмерных плёнках HgTe [71], описанные в предыдущих разделах, позволили получить параметры, характеризующие взаимное рассеяние носителей разного типа в этих системах.

Более того, в отличие от предыдущих систем, полуметаллы Вейля имеют линейный спектр и, как ожидается, должны демонстрировать увеличение коэффициента Зеебека вследствие зависимости плотности состояний от энергии. Разложение Бете–Зоммерфельда для коэффициента Зеебека можно записать следующим образом:

$$S = \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B}{e} (k_B T) \left[\frac{1}{D_e(\varepsilon)} \frac{dD_e(\varepsilon)}{d\varepsilon} + \frac{1}{\tau(\varepsilon)} \frac{d\tau(\varepsilon)}{d\varepsilon} \right], \quad (21)$$

где как D_e — плотность состояний, так и τ — время релаксации, зависят от энергии. Таким образом, коэффициент Зеебека должен включать в себя зависимость от плотности состояний и подвижности.

Графен — наиболее известный пример материала со спектром Дирака. Термоэлектрический отклик в материалах может возникать вследствие двух различных механизмов: диффузионного и фононного увлечения. Из-за слабой электрон-фононной связи в графене вклад фононного увлечения в термоэлектрический отклик считается незначительным, а диффузионный механизм доминирует при низких температурах. Существует несколько исследований (в частности, [87]), в которых исследовалось поведение термоЭДС графена в диапазоне температур 10–300 К.

7.2. Экспериментальные результаты и обсуждение

На рисунке 18б показано удельное сопротивление $\rho(V_g)$ при нулевом магнитном поле для трёх образцов, изготовленных из разных шайб в разное время. В таблице 2 приведены параметры этих образцов, включая толщину d , затворное напряжение, соответствующее дираковской точке V_{CNP} , значение удельного сопротивления ρ_{max} при $V_g = V_{\text{CNP}}$ и подвижность электронов $\mu = \sigma/n_s e$ для плотности $n_s = 10^{11} \text{ см}^{-2}$.

Таблица 2. Основные параметры образцов с бесщелевой КЯ HgTe при $T = 4,2 \text{ К}$

Образец	d , нм	V_{CNP} , В	ρ_{max} (h/e^2)	μ , $\text{см}^2 \text{ В}^{-1} \text{ с}^{-1}$
A	6,3	−1,8	0,28	56000
B	6,4	−1,28	0,27	90000
C	6,3	−1,16	0,15	59600

Когда химический потенциал смещается из электронной в дырочную часть спектра, в сопротивлении наблюдается узкий пик. Ожидаемое значение сопротивления вблизи дираковской точки (DP) соответствует универсальному значению $h/2,5e^2$, предсказанному для транспорта в этой системе в рамках модели перколяции через сеть одномерных проводящих каналов [21, 88, 89]. Выше дираковской точки при достаточно высоких значениях плотности носителей заряда спектр электронов является линейным, а время релаксации импульса и проводимость можно рассчитать из уравнений (1), (2), что приводит к выражению для проводимости $\sigma(n_s)$ с линейной зависимостью от концентрации электронов. Однако флуктуации в запрещённой зоне из-за шероховатости могут при-

вести к дополнительному рассеянию вдали от точки зарядовой нейтральности. Такой нетривиальный механизм рассеяния рассматривается в [90]. Поведение проводимости на дырочной стороне является более сложным из-за немонотонной зависимости энергии Ферми. В двумерной системе поведение уровня Ферми сильно зависит от плотности состояний. В обычном двумерном электронном газе уровень Ферми прямо пропорционален концентрации заряда, поскольку плотность состояний остаётся постоянной. Однако в системе с линейным спектром, подобным дираковскому, уровень Ферми (ε_F) пропорционален квадратному корню из плотности заряда. Когда химический потенциал приближается к энергии $E_v \sim 15–20 \text{ мэВ}$, он пиннингуется в зоне тяжёлых дырок с высокой плотностью состояний, и его зависимость от концентрации носителей становится очень слабой.

Плотность состояний для частицы с линейным спектром прямо пропорциональна её энергии. Однако для исследования особенностей, обусловленных дираковской точкой, необходимо использовать гауссово распределение, чтобы сгладить любые неоднородности потенциала, описываемые параметром ζ , которые могут присутствовать в образце. При этом плотность состояний выглядит следующим образом:

$$D_e(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{2\pi\hbar v_F^2} \left(\text{erf}\left(\frac{\varepsilon}{\sqrt{2}\zeta}\right) + 1 - \text{erf}\left(\frac{\varepsilon}{\sqrt{2}\zeta}\right) + \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{2}{\varepsilon} \zeta \exp\left(-\frac{\varepsilon^2}{\zeta^2}\right) \right). \quad (22)$$

Плотность состояний тяжёлых дырок остаётся постоянной, но на неё влияет беспорядок. В результате беспорядка плотность состояний тяжёлых дырок вблизи края валентной зоны становится шире, что количественно определяется параметром δ . Следует иметь в виду, что из-за большого значения массы тяжёлых дырок их плотность состояний почти в десять раз больше, чем у дираковских носителей заряда. Проводимость дираковских частиц даётся уравнением (1), в то время как проводимость и подвижность тяжёлых дырок можно получить из обычных транспортных уравнений.

Используя экспериментально определённую полную проводимость, можно определить вклады в проводимость дираковских частиц и тяжёлых дырок, используя уравнение (1) и уравнение (22). Полученные результаты представлены на рис. 19а. Также были определены зависимости времён релаксации от химического потенциала для каждого типа носителей по отдельности, рис. 19б. Видна немонотонная зависимость этих величин от $(\bar{\mu})$, что действительно может влиять на коэффициент Зеебека в соответствии с уравнением (21).

На рисунке 20а приведены зависимости термоЭДС трёх образцов от концентрации носителей. Зависимости имеют биполярный вид, подобный тому, что наблюдался в полуметаллах, обсуждавшихся в предыдущем разделе. Этого следовало ожидать, поскольку при изменении напряжения на затворе уровень Ферми смещается от зоны проводимости к валентной зоне, в результате чего знак коэффициента Зеебека меняется с отрицательного (электроны) на положительный (дырки), проходя через точку Дирака. Вставка показывает температурную зависимость коэффициента Зеебека при фиксированном зна-

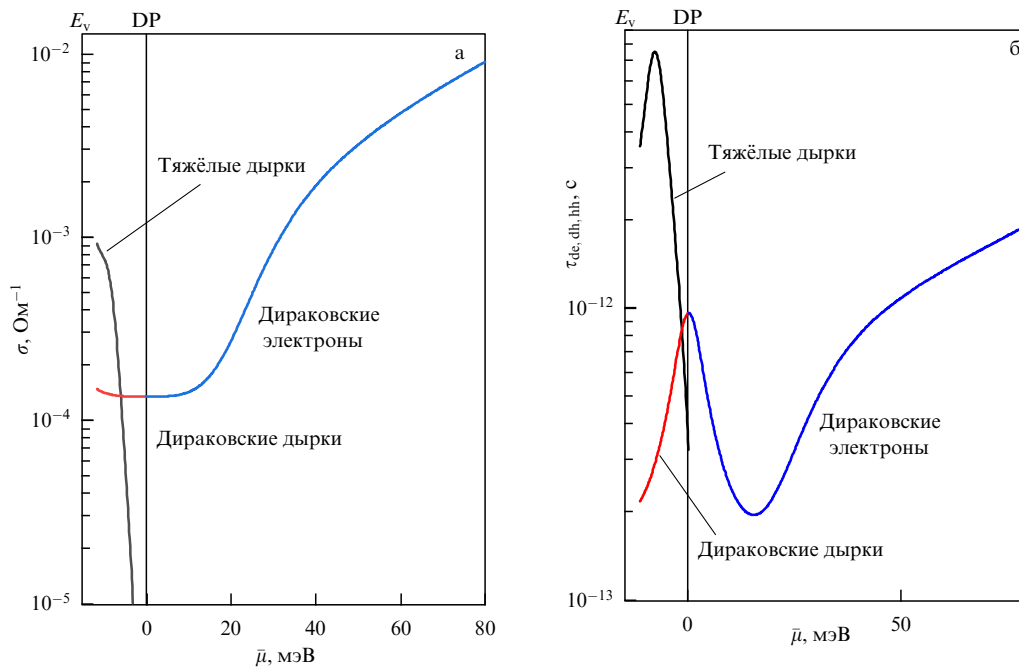


Рис. 19. (а) Вклад в проводимость от различных типов носителей в бесщелевой квантовой яме HgTe 6,3 нм как функция химического потенциала для образца А. (б) Транспортное время релаксации, извлечённое из проводимости и зависящее от энергии плотности состояний. Параметры плотности состояний: $\delta = 5$ мэВ, $\zeta = 3$ мэВ (уравнение (22)). Синяя кривая — дираковские электроны, красная — дираковские дырки, чёрная — тяжёлые дырки.

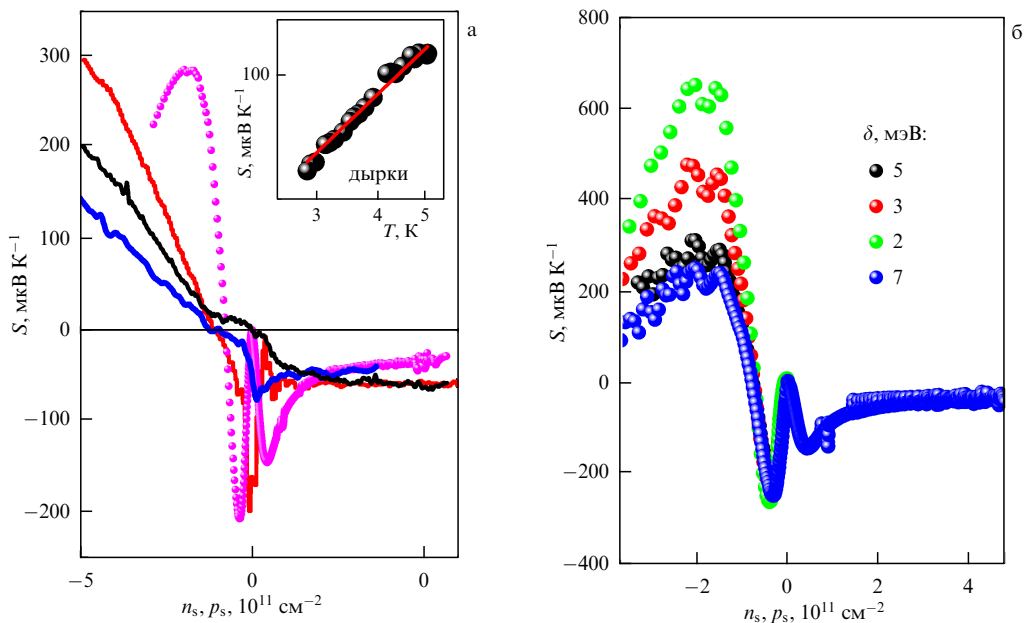


Рис. 20. (а) Коэффициент Зеебека как функция концентрации носителей, измеренный в разных образцах: красная кривая — образец А, синяя — образец В, чёрная — образец С, $T = 4,2$ К. Вставка — температурная зависимость коэффициента Зеебека для дырок ($V_g = 4$ В), красная кривая — $S \sim T^{1,5}$. Символы — теоретическая зависимость, рассчитанная по уравнению Мотта с параметрами для плотности состояний: $\delta = 5$ мэВ, $\zeta = 3$ мэВ (уравнение (22)). (б) Коэффициент Зеебека как функция концентрации носителей, рассчитанный по уравнению Мотта для различных параметров плотности состояний, $\zeta = 3$ мэВ (уравнение (22)), $T = 4,2$ К.

чении затворного напряжения для дырочной стороны. ТермоЭДС имеет зависимость $\sim T^{1,5}$, что близко к ожидаемому поведению для диффузионного вклада. Вблизи точки зарядовой нейтральности наблюдаются флуктуации, которые не воспроизводятся от образца к образцу. Такое поведение, вероятно, обусловлено сильным изменением плотности состояний и подвижности с энергией

вблизи данной точки. Можно ожидать, что эти флуктуации определяются индивидуальными особенностями беспорядка в конкретном образце.

Прежде чем сравнивать наши экспериментальные результаты с соотношениями Мотта, следует отметить, что наша система весьма необычна. Дырочная зона включает два совершенно разных типа носителей:

один — дираковские частицы с очень малой эффективной массой, сильно зависящей от энергии, а другой — дырки с большой эффективной массой. Эта уникальная комбинация приводит к различным особенностям в транспорте, которые можно использовать для улучшения термоэлектрических характеристик данной системы.

Во-первых, изменение плотности состояний с энергией по мере приближения химического потенциала к зоне тяжёлых дырок приводит к увеличению коэффициента Зеебека. Во-вторых, в таких условиях межзонное и межподзонное рассеяние вносит существенный вклад в термоЭДС. К сожалению, наличие беспорядка может сильно повлиять на все эти преимущества и сгладить указанные эффекты. Однако дальнейшее повышение качества материала открывает большие перспективы для улучшения его термоэлектрических свойств.

На рисунке 20а показано сравнение эксперимента с уравнением Мотта. Простая модель предсказывает значительное усиление термоЭДС в валентной зоне, обусловленное соответствующими особенностями в энергетическом спектре. Более того, согласно теории дополнительные особенности наблюдаются также и вблизи CNP, где транспортные параметры быстро меняются с энергией. На рисунке 20б показаны теоретические кривые, рассчитанные из соотношения Мотта для различных величин параметра уширения (δ). Кривые показывают, что меньшие значения δ приводят к более высоким значениям производных плотности состояний и времени релаксации, что приводит к усилению термоЭДС.

Следует отметить, что полное описание эксперимента требует более точного знания плотности состояний в этой системе, что на данный момент затруднительно.

Для упрощения в данной модели не рассматривалось неупругое рассеяние между дираковскими и тяжёлыми дырками, которое, как показано в 2D полуметаллах, может сильно, особенно в валентной зоне и при высоких температурах ($T > 5$ K), влиять на термоЭДС. Однако этот важный аспект необходимо учитывать в будущих исследованиях при высоких температурах.

Наконец, ещё одним важным вкладом является фононное увлечение, которое доминирует при температурах выше 4,2 K, как было показано в разделах 5 и 6. При более низких температурах оно сопоставимо с диффузионным вкладом. Однако в настоящее время теория фононного увлечения в бесщелевой квантовой яме HgTe для частиц с дираковским спектром ещё не разработана.

7.3. Заключение

Есть несколько особенностей, которые делают 2D-полуметалл Вейля в бесщелевой квантовой яме HgTe привлекательной системой для исследований термоЭДС. Наличие одиночного дираковского конуса в спектре может, согласно соотношению Мотта, увеличить значение коэффициента Зеебека. В подобной системе, в отличие от обычных 2D-систем, плотность состояний изменяется с энергией, а время переноса имеет сильную энергетическую зависимость. Сосуществование дираковских и тяжёлых дырок создаёт интересную ситуацию, которую можно использовать для управления вырождением зон. Сведение различных электронных зон путём выравнивания их экстремумов в диапазоне шириной в несколько $k_B T$ также может увеличить термоэлектрическую эффективность.

Приведённое исследование коэффициента Зеебека в КЯ HgTe толщиной 6,3 нм показывает, что некоторые из этих возможностей могут быть реализованы. Поведение коэффициента Зеебека описывается соотношением Мотта. Следует, однако, отметить, что такое описание зависит от используемой модели плотности состояний и её особенностей, связанных с учётом беспорядка и неоднородностей.

8. Итоговые замечания

Поведение термоЭДС в 2D и 3D топологических изоляторах, а также 2D полуметаллах, изготовленных на основе КЯ HgTe, затрагивает самые фундаментальные вопросы, касающиеся механизмов рассеяния в полупроводниках и металлах. В настоящее время есть некоторое понимание механизма проводимости в двумерных топологических изоляторах. Однако в процессах рассеяния в 2D и 3D топологических изоляторах остаётся ещё много неясного. Вот некоторые вопросы, которые необходимо рассмотреть:

1. Необходимо исследовать механизм, отвечающий за рассеяние между геликоидальными краевыми состояниями. Ожидается, что упругое обратное рассеяние должно быть подавлено из-за симметрии относительно обращения времени. Однако для наблюдения термоЭДС, обусловленной краевыми состояниями, необходим механизм сильного энергозависимого обратного рассеяния краевых состояний.

2. Крайне важно иметь точные знания о поведении объёмной проводимости и плотности состояний как в объёмной запрещённой зоне, так и в зоне проводимости и в валентной зоне в двумерных топологических изоляторах.

3. В трёхмерных ТИ необходимо иметь точное знание о 2D–3D рассеянии. В области, где сосуществуют 2D-электроны и 3D объёмные дырки, сложно различить механизм, приводящий к термоЭДС из-за электронно-дырочного рассеяния. Это рассеяние может изменить температурную зависимость $S_{xx}(T)$.

4. Необходимы детальные исследования особенностей процессов переноса вблизи точки зарядовой нейтральности 2D полуметаллов Вейля в квантовых ямах HgTe критической толщины. Перколяция по каналам с нулевой энергией может привести к особенностям в поведении коэффициента термоЭДС.

5. Также в 2D полуметаллах Вейля рассеяние дырка – дырка в валентной зоне намного сильнее, чем примесное рассеяние. Это приводит к доминированию эффектов взаимодействия в транспорте и может существенно модифицировать термоэлектрические эффекты при высоких температурах.

Предыдущие теоретические исследования термоЭДС были в основном сосредоточены на свойствах идеальных топологических изоляторов. При этом мало внимания уделялось сложному механизму рассеяния между геликоидальными краевыми или поверхностными состояниями и объёмом.

При проектировании новых термоэлектрических устройств следует также рассмотреть возможные способы влияния на свойства геликоидальных и поверхностных состояний ТИ. Например, путём приложения электрического поля или деформации можно осуществлять топологические фазовые переходы, а приложением маг-

нитного поля влиять на симметрию относительно обращения времени.

Для повышения эффективности термоэлектрических свойств наноструктур на основе ТИ, и получения преимуществ, связанных с высокой подвижностью геликоидальных или поверхностных состояний ТИ, из-за сильной энергетической зависимости рассеяния желательнее усилить методы контроля уровня беспорядка и дефектов в реальных ТИ.

Для поиска возможностей усиления эффекта Зеебека необходимы также более систематические исследования влияния электрон-электронного рассеяния.

Авторы выражают благодарность Российскому научному фонду (грант № 23-72-30003, <https://rscf.ru/ru/project/23-72-30003/>), а также FAPESP (Sao Paulo Research Foundation) Grant № 2021/12470-8, CNPq (National Council for Scientific and Technological Development).

Авторы выражают благодарность М.В. Энтину, Л.И. Магариллу и О.Е. Райчеву за полезные обсуждения.

Список литературы

- Ziman J M *Principles of the Theory of Solids* 2nd ed. (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1972)
- Shi X-L, Zou J, Chen Z-G *Chem. Rev.* **120** 7399 (2020)
- Qi X-L, Zhang S-C *Rev. Mod. Phys.* **83** 1057 (2011)
- Qi X-L, Zhang S-C *Phys. Today* **63** (1) 33 (2010)
- Hasan M Z, Kane C L *Rev. Mod. Phys.* **82** 3045 (2010)
- Панкратов О А *УФН* **188** 1226 (2018); Pankratov O A *Phys. Usp.* **61** 1116 (2018)
- Durnev M V, Tarasenko S A *Ann. Physik* **531** 1800418 (2019)
- Тарасенко С А *УФН* **188** 1129 (2018); Tarasenko S A *Phys. Usp.* **61** 1026 (2018)
- Веденеев С И *УФН* **187** 411 (2017); Vedeneev S I *Phys. Usp.* **60** 385 (2017)
- Xu Y, Gan Z, Zhang S-C *Phys. Rev. Lett.* **112** 226801 (2014)
- Gusev G M et al. *Solid State Commun.* **302** 113701 (2019)
- Квон З Д и др. *УФН* **190** 673 (2020); Kvon Z D et al. *Phys. Usp.* **63** 629 (2020)
- König M et al. *Science* **318** 766 (2007)
- König M et al. *J. Phys. Soc. Jpn.* **77** 031007 (2008)
- Roth A et al. *Science* **325** 294 (2009)
- Квон З Д и др. *Письма в ЖЭТФ* **87** 588 (2008); Kvon Z D et al. *JETP Lett.* **87** 502 (2008)
- Gusev G M et al. *Phys. Rev. Lett.* **104** 166401 (2010)
- Büttner B et al. *Nature Phys.* **7** 418 (2011)
- Козлов Д А и др. *Письма в ЖЭТФ* **96** 815 (2012); Kozlov D A et al. *JETP Lett.* **96** 730 (2013)
- Hasan M Z, Moore J E *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **2** 55 (2011)
- Gusev G M et al. *2D Mater.* **9** 015021 (2022)
- Ivanov Yu V, Burkov A T, Pshenay-Severin D A *Phys. Status Solidi B* **255** 1800020 (2018)
- Xu N, Xu Y, Zhu J *npj Quantum Mater.* **2** 51 (2017)
- Ngabonziza P *Nanotechnology* **33** 192001 (2022)
- Kalantari M H, Zhang X *Nanomaterials* **13** 117 (2023)
- Дьяконов М И, Хаецкий А В *ЖЭТФ* **82** 1584 (1982); D'yakonov M I, Khaetskii A V *Sov. Phys. JETP* **55** 917 (1982)
- Gerchikov L G, Subashiev A V *Phys. Status Solidi B* **160** 443 (1990)
- Novik E G et al. *Phys. Rev. B* **72** 035321 (2005)
- Raichev O E *Phys. Rev. B* **85** 045310 (2012)
- Gospodaric J et al. *Phys. Rev. B* **104** 115307 (2021)
- Dantscher K M et al. *Phys. Rev. B* **92** 165314 (2015)
- Xu Y, Gan Z, Zhang S-C *Phys. Rev. Lett.* **112** 226801 (2014)
- Hsu C-H et al. *Semicond. Sci. Technol.* **36** 123003 (2021)
- Schmidt T L et al. *Phys. Rev. Lett.* **108** 156402 (2012)
- Maciejko J et al. *Phys. Rev. Lett.* **102** 256803 (2009)
- Kainaris N et al. *Phys. Rev. B* **90** 075118 (2014)
- Ström A, Johannesson H, Japaridze G I *Phys. Rev. Lett.* **104** 256804 (2010)
- Crépin F et al. *Phys. Rev. B* **86** 121106 (2012)
- Budich J C et al. *Phys. Rev. Lett.* **108** 086602 (2012)
- Hsu C-H et al. *Phys. Rev. B* **96** 081405 (2017)
- Hsu C-H *Phys. Rev. B* **97** 125432 (2018)
- Väyrynen J I, Pikulin D I, Alicea J *Phys. Rev. Lett.* **121** 106601 (2018)
- Väyrynen J I, Goldstein M, Glazman L I *Phys. Rev. Lett.* **110** 216402 (2013)
- Väyrynen J I et al. *Phys. Rev. B* **90** 115309 (2014)
- Essert S, Krueckl V, Richter K *Phys. Rev. B* **92** 205306 (2015)
- Aseev P P, Nagaev K E *Phys. Rev. B* **94** 045425 (2016)
- Wang J, Meir Y, Gefen Y *Phys. Rev. Lett.* **118** 046801 (2017)
- Novelli P et al. *Phys. Rev. Lett.* **122** 016601 (2019)
- Delplace P, Li J, Büttiker M *Phys. Rev. Lett.* **109** 246803 (2012)
- Kurilovich P D et al. *Письма в ЖЭТФ* **106** 575 (2017); *JETP Lett.* **106** 593 (2017)
- Sablikov V A, Sukhanov A A *Phys. Rev. B* **103** 155424 (2021)
- Chou Y-Z, Nandkishore R M, Radzihovsky L *Phys. Rev. B* **98** 054205 (2018)
- Bindel J R et al. *Nature Phys.* **12** 920 (2016)
- Gusev G M et al. *Phys. Rev. B* **84** 121302 (2011)
- Rahim A et al. *2D Mater.* **2** 044015 (2015)
- Gusev G M et al. *2D Mater.* **6** 014001 (2019)
- Olshanetsky E B et al. *Phys. Rev. Lett.* **114** 126802 (2015)
- Gusev G M et al. *Sci. Rep.* **9** 831 (2019)
- Gusev G M et al. *Phys. Rev. B* **89** 125305 (2014)
- Парфенов О Е, Шклярук Ф А *Физика и техника полупроводников* **41** 1041 (2007); Parfenov O E, Shklyaruk F A *Semiconductors* **41** 1021 (2007)
- Brüne C et al. *Phys. Rev. Lett.* **106** 126803 (2011)
- Brüne C et al. *Phys. Rev. X* **4** 041045 (2014) DOI:10.1103/PhysRevX.4.041045
- Kozlov D A et al. *Phys. Rev. Lett.* **112** 196801 (2014)
- Kozlov D A et al. *Phys. Rev. Lett.* **116** 166802 (2016)
- Ziegler J et al. *Phys. Rev. Research* **2** 033003 (2020)
- Müller V L et al. *Nano Lett.* **21** 5195 (2021)
- Олышанецкий Е Б и др. *Письма в ЖЭТФ* **89** 290 (2009); Olshanetsky E B et al. *JETP Lett.* **89** 290 (2009)
- Entin M V et al. *ЖЭТФ* **144** 1068 (2013); *J. Exp. Theor. Phys.* **117** 933 (2013)
- Гусев Г М и др. *Письма в ЖЭТФ* **107** 814 (2018); Gusev G M et al. *JETP Lett.* **107** 789 (2018)
- Jost A et al. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **114** 3381 (2017)
- Gusev G M et al. *Nanomaterials* **11** 3364 (2021)
- Hwang E H, Das Sarma S *Phys. Rev. B* **67** 115316 (2003)
- Nagaev K E, Manoshin A A *Phys. Rev. B* **102** 155411 (2020)
- Nagaev K E *Phys. Rev. B* **106** 085411 (2022)
- Pal H K, Yudson V I, Maslov D L *Lithuanian J. Phys.* **52** 142 (2012)
- Murzin S S et al. *Письма в ЖЭТФ* **67** 101 (1998); *JETP Lett.* **67** 113 (1998)
- Kravchenko V et al. *Phys. Rev. B* **59** 2376 (1999)
- Li S, Maslov D L *Phys. Rev. B* **98** 245134 (2018)
- Lee W-R, Michaeli K, Schwiete G *Phys. Rev. B* **103** 115140 (2021)
- Takahashi K et al. *Phys. Rev. B* **107** 115158 (2023)
- Гантмахер В Ф, Левинсон И Б *ЖЭТФ* **74** 261 (1978); Gantmakher V F, Levinson I B *Sov. Phys. JETP* **47** 133 (1978)
- Заварицкий Н В, Квон З Д *Письма в ЖЭТФ* **38** 85 (1983); Zavaritskii N V, Kvon Z D *JETP Lett.* **38** 97 (1983)
- Entin M V, Magarill L I, будет опубликовано

84. Van de Walle C G *Phys. Rev. B* **39** 1871 (1989)
85. Qteish A, Needs R J *Phys. Rev. B* **45** 1317 (1992)
86. Gusev G M et al. *Phys. Rev. B* **96** 045304 (2017)
87. Zuev Yu M, Chang W, Kim P *Phys. Rev. Lett.* **102** 096807 (2009)
88. Mahmoodian M M, Entin M V *Phys. Status Solidi B* **256** 1800652 (2019)
89. Mahmoodian M M, Entin M V *Phys. Rev. B* **101** 125415 (2020)
90. Добрецова А А и др. *Письма в ЖЭТФ* **104** 402 (2016); Dobretsova A A et al. *JETP Lett.* **104** 388 (2016)

Thermopower in HgTe-based topological insulators and two-dimensional semimetals

G.M. Gusev^(1,a), Z.D. Kvon^(2,3,b), A.D. Levin^(1,c), E.B. Olshanetsky^(2,4,d), N.N. Mikhailov^(2,e)

⁽¹⁾ Universidade de São Paulo, Instituto de Física, São Paulo, Brazil

⁽²⁾ Rzhanov Institute of Semiconductor Physics, Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, prosp. Akademika Lavrenteva 13, 630090 Novosibirsk, Russian Federation

⁽³⁾ Novosibirsk State University, Akademgorodok, ul. Pirogova 2, 630090 Novosibirsk, Russian Federation

⁽⁴⁾ Novosibirsk State Technical University, prosp. Karl Marx 20, 630073 Novosibirsk, Russian Federation

E-mail: ^(a) gusev@if.usp.br, ^(b) kvon@isp.nsc.ru, ^(c) alexander.d.levin@gmail.com, ^(d) eolsh@isp.nsc.ru, ^(e) mikhailov@isp.nsc.ru

In recent years, there has been a significant effort to investigate the impact of nontrivial electronic topology on the thermoelectric properties of materials. Topological insulators (TIs) and two-dimensional semimetals, in particular, have emerged as an efficient class of thermoelectric materials. When the Fermi level lies within the insulating gap, thermoelectric transport in two-dimensional (2D) topological insulators is primarily determined by the one-dimensional helical states, while in three-dimensional TIs, the transport is driven by the 2D states that exist on the material's surfaces. Here, we review existing results on HgTe quantum wells, which are exemplary in combining the optimal features of topological insulators and the best-performing thermoelectric materials. In addition, we also cover thermoelectric phenomena in two-dimensional semimetals. These materials have overlapping electron and hole bands in the energy space, resulting in a strong mutual friction between them that affects thermoelectric transport and leads to temperature-dependent resistivity. Our review focuses on the thermopower phenomena observed in HgTe-based semimetals, taking into account diffusive and phonon drag effects. Furthermore, we also discuss Weyl two-dimensional semimetals with gapless cone spectra and their thermoelectric properties. We highlight the impact of the coexistence of Dirac and heavy holes in the valence band on the thermoelectric properties of the material and their potential for application in thermoelectric devices.

Keywords: topological insulators, thermopower, quantum transport, HgTe quantum wells

PACS numbers: 72.15.Jf, 72.20.Pa, 85.35.Be

Bibliography — 90 references

Received 14 February 2025, revised 2 April 2025

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **196** (1) 2–27 (2026)

Physics – Uspekhi **69** (1) (2026)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2025.04.039898>

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNe.2025.04.039898>