(интеграл по поверхности граней ячейки обратной решетки обращается в нуль ввиду быстрого убывания функции N_0 с увеличением ω при низких температурах). Для акустических длинноволновых фононов (которые только и существенны при малых T) скорость $\mathbf{u}$ и отношение $\varkappa = \mathbf{k}/\omega$ зависят только от направления $\mathbf{k}$ (но не от ω). Использовав для интеграла по ω известное выражение, найдем, что третий интеграл в (3) равен $-BT^3\nabla T$, где

$$B = \frac{\pi^4}{15}\sum\int\left(1+\frac{\varkappa\mathbf{u}}{3}\right)\varkappa^2\frac{do_\mathbf{k}}{(2\pi)^3}$$

(суммирование по трем акустическим ветвям фононного спектра).

Таким образом, равенство (3) принимает вид

$$-e\mathbf{E}(N_e - N_h) = \nabla T\,(AT + BT^3).$$

Сравнив его с (78,1) (при $\mathbf{j}=0$), найдем термоэлектрический коэффициент

$$\alpha = \frac{AT + BT^3}{N_h - N_e}. \tag{4}$$

Условие $\mathbf{j}$ может быть обеспечено должным образом подобранным слагаемым вида (81,1) в решении кинетического уравнения. В соответствии со сказанным в § 81, выражение (4) конечно для некомпенсированного металла, но обращается в бесконечность при $N_e = N_h$.

§ 83. Диффузия электронов по ферми-поверхности

В этом параграфе будет показано, каким образом кинетическое уравнение задачи об электрической проводимости при низких температурах (82,17) может быть приведено к диффузионному виду[1]). Интересуясь только этой задачей, мы будем рассматривать лишь независящую от $\eta = \varepsilon - \mu$ часть функции φ и обозначать ее как $\varphi(\mathbf{p}_F)$ (вместо специального обозначения $a(\mathbf{p}_F)$ в предыдущем параграфе). Как и в § 82, будем иметь в виду случай открытых ферми-поверхностей.

Функция

$$\frac{\delta\tilde{n}}{(2\pi)^3} = -\frac{\partial n_0}{\partial\varepsilon}\frac{\varphi}{(2\pi)^3}$$

есть неравновесная добавка к распределению электронов по импульсному пространству. От него можно перейти к распределению по ферми-поверхности, написав элемент объема d^3p в виде $d\varepsilon\, dS/v$ (74,19), проинтегрировав по $d\varepsilon = d\eta$ и приближенно заменив зависящие от ε элемент площади изоэнергетической поверхности dS и скорость v их значениями dS_F и v_F на ферми-поверхности. Функция φ, по предположению, от ε не зависит, а интегрирование множителя $-\partial n_0/\partial\varepsilon$ дает 1. Таким

[1]) В излагаемом ниже выводе мы следуем *Р. Н. Гуржи* и *А. И. Копелиовичу* (1971).

образом, плотность распределения на ферми-поверхности дается выражением

$$\frac{\varphi(\mathbf{p}_F)}{(2\pi)^3 v_F}. \tag{83,1}$$

Для большей наглядности вывода напишем сначала кинетическое уравнение (82,17) с частной производной по времени в его левой стороне, как если бы распределение было нестационарным:

$$-\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon}\frac{\partial \varphi}{\partial t} - e\mathbf{E}\mathbf{v}_F\frac{\partial n_0}{\partial \varepsilon} = L_1(\varphi).$$

Здесь уже опущен член с L_0, выдающий после интегрирования уравнения по $d\eta/v_F$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\varphi}{v_F} - \int L_1(\varphi)\frac{d\eta}{v_F} = -\frac{e\mathbf{E}\mathbf{v}_F}{v_F}. \tag{83,2}$$

Первый член слева — скорость изменения плотности электронов на ферми-поверхности. Уравнение должно иметь вид уравнения непрерывности, т. е. второй член слева должен представлять собой дивергенцию от плотности потока $\mathbf{s}$ электронов на ферми-поверхности; член же с электрическим полем в правой стороне уравнения играет роль плотности источников и стоков. Здесь идет речь о двумерной дивергенции на искривленной поверхности; ее, однако, удобно записать в трехмерных обозначениях:

$$-\int L_1(\varphi)\frac{d\eta}{v_F} = \{\nabla_\mathbf{p} - \mathbf{n}_F(\mathbf{n}_F\nabla_\mathbf{p})\}\,\mathbf{s}. \tag{83,3}$$

Здесь $\nabla_\mathbf{p}$ — обычный оператор дифференцирования по декартовым координатам в $\mathbf{p}$-пространстве, а оператор в фигурных скобках — его проекция на плоскость, касательную к ферми-поверхности в каждой заданной ее точке ($\mathbf{n}_F$ — единичный вектор нормали к поверхности)[1]. Вектор $\mathbf{s}(\mathbf{p}_F)$ задан на ферми-поверхности, но в (83,3) рассматривается формально как заданный во всем пространстве (но зависящий лишь от направления $\mathbf{p}_F$). Кинетическое уравнение (в котором опускаем теперь производную по времени) принимает вид

$$\{\nabla_\mathbf{p} - \mathbf{n}_F(\mathbf{n}_F\nabla_\mathbf{p})\}\,\mathbf{s} = -e\mathbf{E}\frac{\mathbf{v}_F}{v_F}. \tag{83,4}$$

[1]) Этот оператор фигурирует в двумерном аналоге теоремы Гаусса

$$\oint \mathbf{e}\mathbf{s}\,dl = \int \left\{\nabla - \mathbf{n}(\mathbf{n}\nabla)\right\}\mathbf{s}\,dS.$$

Интеграл слева берется по замкнутому контуру, лежащему на заданной поверхности ($\mathbf{e}$ — единичный вектор нормали, внешней к контуру в плоскости, касательной к поверхности в данной ее точке); интеграл справа берется по участку поверхности, ограниченному контуром.

Задача состоит в нахождении потока $\mathbf{s}$—его выражения через функцию φ.

Введем декартову систему координат в $\mathbf{p}$-пространстве с осью z по направлению нормали к ферми-поверхности в точке, в которой вычисляется $\mathbf{s}(\mathbf{p}_F)$, и с началом в этой же точке. По определению, компонента s_x потока есть разность между числом электронов, пересекающих (в 1 с) благодаря столкновениям полосу единичной ширины на плоскости yz слева направо (в положительном направлении оси x), и числом электронов, пересекающих эту полосу справа налево.

Рассмотрим разность между числом актов испускания фононов с квазиимпульсом $\mathbf{k}$ в заданном интервале d^3k электронами с квазиимпульсами в интервале d^3p и числом обратных актов поглощения таких же фононов. Она дается (с обратным знаком) первым членом подынтегрального выражения в (79,9):

$$d^3p\,\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\frac{\partial N_0}{\partial\omega}\,w\,(n_0'-n_0)\,\delta\,(\varepsilon-\varepsilon'-\omega_{\mathbf{k}})\,(\varphi_{\mathbf{p}'}-\varphi_{\mathbf{p}}+\chi_{\mathbf{k}}), \qquad (83,5)$$

причем $\mathbf{p}=\mathbf{p}'+\mathbf{k}$[1]). Фононная функция $\chi_{\mathbf{k}}$ здесь должна быть выражена через φ согласно (82,5):

$$\chi_{\mathbf{k}}=-\frac{1}{\nu_{ph,\,e}}\int w\,(n_0'-n_0)\,\delta\,(\varepsilon-\varepsilon'-\omega_{\mathbf{k}})\,(\varphi_{\mathbf{p}'}-\varphi_{\mathbf{p}})\,\frac{2d^3p}{(2\pi)^3} \qquad (83,6)$$

с $\nu_{ph,\,e}$ из (82,6).

Если $k_x<0$, то в результате испускания фонона пройдут через рассматриваемую полосу (причем в направлении слева направо) те электроны, у которых x-компонента первоначального квазиимпульса лежит в интервале

$$k_x<p_x<0; \qquad (83,7а)$$

для таких значений $\mathbf{p}$ выражение (83,5) дает положительный вклад в поток s_x. Если же $k_x>0$, то в результате испускания фонона через полосу пройдут (причем справа налево) электроны с

$$0<p_x<k_x; \qquad (83,7б)$$

соответствующий вклад в s_x отрицателен.

Из сказанного ясно, что для нахождения s_x надо: 1) проинтегрировать выражение (83,5) по единичному интервалу p_y и по всей области изменения p_z; ввиду быстрой сходимости, по-

---

[1]) В проведенных выше рассуждениях мы опускали множитель $(2\pi)^{-3}$ в определении поверхностной плотности (83,1). В соответствии с этим опускаем один такой множитель и в (83,5).

Напомним также, что мы условились в случае открытых ферми-поверхностей допускать значения квазиимпульса электронов во всей обратной решетке (см. § 81); поэтому закон сохранения квазиимпульса пишется без слагаемого $\mathbf{b}$.

следнее интегрирование можно распространить от $-\infty$ до ∞; 2) проинтегрировать по интервалу (83,7) значений p_x. Но ввиду медленной зависимости всех величин от p_x вдоль ферми-поверхности, это интегрирование сводится просто к умножению на длину интервала; с учетом знака, с которым результат интегрирования должен войти в s_x, это означает просто умножение на $-k_x$; 3) наконец, надо проинтегрировать по d^3k.

Компонента s_y потока отличается от s_x лишь заменой в подинтегральном выражении k_x на k_y. Поэтому поток можно записать в векторном виде:

$$\mathbf{s}(\mathbf{p}_F)=$$
$$=-\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}\int_{-\infty}^{\infty}\varkappa\left\{\frac{\partial N_0}{\partial\omega}w(n_0'-n_0)\,\delta(\varepsilon-\varepsilon'-\omega)(\varphi_{\mathbf{p}'}-\varphi_{\mathbf{p}}+\chi_{\mathbf{k}})\right\}dp_z, \tag{83,8}$$

где $\varkappa$ — проекция $\mathbf{k}$ на касательную плоскость в точке $\mathbf{p}_F$.

Прежде всего пишем $d^3k=dk_zd^2\varkappa$ и проводим интегрирование по k_z. Ввиду малости $\mathbf{k}$ можно преобразовать аргумент δ-функции в (83,8):

$$\delta(\varepsilon_{\mathbf{p}}-\varepsilon_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}-\omega_{\mathbf{k}})\approx\delta(\mathbf{k}\mathbf{v}_F-\omega)=\frac{1}{v_F}\delta\left(k_z-\frac{\omega}{v_F}\right)$$

(направление $\mathbf{v}_F$ совпадает с нормалью к ферми-поверхности). Интегрирование по k_z устраняет δ-функцию, одновременно заменяя везде k_z на ω/v_F. Но поскольку $\omega/v_F\sim ku/v_F\ll k$, то можно положить просто $k_z=0$, т. е. заменить

$$\mathbf{k}\to\varkappa. \tag{83,9}$$

Можно провести в общем виде также и интегрирование по $dp_z=d\varepsilon/v_z$, поскольку быстро меняющейся функцией ε в подынтегральном выражении является только разность

$$n_0(\varepsilon-\omega)-n_0(\varepsilon)\approx-\omega\frac{\partial n_0}{\partial\varepsilon};$$

интегрирование по ε превращает этот множитель в ω. После этих операций выражение (83,8) принимает вид

$$\mathbf{s}(\mathbf{p}_F)=-\frac{1}{2\pi v_F^2}\int\varkappa\omega_\varkappa\frac{\partial N_0(\omega_\varkappa)}{\partial\omega_\varkappa}w(\varphi_{\mathbf{p}'}-\varphi_{\mathbf{p}}+\chi_\varkappa)\frac{d^2\varkappa}{(2\pi)^2}. \tag{83,10}$$

Для дальнейшего преобразования интеграла пишем в нем, снова используя малость $\mathbf{k}$:

$$\varphi(\mathbf{p}-\mathbf{k})-\varphi(\mathbf{p})\approx-\mathbf{k}\frac{\partial\varphi}{\partial\mathbf{p}}\approx-\varkappa\frac{\partial\varphi}{\partial\mathbf{p}}=-\varkappa\mathbf{t}\frac{\partial\varphi}{\partial\mathbf{p}},$$

где $\mathbf{t}=\boldsymbol{\varkappa}/\varkappa$ — единичный вектор касательной к ферми-поверхности в направлении $\boldsymbol{\varkappa}$. Поскольку такая же разность содержится и в интеграле (83,6), то можно представить функцию $\chi(\mathbf{k})$ в виде

$$\chi(\mathbf{k})=\varkappa\mathbf{a}(\mathbf{t}). \tag{83,11}$$

Наконец, ввиду (79,4) представим w в виде

$$w=\varkappa M(\mathbf{p}_F,\ \mathbf{t}). \tag{83,12}$$

С этими обозначениями имеем

$$\mathbf{s}=-\frac{1}{2\pi v_F^2}\int \mathbf{t}\varkappa^3\omega_\varkappa\frac{\partial N_0}{\partial\omega_\varkappa}M\left(\mathbf{t}\mathbf{a}-\mathbf{t}\frac{\partial\varphi}{\partial\mathbf{p}}\right)\frac{\varkappa\,d\varkappa\,d\phi}{(2\pi)^2}, \tag{83,13}$$

где ϕ — полярный угол направления $\boldsymbol{\varkappa}$ в касательной плоскости.

Интегрирование по $\varkappa$ в (83,13) сводится к вычислению интеграла

$$J=\int_0^\infty \varkappa^4\omega_\varkappa\frac{\partial N_0}{\partial\omega_\varkappa}d\varkappa;$$

ввиду быстрой сходимости, интегрирование можно распространить до ∞. Энергия фонона с малым квазиимпульсом $\boldsymbol{\varkappa}=\varkappa\mathbf{t}$: $\omega_\varkappa=u(\mathbf{t})\varkappa$. Поэтому

$$J=\frac{1}{u^5}\int_0^\infty\omega^5\frac{\partial N_0}{\partial\omega}d\omega=-\frac{5}{u^5}\int_0^\infty N_0\omega^4d\omega=-\frac{5T^5}{u^5}\int_0^\infty\frac{x^4\,dx}{e^x-1}=-120\zeta(5)\frac{T^5}{u^5}$$

(значение ζ-функции: $\zeta(5)=1{,}037$).

Таким образом, мы приходим к следующему выражению для плотности потока электронов вдоль ферми-поверхности:

$$\mathbf{s}=-\frac{30\zeta(5)T^5}{\pi^2v_F^2}\left\langle\frac{M(\mathbf{t})}{u^5(\mathbf{t})}\mathbf{t}\left(\mathbf{t}\frac{\partial\varphi}{\partial\mathbf{p}}-\mathbf{t}\mathbf{a}\right)\right\rangle, \tag{83,14}$$

где угловые скобки означают усреднение по направлениям $\mathbf{t}$ в касательной плоскости в данной точке $\mathbf{p}_F$ ферми-поверхности. Остается получить максимально упрощенное выражение для $\mathbf{a}$.

Согласно определению (83,11) имеем из (83,6)

$$\mathbf{a}=\frac{\int M(n_0'-n_0)\,\delta(\varepsilon-\varepsilon'-\omega)\,(\partial\varphi/\partial\mathbf{p})\,d^3p}{\int M(n_0'-n_0)\,\delta(\varepsilon-\varepsilon'-\omega)\,d^3p}$$

(сокращены общие множители в числителе и знаменателе). Интегрирование по d^3p заменяем (ср. начало этого параграфа) интегрированием по $dS_F d\varepsilon/v_F$. От ε зависит только множитель $n_0(\varepsilon-\omega)-n_0(\varepsilon)$, одинаковый в обоих интегралах; результаты интегрирования в числителе и знаменателе сокращаются. После этого аргумент δ-функции пишем в виде $\mathbf{k}\mathbf{v}_F-\omega \approx \varkappa \mathbf{v}_F$ (пренебрегая величинами относительного порядка u/v_F). Окончательно находим

$$\mathbf{a}=\frac{\int v_F^{-2} M\delta(\mathbf{n}\mathbf{t})\,(\partial\varphi/\partial\mathbf{p})\,dS_F}{\int v_F^{-2} M\delta(\mathbf{n}\mathbf{t})\,dS_F} \qquad (83,15)$$

(M — функция точки $\mathbf{p}_F$ на ферми-поверхности и направления $\mathbf{t}$; $\mathbf{n}$ — единичный вектор нормали). В силу наличия δ-функций, интегралы фактически берутся лишь вдоль линии на ферми-поверхности, на которой нормаль перпендикулярна направлению $\mathbf{t}$ квазиимпульса фонона.

Формулы (83,4) и (83,14—15) решают задачу о приведении кинетического уравнения к диффузионному виду. Это уравнение — интегро-дифференциальное. Плотность потока (83,14) можно записать в виде

$$s_\alpha=-D_{\alpha\beta}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial p_\beta}-a_\beta\right), \qquad (83,16)$$

где

$$D_{\alpha\beta}=T^5\,\frac{30\zeta(5)}{\pi^2 v_F^2}\left\langle\frac{M(\mathbf{t})}{u^5(\mathbf{t})}\,t_\alpha t_\beta\right\rangle \qquad (83,17)$$

(α, β — двумерные векторные индексы). Первый член имеет обычный дифференциальный вид с тензором коэффициентов диффузии $D_{\alpha\beta}$; этот член связан с рассеянием электронов равновесными фононами. Второй же член — интегральный; он связан с эффектом увлечения электронов неравновесными фононами.

Плотность тока вычисляется по функциям φ как интеграл

$$\mathbf{j}=-\frac{2e}{(2\pi)^3}\int\varphi\mathbf{n}\,dS_F.$$

Из уравнения (83,4) с $\mathbf{s}$ из (83,16—17) ясно, что функция φ (а с нею и проводимость металла) зависит от температуры как T^{-5} — в согласии с результатом предыдущего параграфа. Обратим внимание на то, что увлечение электронов фононами не меняет этого закона, хотя и отражается на виде кинетического уравнения.