

# Электрон-фононное увлечение, термоэлектрические эффекты и теплопроводность вырожденных проводников

© И.Г. Кулеев

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

E-mail: kuleev@imp.uran.ru

(Поступила в Редакцию 22 июня 1998 г.  
В окончательном виде 23 октября 1998 г.)

Предложен метод расчета кинетических коэффициентов вырожденных проводников, в котором последовательно учитывается взаимное влияние неравновесности электронной и фононной подсистем. Рассчитанные выражения для кинетических коэффициентов удовлетворяют соотношениям симметрии Онзагера. Проанализировано влияние неравновесности электрон-фононной системы на электропроводность, термоэдс и электронную теплопроводность.

Электрон-фононное взаимодействие в твердых телах приводит к обмену импульса между подсистемами электронов и фононов и соответственно к эффектам взаимного увлечения [1]. Исследованию влияния эффектов электрон-фононного увлечения посвящено большое число работ (см. [2–6] и ссылки в них). Точное решение системы кинетических уравнений для электрон-фононных систем с учетом взаимного влияния неравновесности электронов и фононов друг на друга даже при упрощающих предположениях о сферичности энергетических поверхностей и изотропности времен релаксации до сих пор не найдено. Приближенные решения для невырожденных полупроводников были найдены в [7,8] с помощью разложения возмущенных функций распределения в ряд по степеням малого параметра, определяемого влиянием неравновесности электронов на фононную функцию распределения. Для металлов такие исследования были проведены в [5,9,10]. В работах [11,12] система кинетических уравнений была решена для вырожденных проводников в магнитном поле. В [11] решение найдено для частного вида зависимости времени релаксации фононов от волнового вектора и нулевом приближении по вырождению электронного газа. В [12] рассмотрен более общий случай. В [9,10] показано, что при рассмотрении влияния эффектов увлечения на термоэлектрические явления необходимо совместно решать систему кинетических уравнений для носителей тока и фононов при строгом учете отклонений обеих функций распределения от равновесных. В противном случае соотношения симметрии Онзагера для термоэлектрических коэффициентов не будут выполняться, как это имело место в ряде работ [13,14].

Здесь предлагается метод вычисления кинетических коэффициентов вырожденных проводников при учете взаимного влияния неравновесности электронов и фононов. При этом используется лишь условие сильного вырождения  $k_B T / \zeta \ll 1$  ( $\zeta$  — энергия Ферми), а неупругость электрон-фононного рассеяния учитывается в первом неисчезающем порядке. Расчет проводится без предположения о конкретном виде зависимости

времен неэлектронных механизмов релаксации фононов от волнового вектора. Проведено выделение вкладов в частоты релаксации продольных и поперечных акустических фононов. Спектр электронов предполагается изотропным. Рассмотрено влияние взаимного увлечения на электропроводность, термоэдс и теплопроводность, а также некоторые физические аспекты теории электрон-фононного увлечения, которым ранее уделялось недостаточно внимания.

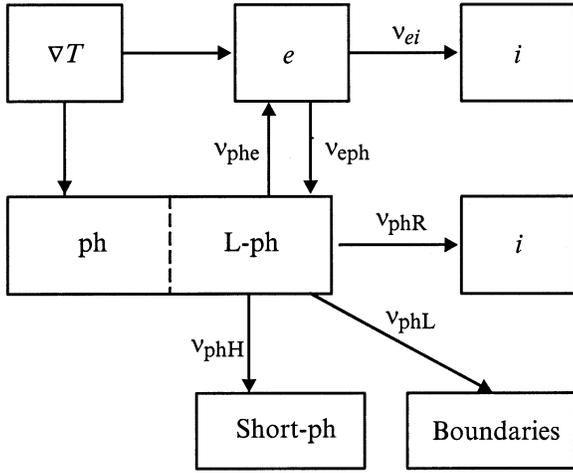
## 1. Система кинетических уравнений для электронов и фононов

В этом разделе будут проанализированы баланс импульса и взаимное влияние неравновесности электронов и фононов. Схема, иллюстрирующая перераспределение и релаксацию импульса, получаемого электрон-фононной системой от градиента температуры приведена на рис. 1. Механизмы электрон-фононной релаксации, характеризуемые частотами  $\nu_{\text{eph}}$  и  $\nu_{\text{phe}}$ , приводят к перераспределению импульса внутри электрон-фононной системы. Механизмы рассеяния электронов на примесях  $\nu_{\text{ei}}$ , фононов на границах  $\nu_{\text{phL}}$ , фононов на примесях (механизм Рэлея)  $\nu_{\text{phR}}$  и фонон-фононное рассеяние Херринга  $\nu_{\text{phH}}$  приводят к релаксации суммарного импульса электрон-фононной системы. Выражения для соответствующих частот релаксации будут приведены далее. Мы исходим из системы кинетических уравнений для неравновесных электронной  $f(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  и фононной  $N^\lambda(\mathbf{q}, \mathbf{r})$  функций распределения, которая имеет стандартный вид [3,11]

$$\frac{e}{\hbar} \mathbf{E}_0 \frac{\partial f_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} + (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \nabla_{\mathbf{r}}) f_{\mathbf{k}} = I_{\text{ei}}(f_{\mathbf{k}}) + I_{\text{eph}}(f_{\mathbf{k}}, N_{\mathbf{q}}^\lambda),$$

$$\mathbf{v}_{\mathbf{q}}^\lambda \nabla_{\mathbf{r}} N_{\mathbf{q}}^\lambda = -(N_{\mathbf{q}}^\lambda - N_{\mathbf{q}\lambda}^0) \nu_{\text{ph}}^{(1)\lambda} + I_{\text{phe}}(N_{\mathbf{q}}^\lambda, f_{\mathbf{k}}). \quad (1)$$

Здесь  $\mathbf{v}_{\mathbf{q}}^\lambda = \partial \omega_{\mathbf{q}}^\lambda / \partial \mathbf{q}$  — групповая скорость акустических фононов с поляризацией  $\lambda$ ,  $\mathbf{v}_{\mathbf{q}}^\lambda = s_\lambda \mathbf{q} / q$ ,  $N_{\mathbf{q}\lambda}^0$  — функция Планка, частота релаксации  $\nu_{\text{ph}}^{(1)\lambda}(q)$  включает все



**Рис. 1.** Схема, иллюстрирующая релаксацию импульса электрон-фононной системы, при наличии градиента температуры. Здесь  $\nu_{phR}$ ,  $\nu_{phL}$ ,  $\nu_{phH}$  — частоты релаксации фононов на примесях (механизм Рэля), границах и на фононах (механизм Херринга) соответственно.

неэлектронные механизмы рассеяния фононов: рассеяние фононов на фононах, дефектах и границах образца. Интегралы столкновений электронов с примесями  $I_{ei}$ , фононами  $I_{eph}$  и фононов с электронами  $I_{phe}$  определены в [3,11].

Представим функции распределения электронов и фононов в виде

$$f_{\mathbf{k}} = f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}) + \delta f_{\mathbf{k}}, \quad N_{\mathbf{q}}^{\lambda} = N_{\mathbf{q}\lambda}^0 + g_{\lambda}(\mathbf{q}), \quad (2)$$

где  $f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})$  и  $N_{\mathbf{q}\lambda}^0$  — локально равновесные функции распределения электронов и фононов, а  $\delta f_{\mathbf{k}}$  и  $g_{\lambda}(\mathbf{q})$  — неравновесные добавки к функциям распределения, линейные по внешним воздействиям. Линеаризуем интегралы столкновений по этим добавкам

$$I_{eph}(f_{\mathbf{k}}, N_{\mathbf{q}}^{\lambda}) = I_{eph}(\delta f_{\mathbf{k}}, N_{\mathbf{q}\lambda}^0) + I_{eph}(f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}), g_{\lambda}(\mathbf{q})),$$

$$I_{phe}(f_{\mathbf{k}}, N_{\mathbf{q}}^{\lambda}) = I_{phe}(\delta f_{\mathbf{k}}, N_{\mathbf{q}\lambda}^0) + I_{phe}(f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}), g_{\lambda}(\mathbf{q})). \quad (3)$$

Интегралы столкновений  $I_{ei}(\delta f_{\mathbf{k}})$ ,  $I_{phe}(f_0, g_{\lambda}(\mathbf{q}))$ , а также  $I_{eph}(\delta f_{\mathbf{k}}, N_{\mathbf{q}\lambda}^0)$  в приближении упругого рассеяния электронов на фононах представим через частоты релаксации [3,11,12]

$$I_{ei}(\delta f_{\mathbf{k}}) = -\nu_{ei}(k)\delta f_{\mathbf{k}}, \quad I_{phe}(f_0, g_{\lambda}(\mathbf{q})) = -\nu_{phe}^{\lambda}(q)g_{\lambda}(\mathbf{q}),$$

$$I_{eph}(\delta f_{\mathbf{k}}, N_{\mathbf{q}\lambda}^0) \cong -\nu_{eph}(k)\delta f_{\mathbf{k}}. \quad (4)$$

Здесь  $\nu_{ei}(k)$  — частота релаксации электронов на примесях [3],  $\nu_{phe}^{\lambda}(k_F, q) = |C_q^{\lambda}|^2 m_F^2 s_{\lambda} f_0(\varepsilon_{q/2}) / \pi \hbar^4$  — частота релаксации импульса фононов на электронах,  $|C_q^{\lambda}|^2 = E_{0\lambda}^2 \hbar q / s_{\lambda} \rho = C_{0\lambda}^2 q$ ,  $\rho$  — плотность кристалла,  $E_{0\lambda}$  — константа деформационного потенциала,  $s_{\lambda}$  — скорость звука акустических фононов с поляризацией  $\lambda$ .

$f_0(\varepsilon_{q/2})$  — функция распределения Ферми от энергии  $\varepsilon_{q/2}$ , а  $\nu_{eph}(k)$  — частота столкновений электронов с фононами,

$$\begin{aligned} \nu_{eph}(k) &= \sum_{\lambda} \int_0^{z_{2k}^{\lambda}} dz_q^{\lambda} \nu_{eph}^{\lambda}(k, q) \\ &\equiv \frac{\tilde{m}(\varepsilon)}{\tilde{k}^3} \sum_{\lambda} \left\langle \nu_{eph}^{\lambda}(k_F, q) \right\rangle_{z_{2k}^{\lambda}}, \end{aligned} \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} \nu_{eph}^{\lambda}(k, q) &= \frac{m(\varepsilon)(C_0^{\lambda})^2}{2\pi \hbar^3 k^3} q_{T\lambda}^5 (z_q^{\lambda})^5 N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1) \\ &= \frac{\tilde{m}(\varepsilon)}{\tilde{k}^3} \nu_{eph}^{\lambda}(k_F, q), \end{aligned}$$

$$z_q^{\lambda} = \frac{\hbar \omega_{q\lambda}}{k_B T} = \frac{q}{q_T^{\lambda}}, \quad q_T^{\lambda} = \frac{k_B T}{\hbar s_{\lambda}}, \quad z_{2k}^{\lambda} = \frac{2k}{q_T^{\lambda}}, \quad \tilde{m}(\varepsilon) = \frac{m(\varepsilon)}{m_F},$$

$m_F = m(\zeta)$  — эффективная масса электрона на уровне Ферми,  $\tilde{k} = k/k_F$ ,  $\hbar k_F$  — фермиевский импульс.

При расчете интеграла столкновений  $I_{eph}(f_0, g_{\lambda}(\mathbf{q}))$  учтем неупругость столкновений электронов с фононами в первом порядке теории возмущений

$$\begin{aligned} I_{eph}(f_0, g_{\lambda}(\mathbf{q})) &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} |C_{q\lambda}|^2 \hbar \omega_{q\lambda} g_{\lambda}(\mathbf{q}) \left( \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) \\ &\times \left[ \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) - \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \right]. \end{aligned} \quad (6)$$

После этого уравнение для фононной функции распределения примет вид

$$\begin{aligned} g_{\lambda}(\mathbf{q}) &= -\frac{N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1)}{\nu_{ph}^{\lambda}(q)} \frac{\hbar \omega_{q\lambda}}{k_B T} (\mathbf{v}_q^{\lambda} \nabla T) \\ &+ \frac{1}{\nu_{ph}^{\lambda}} I_{phe}(\delta f_{\mathbf{k}}, N_{q\lambda}^0) = g_{\lambda}^{(1)}(\mathbf{q}) + g_{\lambda}^{(2)}(\mathbf{q}), \end{aligned} \quad (7)$$

где  $\nu_{ph}^{\lambda} = \nu_{ph}^{(1)\lambda} + \nu_{phe}^{\lambda}$  — полная частота релаксации фононов с волновым вектором  $q$  и поляризацией  $\lambda$ . Функция  $g_{\lambda}^{(1)}(\mathbf{q})$  обусловлена непосредственным действием градиента температуры на фононную подсистему, а добавка  $g_{\lambda}^{(2)}(\mathbf{q})$  учитывает влияние неравновесности электронов

$$\begin{aligned} g_{\lambda}^{(2)}(\mathbf{q}) &= \frac{1}{\nu_{ph}^{\lambda}(q)} I_{phe}(\delta f_{\mathbf{k}}, N_{q\lambda}^0) \\ &= \frac{4\pi}{\hbar} \frac{|C_{q\lambda}|^2}{\nu_{ph}^{\lambda}(q)} \frac{\hbar \omega_{q\lambda}}{k_B T} N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1) \\ &\times \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{k}'} \delta f_{\mathbf{k}'} \left[ \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) - \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \right]. \end{aligned} \quad (8)$$

Подставим выражение (8) для  $g_{\lambda}(\mathbf{q})$  в уравнение (6), тогда с учетом формул (3) и (4) получим замкнутое

интегральное уравнение для неравновесной добавки к функции распределения электронов

$$\delta f_{\mathbf{k}} = \delta f_{\mathbf{k}}^{(1)} + \tau(\varepsilon_{\mathbf{k}}) I_{\text{eph}}(f_0, g_{\lambda}^{(2)}) = \delta f_{\mathbf{k}}^{(1)} + \delta f_{\mathbf{k}}^{(2)}. \quad (9)$$

Функция  $\delta f_{\mathbf{k}}^{(1)}$  учитывает эффект увлечения электронов фононами, а также непосредственное действие электрического поля и градиента температуры на электронную подсистему. Она имеет известный вид [3]

$$\begin{aligned} \delta f_{\mathbf{k}}^{(1)} &= \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \Phi_1) \tau(\varepsilon_{\mathbf{k}}), \\ \Phi_1(\varepsilon_{\mathbf{k}}) &= -e \left( \mathbf{E} + \frac{k_B}{e} \left( \frac{\tilde{m}(\varepsilon)}{\tilde{k}^3} A_{\text{ph}}(\varepsilon) + \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \zeta}{k_B T} \right) \nabla T \right), \\ A_{\text{ph}}(\varepsilon) &= \sum_{\lambda} \frac{m_F s_{\lambda}^2}{k_B T} \left\langle \frac{\nu_{\text{eph}}^{\lambda}(k_F, q)}{\nu_{\text{ph}}^{\lambda}(q)} \right\rangle_{z_{\lambda}^{\mathbf{k}}}. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь  $\tau(\varepsilon)$  — полное время релаксации электронов  $\tau^{-1}(\varepsilon_{\mathbf{k}}) = \nu_{\mathbf{e}}(k) = \nu_{\text{ei}}(k) + \nu_{\text{eph}}(k)$ , а функция  $A_{\text{ph}}(\varepsilon)$  зависит от энергии  $\varepsilon$  только через верхний предел интегрирования  $2k(\varepsilon)$ . Добавка  $\delta f_{\mathbf{k}}^{(2)}$  учитывает влияние неравновесности электронов через фононы на функцию распределения электронов

$$\begin{aligned} \delta f_{\mathbf{k}}^{(2)} &= \tau(\varepsilon_{\mathbf{k}}) I_{\text{eph}}(f_0, g_{\lambda}^{(2)}) = \left( \frac{2\pi}{\hbar} \right)^2 \frac{2}{V} \tau(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \\ &\times \sum_{\mathbf{k}', \mathbf{q}, \lambda} \frac{|C_q^{\lambda}|^4}{\nu_{\text{ph}}^{\lambda}(q)} \frac{(\hbar \omega_{q\lambda})^2}{k_B T} N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1) \\ &\times \frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \left[ \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) - \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}) \right] \\ &\times \delta f_{\mathbf{k}'} \left[ \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'-\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) - \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}) \right]. \end{aligned} \quad (11)$$

Расчет тока проводимости с функцией распределения  $\delta f_{\mathbf{k}}^{(1)}$  дает обычный эффект увлечения электронов фононами [3]. Вычисление электронных потоков с помощью функции  $\delta f_{\mathbf{k}}^{(1)}$  (см. следующий раздел) показывает, что соотношения симметрии кинетических коэффициентов Онзагера в этом случае не выполняются. Поэтому при решении системы кинетических уравнений необходимо принять во внимание члены  $\delta f_{\mathbf{k}}^{(2)}$  и  $g_{\lambda}^{(2)}(\mathbf{q})$ , учитывающие взаимное влияние неравновесности электронов и фононов друг на друга. Добавка  $\delta f_{\mathbf{k}}^{(2)}$  учитывает влияние неравновесности электронов на фононную подсистему, что в свою очередь приводит к изменению функции распределения электронов. Для вырожденных полупроводников с большой концентрацией заряженных дефектов как правило отношение частот  $\nu_{\text{eph}}/\nu_{\text{ei}} \ll 1$ , и вклад члена  $\delta f_{\mathbf{k}}^{(2)}$  в кинетические коэффициенты в этом случае будет мал, однако для достаточно чистых полуметаллов и бесщелевых полупроводников его роль может быть значительной. Далее мы представим новый способ вычисления кинетических коэффициентов без непосредственного решения уравнения (9).

## 2. Вычисление кинетических коэффициентов

Экспериментально измеряемыми величинами являются не функции распределения электронов и фононов, а средние значения физических величин, определяемые с помощью этих функций распределения. В данном случае нас интересуют потоки заряда и потоки тепла, вызванные внешними силами: электрическим полем и градиентом температуры. Поэтому, используя уравнения (9)–(11), найдем, что ток проводимости  $\mathbf{j}$  и электронный поток тепла  $\mathbf{W}_{\text{e}}$  выражаются через одну и ту же функцию, уравнение для которой можно строго решить, не прибегая к разложению по малому параметру, связанному с взаимодействием

$$\mathbf{j} = -\frac{2e}{V} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} (\delta f_{\mathbf{k}}^{(1)} + \delta f_{\mathbf{k}}^{(2)}) = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2, \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{W} &= \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \zeta) \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \delta f_{\mathbf{k}} + \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} \hbar \omega_{q\lambda} \mathbf{v}_{\mathbf{q}}^{\lambda} g_{\lambda}(\mathbf{q}) \\ &= \mathbf{W}_{\text{e}} + \mathbf{W}_{\text{ph}}. \end{aligned} \quad (13)$$

Электронный  $\mathbf{W}_{\text{e}}$  и фононный  $\mathbf{W}_{\text{ph}}$  потоки тепла также разбиваются на две части, пропорциональные неравновесным добавкам к функциям распределения электронов  $\delta f_{\mathbf{k}}^{(1)}$ ,  $\delta f_{\mathbf{k}}^{(2)}$  и фононов  $g_{\lambda}^{(1)}(\mathbf{q})$ ,  $g_{\lambda}^{(2)}(\mathbf{q})$

$$\mathbf{W}_{\text{e}} = \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \zeta) \mathbf{v}_{\mathbf{k}} (\delta f_{\mathbf{k}}^{(1)} + \delta f_{\mathbf{k}}^{(2)}) = \mathbf{W}_{\text{e}}^{(1)} + \mathbf{W}_{\text{e}}^{(2)}, \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_{\text{ph}} &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} \hbar \omega_{q\lambda} \mathbf{v}_{\mathbf{q}}^{\lambda} (g_{\lambda}^{(1)}(\mathbf{q}) + g_{\lambda}^{(2)}(\mathbf{q})) \\ &= \mathbf{W}_{\text{ph}}^0 + \mathbf{W}_{\text{phe}}. \end{aligned} \quad (15)$$

Поток тепла  $\mathbf{W}_{\text{ph}}^0$  обусловлен непосредственным действием градиента температуры на фононную подсистему, а поток тепла  $\mathbf{W}_{\text{phe}}$  является результатом взаимного влияния неравновесности электронов и фононов. Он приводит к перенормировке как электронного, так и фононного потоков тепла.

Потоки  $\mathbf{j}_1$ ,  $\mathbf{W}_{\text{e}}^{(1)}$  и  $\mathbf{W}_{\text{ph}}^0$  легко вычисляются, поскольку для соответствующих функций распределения известны аналитические выражения (9) и (12)

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_1 &= \sigma_{xx}^0 \left\{ \mathbf{E} + \frac{k_B}{e} \left( A_{\text{ph}}(\zeta) + \frac{\pi^2}{3} \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) D_1 \right) \nabla T \right\} \\ &= \mathbf{j}_{\text{dr}} + \mathbf{J}_{\text{drag}} + \mathbf{j}_{\text{dif}}, \end{aligned} \quad (16)$$

$$\mathbf{W}_e^{(1)} = -L_0 \sigma_{xx}^0 T \times \left\{ \frac{eT}{\zeta} D_1 \mathbf{E} + \left( 1 + \frac{k_B T}{\zeta} A_{ph} D_2 \right) \nabla T \right\}, \quad (17)$$

где

$$\sigma_{xx}^0 = \frac{e^2 n_e \tau_F}{m_F}, \quad L_0 = \frac{\pi^2}{3} \left( \frac{k_B}{e} \right)^2,$$

$$D_1 = \zeta \frac{d}{d\varepsilon} \left[ \ln \left( \frac{k^3(\varepsilon) \tau(\varepsilon)}{m(\varepsilon)} \right) \right]_{\varepsilon=\zeta},$$

$$D_2 = \zeta \frac{d}{d\varepsilon} \left[ \ln(\tau(\varepsilon) A_{ph}(\varepsilon)) \right]_{\varepsilon=\zeta}.$$

Из формулы (16) видно, что поток заряда (как и поток тепла) состоит из трех вкладов: дрейфовый  $\mathbf{j}_{dr}$  и диффузионный  $\mathbf{j}_{dif}$  токи обусловлены непосредственным действием электрического поля и градиента температуры на электронную подсистему, а ток  $\mathbf{j}_{drag}$  является результатом увлечения электронов фононами.

Поток тепла  $\mathbf{W}_{phe}$ , переносимый фононами, но обусловленный влиянием неравновесности электронов на фононную подсистему, также может быть разделен на две части

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_{phe} &= \frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}, \lambda} s_\lambda^2 \hbar \mathbf{q} g_\lambda^{(2)}(\mathbf{q}) \\ &= \frac{k_B T}{m_F} \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}} \frac{\tilde{m}(\varepsilon)}{\tilde{k}^3} A_{ph}(\varepsilon) \hbar \mathbf{k} (\delta f_{\mathbf{k}}^{(1)} + \delta f_{\mathbf{k}}^{(2)}) \\ &= \mathbf{W}_{phe}^{(1)} + \mathbf{W}_{phe}^{(2)}. \end{aligned} \quad (18)$$

Вычисление потока  $\mathbf{W}_{phe}^{(1)}$ , обусловленного неравновесной добавкой  $\delta f_{\mathbf{k}}^{(1)}$ , дает

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_{phe}^{(1)} &= -\frac{k_B T}{e} \sigma_{xx}^0 A_{ph}(\zeta) \\ &\times \left\{ \mathbf{E} + \frac{k_B}{e} \left[ A_{ph}(\zeta) + \frac{\pi^2}{3} \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) D_A \right] \nabla T \right\}, \end{aligned} \quad (19)$$

где  $D_A = \zeta (d/d\varepsilon) \left[ \ln(m(\varepsilon) \tau(\varepsilon) A_{ph}(\varepsilon)) \right]_{\varepsilon=\zeta}$ . Как видно из выражения (10), для  $\delta f_{\mathbf{k}}^{(1)}$  и формулы (19) дрейфовая и диффузионная компоненты потока тепла  $\mathbf{W}_{phe}^{(1)}$  (первое и последнее слагаемые в (19)) связаны с влиянием неравновесности электронов, и эти члены должны быть включены в электронный поток тепла. Второе слагаемое в (19) является результатом влияния тока увлечения (который вызван неравновесностью фононов) на подсистему фононов. Оно должно быть включено в фононный

поток тепла  $\mathbf{W}_{ph}^{(1)}$ . В результате имеем

$$\mathbf{W}_{ph}^{(1)} = -\kappa_{ph}^{(1)} \nabla T, \quad \kappa_{ph}^{(1)} = \kappa_{ph}^0 + \kappa_{phe}^{(1)},$$

$$\begin{aligned} \kappa_{ph}^{(1)} &= \sum_{\lambda} \frac{k_B s_\lambda^2 q_T^3}{6\pi^2} \int_0^{z_d^\lambda} dz_q^\lambda (z_q^\lambda)^4 N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1) \\ &\times \left\{ 1 + \frac{\nu_{phe}^\lambda(q)}{\nu_e(\zeta)} \frac{k_B T}{s_\lambda^2} A_{ph}(\zeta) \right\}, \end{aligned} \quad (20)$$

где  $z_d^\lambda = \hbar \omega_{d\lambda} / k_B T$ , а  $\omega_{d\lambda}$  — дебаевская частота для фононов поляризации  $\lambda$ .

Полагая, что электрическое поле и градиент температуры направлены вдоль оси  $x$ , запишем выражение для потоков через кинетические коэффициенты

$$j_x = \sigma_{xx} E_x - \beta_{xx} \nabla_x T, \quad W_{ex} = \gamma_{xx} E_x - \kappa_{xx}^e \nabla_x T. \quad (21)$$

Нетрудно убедиться, в том, что при учете вклада  $\mathbf{W}_{phe}^{(1)}$  в электронный поток тепла соотношения Онзагера для термоэлектрических коэффициентов  $\gamma_{xx}^{(1)}$  и  $\beta_{xx}^{(1)}$  выполняются

$$\begin{aligned} \gamma_{xx}^{(1)} &= T \beta_{xx}^{(1)} \\ &= -\sigma_{xx}^0 T \frac{k_B}{e} \left\{ A_{ph}(\zeta) + \frac{\pi^2}{3} \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) D_1 \right\}, \end{aligned} \quad (22)$$

а выражение для электронной теплопроводности  $\kappa_{xx}^{e(1)}$  имеет вид

$$\kappa_{xx}^{e(1)} = L_0 \sigma_{xx}^0 T \left\{ 1 + \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) A_{ph}(\zeta) (D_2 + D_A) \right\}. \quad (22a)$$

Таким образом, необходимым условием выполнения соотношений микроскопической обратимости является учет тепла, переносимого фононами и обусловленного неравновесностью электронов при вычислении полного электронного потока тепла. Для кинетических коэффициентов с учетом эффекта увлечения [3] соотношения Онзагера не выполняются, так как поток  $\mathbf{W}_{phe}^{(1)}$  не принят во внимание.

В потоки  $\mathbf{j}_2$ ,  $\mathbf{W}_e^{(2)}$  и  $\mathbf{W}_{phe}^{(2)}$  входят неизвестные функции  $\delta f_{\mathbf{k}}^{(2)}$ ,  $g_\lambda^{(2)}(\mathbf{q})$ , которые выражаются интегральным образом через полную неравновесную добавку к функции распределения электронов  $\delta f_{\mathbf{k}}$ . Подставим выражение (11) для  $\delta f_{\mathbf{k}}^{(2)} = \tau(\varepsilon_k) I_{eph}(f_0, g_\lambda^{(2)})$  в формулы (12), (15) и (18) и проведем суммирование по волновым векторам электронов. После этого все три потока могут быть

представлены через одну и ту же функцию  $\varphi(\varepsilon)$

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_2 &= -\frac{e}{m_F} \int_0^\infty d\varepsilon \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \tilde{m}(\varepsilon) \tau(\varepsilon) \varphi(\varepsilon), \\ \mathbf{W}_\varepsilon^{(2)} &= \frac{1}{m_F} \int_0^\infty d\varepsilon \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) (\varepsilon - \zeta) \tilde{m}(\varepsilon) \tau(\varepsilon) \varphi(\varepsilon), \\ \mathbf{W}_{\text{phc}}^{(2)} &= \frac{k_B T}{m_F} \int_0^\infty d\varepsilon \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \left( \frac{\tilde{m}(\varepsilon)}{\tilde{k}(\varepsilon)} \right)^3 \tau(\varepsilon) A_{\text{ph}}(\varepsilon) \varphi(\varepsilon), \\ \varphi(\varepsilon) &= \frac{1}{V} \sum_{|\mathbf{q}| < 2k, \lambda} \nu_{\text{phc}}^\lambda \hbar \mathbf{q} g_\lambda^{(2)}(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (23)$$

$\varphi(\varepsilon)$  зависит от энергии через верхний предел интегрирования  $2k(\varepsilon)$ . Подставим (8) в выражение для  $\varphi(\varepsilon)$ , снимем интеграл по угловым переменным  $d\Omega_q$  при помощи  $\delta$ -функции и поменяем порядок интегрирования по волновым векторам  $q$  и  $k'$ , разбив область интегрирования по  $k'$  на две части:  $q/2 < k' < k$  и  $q/2 < k < k'$ . После этого получим

$$\begin{aligned} \varphi(\varepsilon) &= \varphi^<(\varepsilon) + \Phi_{2k}(\varepsilon) \varphi^>(\varepsilon), \\ \varphi^<(\varepsilon) &= \frac{2}{V} \sum_{|\mathbf{k}'| < k} \frac{\tilde{m}(\varepsilon')}{\tilde{k}'^3} \Phi_{2k'} \hbar \mathbf{k}' \delta f_{\mathbf{k}'}, \\ \varphi^>(\varepsilon) &= \frac{2}{V} \sum_{|\mathbf{k}'| > k} \frac{\tilde{m}(\varepsilon')}{\tilde{k}'^3} \hbar \mathbf{k}' \delta f_{\mathbf{k}'}, \end{aligned} \quad (24)$$

где

$$\Phi_{2k}(\varepsilon) = \sum_\lambda \left\langle \frac{\nu_{\text{phc}}^\lambda(k_F, q) \nu_{\text{eph}}^\lambda(k_F, q)}{\nu_{\text{ph}}^\lambda(q)} \right\rangle_{z_{2k}^\lambda}$$

также зависит от  $\varepsilon$  через верхний предел интегрирования  $z_{2k}^\lambda$ . Обратная величина  $\Phi_{2k}^{-1}$  характеризует время, в течение которого импульс, переданный электронами в фононную подсистему, возвращается обратно электронам. Воспользуемся уравнениями (9)–(11) и выразим функции  $\varphi^<(\varepsilon)$  и  $\varphi^>(\varepsilon)$  через  $\varphi(\varepsilon)$

$$\begin{aligned} \varphi^<(\varepsilon) &= \int_0^\varepsilon d\varepsilon' \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon'} \right) \Phi_{2k}(\varepsilon') \tilde{\varphi}(\varepsilon'), \\ \varphi^>(\varepsilon) &= \int_\varepsilon^0 d\varepsilon' \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon'} \right) \tilde{\varphi}(\varepsilon'), \end{aligned} \quad (25)$$

где

$$\tilde{\varphi}(\varepsilon) = \tau(\varepsilon) \left[ n_e \tilde{m}(\varepsilon) \Phi_1(\varepsilon) + \left( \frac{\tilde{m}(\varepsilon)}{\tilde{k}(\varepsilon)} \right)^3 \varphi(\varepsilon) \right].$$

Подстановка выражений (25) в (24) дает нам неоднородное интегральное уравнение Вольтерра для  $\varphi(\varepsilon)$ ,

которое можно представить в следующем виде:

$$\begin{aligned} \varphi(\varepsilon) &= \int_0^\infty d\varepsilon' \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon'} \right) \Phi_{2k}(\varepsilon') \tilde{\varphi}(\varepsilon') \\ &+ \int_\varepsilon^\infty d\varepsilon' \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon'} \right) \left( \Phi_{2k}(\varepsilon) - \Phi_{2k}(\varepsilon') \right) \tilde{\varphi}(\varepsilon'). \end{aligned} \quad (26)$$

Ядро интегрального уравнения (26) определяется через однократный интеграл, тогда как ядро интегрального уравнения, полученного ранее в работах [7,8] и [11,12], имеет более сложный вид: во-первых, неизвестная функция входит под двойной интеграл, а во-вторых, для решения уравнения необходимо конкретизировать зависимости частот релаксации от волнового вектора фононов [11].

Решение уравнения (26) в линейном приближении по параметру вырождения  $k_B T / \zeta$  находится в два этапа. Вначале определим энергетическую зависимость функции  $\varphi(\varepsilon)$ . Для этого разложим функцию  $\varphi(\varepsilon)$  в ряд по параметру  $\varepsilon - \zeta$ , поскольку основной вклад в интегралы (26) вносит узкая полоска энергий  $|\varepsilon - \zeta| \leq k_B T$ ,

$$\begin{aligned} \varphi(\varepsilon) &= \varphi(\zeta) + \sum_{n=1}^\infty \frac{(\varepsilon - \zeta)^n}{n!} \varphi^{(n)}(\zeta), \\ \varphi^{(n)}(\zeta) &= \left( \frac{d^n \varphi(\varepsilon)}{d\varepsilon^n} \right)_{\varepsilon=\zeta}. \end{aligned} \quad (27)$$

Запишем выражения для первых трех производных  $\varphi(\varepsilon)$  по энергии, используя полученное нами интегральное уравнение

$$\varphi^{(1)}(\varepsilon) = \Phi'_{2k} \varphi^>(\varepsilon),$$

$$\varphi^{(2)}(\varepsilon) = \Phi''_{2k}(\varepsilon) \varphi^>(\varepsilon) - \Phi'_{2k} \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \tilde{\varphi}(\varepsilon),$$

$$\begin{aligned} \varphi^{(3)}(\varepsilon) &= \Phi'''_{2k}(\varepsilon) \varphi^>(\varepsilon) - 2\Phi''_{2k}(\varepsilon) \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \tilde{\varphi}(\varepsilon) \\ &- \Phi'_{2k}(\varepsilon) \left[ \left( -\frac{\partial^2 f_0}{\partial \varepsilon^2} \right) \tilde{\varphi}(\varepsilon) + \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \varepsilon} \right) \varphi^{(1)}(\varepsilon) \right]. \end{aligned} \quad (28)$$

Как видно из (28), интегральное уравнение (26) эквивалентно неоднородному дифференциальному уравнению второго порядка. Поэтому все высшие производные  $\varphi^{(n)}(\varepsilon)$  могут быть выражены через две функции  $\varphi^>(\varepsilon)$  и  $\varphi(\varepsilon)$ , а именно

$$\varphi^{(n)}(\varepsilon) = A_n(\varepsilon) \varphi^>(\varepsilon) + B_n(\varepsilon) \varphi(\varepsilon) + C_n(\varepsilon). \quad (29)$$

В разложение (27) входят значения производных при  $\varepsilon = \zeta$ , поэтому проанализируем коэффициенты  $A_n(\zeta)$ ,  $B_n(\zeta)$  и  $C_n(\zeta)$  и выделим члены, вносящие вклады линейные по параметру  $k_B T / \zeta$ . Тогда для производных

функции  $\varphi(\varepsilon)$  при  $n \geq 2$  найдем

$$\varphi^{(n)}(\zeta) \approx -\Phi'_{2k}(\zeta) \left\{ \left[ \frac{\partial^{n-1} f_0}{\partial \varepsilon^{n-1}} \right]_{\varepsilon=\zeta} \tilde{\varphi}(\zeta) + \frac{n-2}{k_B T} \left[ \frac{\partial^{n-2} f_0}{\partial \varepsilon^{n-2}} \right]_{\varepsilon=\zeta} \tau_F(-k_B \nabla T) \right\}. \quad (29a)$$

Здесь  $\tilde{\varphi}(\zeta) = \tau_F[\varphi(\zeta) + n_e \Phi_1(\zeta)]$ . Подстановка (29a) в (27) дает выражение

$$\begin{aligned} \varphi(\varepsilon) &= \varphi(\zeta) + k_B T \Phi'_{2k}(\zeta) \\ &\times \left\{ \varphi^>(\zeta) \eta - \sum_{n=1}^{\infty} \left( -\frac{\partial^n f_0(\eta)}{\partial \eta^n} \right)_{\eta=0} \right. \\ &\times \left. \left[ \frac{\eta^{n+1}}{(n+1)!} \tilde{\varphi}(\zeta) + \frac{n\eta^{n+2}}{(n+2)!} \tau_F n_e (-k_B \nabla T) \right] \right\}, \quad (30) \end{aligned}$$

где  $\eta = (\varepsilon - \zeta)/k_B T$  является фактическим параметром энергетического разложения. В окрестности уровня Ферми неравенство  $|\eta| \ll 1$  не выполняется. Поэтому знакочередующиеся ряды (30) являются асимптотическими, что не позволяет ограничиться конечным числом членов. Суммирование бесконечных рядов дает

$$\begin{aligned} \varphi(\varepsilon) &= \varphi(\zeta) + k_B T \Phi'_{2k}(\zeta) \left\{ \eta \varphi^>(\zeta) \right. \\ &- f_1(\eta) \tau_F [\varphi(\zeta) + n_e \Phi_1(\zeta)] - f_2 \tau_F n_e (-k_B \nabla T) \left. \right\}, \\ f_1(\eta) &= \ln(1 + \exp(-\eta)) - \ln(2) + \eta/2, \\ f_2(\eta) &= \eta f_1(\eta) - 2 \int_0^\eta d\eta' f_1(\eta'). \quad (31) \end{aligned}$$

Таким образом, используя (27) и выражения (28)–(30), мы нашли зависимость функции  $\varphi(\varepsilon)$  от энергии и двух констант  $\varphi(\zeta)$  и  $\varphi^>(\zeta)$ , которые подлежат определению. Отметим, что функция  $f_1(\eta)$  симметрична относительно замены  $\eta$  на  $-\eta$ , а функция  $f_2(\eta)$  — антисимметрична относительно такой замены, поэтому  $\varphi(\varepsilon)$  также может быть разделена на две части: симметричную —  $\varphi_s(\varepsilon)$  и антисимметричную —  $\varphi_a(\varepsilon)$ .

Для определения функции  $\varphi(\zeta)$  воспользуемся разложением  $\Phi_{2k}(\varepsilon) - \Phi_{2k}(\zeta) \approx (\varepsilon - \zeta) \Phi'_{2k}(\zeta)$  и перепишем уравнение (26) для  $\varphi(\zeta)$  в виде

$$\begin{aligned} \varphi(\zeta) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \eta} \right) \Phi_{2k}(\varepsilon) \tilde{\varphi}(\varepsilon) \\ &- \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) \Phi_{2k}(\zeta) D_\Phi \int_0^\infty d\eta \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \eta} \right) \eta \tilde{\varphi}(\varepsilon), \quad (32) \end{aligned}$$

где  $\varepsilon = \zeta + \eta k_B T$ , а  $D_\Phi = \zeta(d/d\varepsilon) [\ln(\Phi_{2k}(\varepsilon))]_{\varepsilon=\zeta}$ . В нулевом порядке по параметру вырождения вторым

слагаемым в (32) можно пренебречь, и тогда выражение для  $\varphi_0(\zeta)$  находится просто

$$\varphi_0(\zeta) = -\frac{en_e \Gamma}{(1-\Gamma)} \left( \mathbf{E} + \frac{k_B}{e} A_{\text{ph}}(\zeta) \nabla T \right), \quad (33)$$

где  $\Gamma = \tau_F \Phi_{2k}(\zeta)$  — параметр, характеризующий степень влияния неравновесности электронов через фононы на функцию распределения электронов. Он равен отношению времени свободного пробега электрона ко времени, в течение которого импульс, переданный электронами фононам, возвращается обратно в электронную систему. Решение (33) фактически соответствует приближению, принятому в работе [11].

Для того чтобы найти решение уравнения (32) в первом порядке по параметру вырождения, подставим (31) в (32) и выполним интегрирование по  $\eta$ . В результате получим алгебраическое уравнение для функции  $\varphi(\zeta)$ , решение которого имеет вид

$$\begin{aligned} \varphi(\zeta) &= \left( \varphi^{(1)}(\zeta) - \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) J_1 \Gamma^2 D_\Phi n_e \Phi_1(\zeta) \right) \\ &\times \left[ 1 - \Gamma + \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) \Gamma D_\Phi [J_1 \Gamma + \ln 2] \right]^{-1}, \quad (34) \end{aligned}$$

$$J_1 = \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \eta} \right) f_1(\eta) \cong 0.31,$$

$$\left( -\frac{\partial f_0}{\partial \eta} \right) = \frac{\exp(\eta)}{(\exp(\eta) + 1)^2},$$

$$\begin{aligned} \varphi^{(1)}(\zeta) &= n_e \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \eta} \right) \Phi_{2k}(\varepsilon) \tau(\varepsilon) \Phi_1(\varepsilon) \\ &+ \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) n_e \Phi_{2k}(\zeta) D_\Phi \int_0^\infty d\eta \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \eta} \right) \eta \tau(\varepsilon) \Phi_1(\varepsilon) \\ &= -en_e \Gamma \left\{ \left( \mathbf{E} + \frac{k_B}{e} A_{\text{ph}}(\zeta) \nabla T \right) \left[ 1 - \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) D_\Phi \ln 2 \right] \right. \\ &\left. + \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B}{e} \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) D_3 \nabla T \right\}, \quad (35) \end{aligned}$$

где  $D_3 = \zeta(d/d\varepsilon) [\ln(m(\varepsilon)\tau(\varepsilon)\Phi_{2k}^{1/2})]_{\varepsilon=\zeta}$ . Решение уравнения для функции  $\varphi^>(\zeta)$  находится аналогично рассмотренному выше: в выражение (25) подставим (31) и выполним интегрирование по  $\eta$ . В результате получим алгебраическое уравнение, решение которого может

быть представлено в виде

$$\begin{aligned} \varphi^>(\zeta) = & \left\{ \varphi^{(1)>}(\zeta) + \tau_F \varphi(\zeta) \right. \\ & \times \left[ \frac{1}{2} + \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) (2 \ln 2 D_4 - J_1 D_\Phi \Gamma) \right] \\ & \left. - \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) n_e \tau_F \Gamma D_\Phi \left[ \frac{1}{2} J_1 \Phi_1(\zeta) + J_2(-k_B \nabla T) \right] \right\} \\ & \times \left( 1 - \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) \ln 2 \Gamma D_\Phi \right)^{-1}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varphi^{(1)>}(\zeta) = & -\frac{1}{2} e n_e \tau_F \left\{ \mathbf{E} + \frac{k_B}{e} \right. \\ & \times \left( A_{\text{ph}}(\zeta) + 2 \ln 2 + \frac{\pi^2}{3} \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) D_5 \right) \nabla T \\ & \left. + 2 \ln 2 \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) \left[ \mathbf{E} D_5 + \frac{k_B}{e} A_{\text{ph}} D_A \nabla T \right] \right\}, \end{aligned}$$

$$J_2 = \int_0^\infty d\eta \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \eta} \right) f_2(\eta) \cong 0.11,$$

$$D_4 = \zeta \frac{d}{d\varepsilon} \left[ \ln \left( \left( \frac{m(\varepsilon)}{k(\varepsilon)} \right)^3 \tau(\varepsilon) \right) \right]_{\varepsilon=\zeta},$$

$$D_5 = \zeta \frac{d}{d\varepsilon} \left[ \ln(m(\varepsilon) \tau(\varepsilon)) \right]_{\varepsilon=\zeta}. \quad (36)$$

В нулевом порядке по параметру вырождения имеем

$$\begin{aligned} \varphi_0^>(\zeta) = & -\frac{1}{2} e n_e \tau_F \left\{ \left( \mathbf{E} + \frac{k_B}{e} A_{\text{ph}}(\zeta) \nabla T \right) \right. \\ & \left. \times (1 - \Gamma)^{-1} + 2 \ln 2 \frac{k_B}{e} \nabla T \right\}. \quad (36a) \end{aligned}$$

Подстановка выражений (34)–(36) в (31) дает нам решение интегрального уравнения для функции  $\varphi(\varepsilon)$ , справедливое в линейном приближении по параметру вырождения. Это решение позволяет вычислить потоки и проанализировать зависимость кинетических коэффициентов от температуры как в случае слабого ( $\Gamma \ll 1$ ), так и в случае сильного ( $\Gamma \rightarrow 1$ ) взаимного увлечений электронов и фононов.

Прежде всего, вычислим поток заряда  $\mathbf{j}_2$ , обусловленный неравновесной добавкой у функции распределения электронов  $\delta f_{\mathbf{k}}^{(2)}$ . Подставим (31) в (23) и убедимся, что в линейном приближении по  $k_B T / \zeta$  в поток заряда  $\mathbf{j}_2$  вносит вклад только симметричная часть функции  $\varphi(\varepsilon)$ .

Выполнив интегрирование по параметру  $\eta$ , получим

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_2 = & \sigma_{xx}^0 \Gamma \left\{ \left( \mathbf{E} + \frac{k_B}{e} A_{\text{ph}}(\zeta) \nabla T \right) \right. \\ & \times \left[ 1 - \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) D_\Phi (\ln 2 + J_1 (1 + \Gamma)) \right] \\ & \left. + \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B}{e} \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) D_5 \nabla T \right\} \\ & \times \left( 1 - \Gamma + \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) \Gamma D_\Phi [J_1 \Gamma + \ln 2] \right)^{-1}. \quad (37) \end{aligned}$$

Выражение (37) позволяет исследовать довольно экзотический случай полного взаимного увлечения электронов и фононов [5], когда скорости дрейфа и электронов, и фононов настолько близки друг другу, что выполняется неравенство  $1 - \Gamma \ll k_B T / \zeta$ . В этом случае ток  $\mathbf{j}_2$  будет больше тока  $\mathbf{j}_1$  в  $\zeta / k_B T$  раз, а сопротивление металла, если не учитывать температурной зависимости величины  $D_\Phi$ , пропорционально  $T^6$ . Однако детальный анализ этой асимптотики требует отдельного рассмотрения. Для более реалистического случая  $(k_B T / \zeta) \ll 1 - \Gamma$ , разложив знаменатель по малому параметру, найдем

$$\begin{aligned} \mathbf{j}_2 = & \frac{\sigma_{xx}^0 \Gamma}{1 - \Gamma} \left\{ \left( \mathbf{E} + \frac{k_B}{e} A_{\text{ph}}(\zeta) \nabla T \right) \left[ 1 - \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) D_\Phi C_\Gamma \right] \right. \\ & \left. + \frac{\pi^2}{3} \frac{k_B}{e} \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) D_3 \nabla T \right\}, \end{aligned}$$

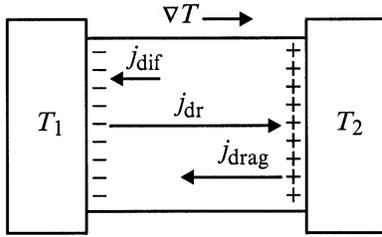
$$C_\Gamma = (\ln 2 + J_1)(1 - \Gamma)^{-1} \cong 1 / (1 - \Gamma). \quad (38)$$

При  $\Gamma \ll 1$  ток  $\mathbf{j}_2 \ll \mathbf{j}_1$ , и эффектами взаимного увлечения можно пренебречь. С увеличением параметра  $\Gamma$  возрастает роль тока  $\mathbf{j}_2$  и при  $\Gamma > 1/2$   $|\mathbf{j}_2| > |\mathbf{j}_1|$ . В этом случае пренебрежение эффектами взаимного увлечения приведет к качественно неправильным результатам при интерпретации экспериментальных данных. Как видно из (38), дрейфовый ток (пропорциональный напряженности электрического поля  $\mathbf{E}$ ) и ток увлечения (пропорциональный  $A_{\text{ph}} \nabla T$ ) перенормируются одинаковым образом из-за влияния неравновесности электронов на фононную систему. Последнее слагаемое в формуле (38) является поправкой к диффузионному току. Объединяя результаты (16) и (38), для кинетических коэффициентов  $\sigma_{xx}$  и  $\beta_{xx}$  получим

$$\sigma_{xx} = \tilde{\sigma}_{xx} \left\{ 1 - \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) \Gamma D_\Phi C_\Gamma \right\}, \quad (39)$$

$$\begin{aligned} \beta_{xx} = & -\tilde{\sigma}_{xx} \frac{k_B}{e} \left\{ A_{\text{ph}}(\zeta) \left[ 1 - \Gamma \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) D_\Phi C_\Gamma \right] \right. \\ & \left. + \frac{\pi^2}{3} \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) (D_1 + \Gamma(D_3 - D_1)) \right\}, \quad (40) \end{aligned}$$

где  $\tilde{\sigma}_{xx} = \sigma_{xx}^0 (1 - \Gamma)^{-1} = e^2 n_e \tilde{\tau}_F / m_F$ , а  $\tilde{\tau}_F = \tau_F (1 - \Gamma)^{-1} = \tilde{\nu}_e^{-1}$  — перенормированное время релаксации элек-



**Рис. 2.** Схема, иллюстрирующая возникновение термоэдс в проводниках.  $j_{\text{dif}}$  — диффузионный ток,  $j_{\text{dr}}$  — дрейфовый ток,  $j_{\text{drag}}$  — ток, обусловленный фононным увлечением.

тронов. Нетрудно убедиться, что

$$\tilde{\nu}_e = \nu_{ei} + \nu_{eph} - \Phi_{2k_F} = \nu_{ei} + \tilde{\nu}_{eph},$$

$$\tilde{\nu}_{eph} = \sum_{\lambda} \left\langle \nu_{eph}^{\lambda}(k_F, q) \left( 1 - \frac{\nu_{phe}^{\lambda}(q)}{\nu_{ph}^{\lambda}(q)} \right) \right\rangle_{z_{2k_F}^{\lambda}}. \quad (41)$$

Из формулы (39) следует, что взаимное влияние неравновесности электронов и фононов приводит к появлению членов, линейных по параметру вырождения в выражении для электропроводности. В нулевом порядке по этому параметру электропроводность  $\sigma_{xx} = \tilde{\sigma}_{xx}$ , что отличается от выражения, найденного в работе [11], выделением вкладов продольных и поперечных фононов и более строгим усреднением частот релаксации фононов, входящих в функцию  $\Phi_{2k_F}$ .

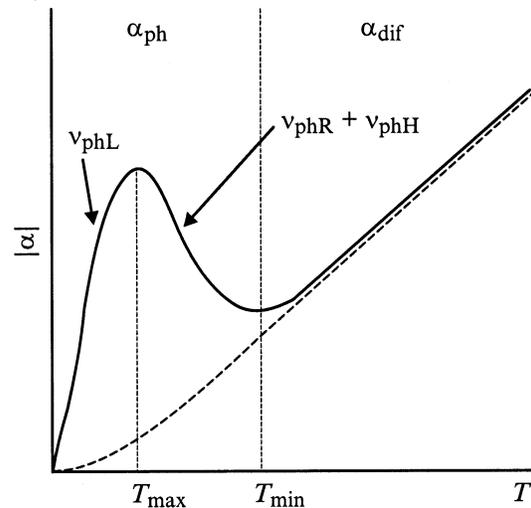
Перенормированная частота релаксации электронов на фононах  $\tilde{\nu}_{eph}$  отличается от приведенной в [15] только выделением вкладов поперечных и продольных фононов. Как видно из (41), взаимный обмен импульсами между электронной и фононной подсистемами приводит к уменьшению эффективной частоты релаксации электронов на фононах  $\tilde{\nu}_{eph}$ . Эта перенормировка может быть существенной, если для актуальных волновых векторов фононов доля импульса фононов, передаваемая в электронную подсистему и пропорциональная отношению  $\nu_{phe}^{\lambda}(q)/\nu_{ph}^{\lambda}(q)$ , будет не слишком мала. Однако для того чтобы этот эффект оказал заметное влияние на подвижность электронов необходимо, чтобы доля импульса электронов, передаваемая в фононную подсистему и пропорциональная величине  $\nu_{eph}/\nu_e$ , также была не слишком мала, и. е. частота релаксации электронов на фононах должна быть сравнима с частотой релаксации электронов на примесях.

Рассмотрим теперь, как сказывается эффект взаимного увлечения на термоэлектродвижущую силу вырожденного проводника. На рис. 2 приведена схема, иллюстрирующая возникновение термоэдс в полупроводниках. Термоэдс находится из условия  $j_x = j_{\text{dr}} + j_{\text{dif}} + j_{\text{drag}} = 0$ , поэтому из формул (21), (39) и (40) следует

$$\alpha = -\frac{k_B}{e} \left\{ A_{\text{ph}} + \frac{\pi^2}{3} \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) (D_1 + \Gamma(D_3 - D_1)) \right\}$$

$$= \alpha_{\text{ph}} + \alpha_{\text{dif}}. \quad (42)$$

Первые два члена в выражении (42) получаются в стандартной теории [3], третий член в фигурных скобках, пропорциональный параметру  $\Gamma$ , обусловлен влиянием неравновесности электронов на фононную систему. Прежде всего, следует отметить, что, как видно из формулы (38), дрейфовый ток и ток увлечения за счет влияния неравновесности электронов на фононную подсистему перенормируются одинаковым образом, поэтому вклад фононного увлечения в термоэдс  $\alpha_{\text{ph}}$  не перенормируется. Возникновение добавки от взаимного увлечения в диффузионную компоненту термоэдс также физически понятно. Поскольку термоэдс находится из условия  $j_x = 0$ , то средняя скорость упорядоченного движения электронов равна нулю. Поэтому передача импульса от электронов в фононную подсистему (рис. 3) происходит за счет зависимости эффективной массы, квазиимпульса электронов и параметров рассеяния от энергии электронов в окрестности уровня Ферми, т. е. этот вклад должен быть пропорциональным  $k_B T/\zeta$  и производной перечисленных параметров по энергии электрона. Это и следует из формулы (42). Заметим, что при расчете термоэдс авторы [11,12] ограничились нулевым приближением по вырождению электронного газа, поэтому диффузионный вклад в термоэдс, в том числе и добавка от взаимного увлечения полностью выпали из рассмотрения. Как правило, для вырожденных полупроводников с большой концентрацией заряженных дефектов добавка в термоэдс, обусловленная взаимным увлечением, мала в силу малости параметра  $\Gamma$ , однако для полуметаллов вклад может быть заметным. Можно определенно утверждать, что в той области температур (рис. 3), где доминирует вклад фононного увлечения  $|\alpha_{\text{ph}}| \gg \alpha_{\text{dif}}$ , слагаемым, пропорциональным  $\Gamma$ , в практических расчетах можно пренебречь. Однако в строгой теории при расчете кине-



**Рис. 3.** Типичная зависимость термоэдс вырожденного полупроводника от температуры. Штриховая вертикальная линия разделяет области температур, где доминирует вклад фононного увлечения ( $T < T_{\text{min}}$ ), и область ( $T > T_{\text{min}}$ ), где доминирует диффузионный вклад.

тических коэффициентов (в частности,  $\beta_{xx}$ ) это слагаемое необходимо сохранить. В противном случае нам не удастся обеспечить выполнение соотношений Онзагера для кинетических коэффициентов [10].

Расчет потока тепла  $\mathbf{W}_e^{(2)}$  производится аналогично вычислению тока  $\mathbf{j}^{(2)}$ . В формулу (23) подставим выражение (31) и выполним интегрирование по  $\eta$ , ограничиваясь линейным приближением по параметру вырождения

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_e^{(2)} = & -L_0 T \tilde{\sigma}_{xx} \Gamma \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) \\ & \times \left\{ \frac{e}{k_B} \mathbf{E} D_3 + [D_3 A_{ph} - (1 - \Gamma) D_\Phi C_2] \nabla T \right\}, \\ J_3 = & \int_0^\infty d\eta \left( -\frac{\partial f_0}{\partial \eta} \right) \eta f_2(\eta) \cong 0.381, \\ C_2 = & \ln 2 - \frac{3}{\pi^2} J_3 \cong 0.577. \end{aligned} \quad (43)$$

Из формул (17) и (43) для потока тепла  $\mathbf{W}_e$  находим

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_e = & -L_0 \tilde{\sigma}_{xx} T \left\{ \frac{eT}{\zeta} (D_1 + \Gamma(D_3 - D_1)) \mathbf{E} \right. \\ & + \left[ (1 - \Gamma) \left( 1 + \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) D_\Phi C_2 \right) + \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) \right. \\ & \left. \left. \times \left\{ A_{ph} (D_2 + \Gamma(D_3 - D_2)) \right\} \nabla T \right\}. \end{aligned} \quad (44)$$

Сравнивая кинетические коэффициенты в потоках  $\mathbf{j}$  и  $\mathbf{W}_e$ , убеждаемся, что соотношение Онзагера для них не выполняется. Следует принять во внимание поток петля  $\mathbf{W}_{phe}^{(2)}$ , переносимый фононами, но обусловленный неравновесной добавкой к функции распределения электронов  $\delta f_k^{(2)}$ .

В том же приближении поток тепла  $\mathbf{W}_{phe}^{(2)}$  выражается через ток  $\mathbf{j}_2$  следующим образом:  $\mathbf{W}_{phe}^{(2)} = -\frac{k_B}{e} T A_{ph}(\zeta) \mathbf{j}_2$ . В результате для потока  $\mathbf{W}_{phe}$  получим

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_{phe} = & -\frac{k_B T}{e} \tilde{\sigma}_{xx} A_{ph}(\zeta) \left\{ \left( \mathbf{E} + \frac{k_B}{e} A_{ph}(\zeta) \nabla T \right) \right. \\ & \times \left[ 1 - \Gamma D_\Phi \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) C_\Gamma \right] \\ & \left. + \frac{\pi^2}{3} \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) (D_A + \Gamma(D_3 - D_A)) \nabla T \right\}. \end{aligned} \quad (45)$$

Как и при анализе вклада  $\mathbf{W}_{phe}^{(1)}$ , дрейфовую и диффузионную компоненты потока тепла  $\mathbf{W}_{phe}$  мы включим в электронный поток тепла. Слагаемое, пропорциональное  $A_{ph}(\zeta) \nabla T$  в формуле (45), является следствием эффекта увлечения электронов фононами. Поэтому оно должно

быть включено в фононный поток тепла. В результате такого разделения выражения для кинетических коэффициентов принимают вид

$$\begin{aligned} \gamma_{xx} = & T \beta_{xx}, \\ \kappa_{ph} = & \sum_\lambda \frac{k_B s_\lambda^2 q_T^3}{6\pi^2} \int_0^{z_q^\lambda} dz_q^\lambda (z_q^\lambda)^4 N_{q\lambda}^0 (N_{q\lambda}^0 + 1) \\ & \times \left\{ 1 + \frac{\nu_{phe}^\lambda(z)}{\nu_e(\zeta)} \frac{k_B T}{s_\lambda^2} A_{ph}(\zeta) \left[ 1 - \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) D_\Phi \Gamma C_\Gamma \right] \right\}, \\ \kappa_{xx}^e = & L_0 \tilde{\sigma}_{xx} T \\ & \times \left\{ (1 - \Gamma) \left[ 1 + \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) D_\Phi \Gamma C_2 \right] + \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) \right. \\ & \left. \times A_{ph}(\zeta) [D_2 + D_A + \Gamma(2D_3 - D_2 - D_A)] \right\}, \end{aligned} \quad (46)$$

где  $\beta_{xx}$  определяется выражением (40). Итак, непосредственно из расчета мы убедились, что соотношения Онзагера для кинетических коэффициентов  $\gamma_{xx}$  и  $\beta_{xx}$  выполняются при учете взаимного влияния неравновесности электронов и фононов. Это говорит в пользу того, что наш метод позволяет корректно учесть эффекты взаимного увлечения электронов и фононов при вычислении кинетических коэффициентов вырожденных проводников. Отметим, что нами не использовалось предположение о малости параметра  $\Gamma$ , характеризующего степень взаимного увлечения.

Электронная теплопроводность обычно находится при условии  $j_x = 0$ . В этом случае электронный поток тепла пропорционален градиенту температуры

$$\mathbf{W}_e = -\kappa_e \nabla T, \quad \kappa_e = \kappa_{xx}^e - T \beta_{xx} \alpha. \quad (47)$$

Из выражений (46), (40) и (42) находим

$$\begin{aligned} \kappa_e = & L_0 \tilde{\sigma}_{xx} T \left\{ (1 - \Gamma) \left[ 1 + \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) \right. \right. \\ & \times \left( D_\Phi \Gamma C_2 + A_{ph}(\zeta) (D_2 + D_A - 2D_1) \right) \\ & \left. \left. - \frac{3}{\pi^2} A_{ph}^2(\zeta) \left[ 1 - \Gamma \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) D_\Phi C_2 \right] \right\}. \end{aligned} \quad (48)$$

В заключение заметим, что для полной теплопроводности  $\kappa = \kappa_{ph} + \kappa_e$  интерференционный вклад, пропорциональный  $(A_{ph})^2$ , взаимно сокращается

$$\begin{aligned} \kappa = & \kappa_{ph}^0 + L_0 \sigma_{xx}^0 T \left\{ 1 + \left( \frac{k_B T}{\zeta} \right) \right. \\ & \left. \times \left[ D_\Phi \Gamma C_2 + A_{ph}(\zeta) (D_2 + D_A - 2D_1) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (49)$$

Это является следствием того, что увеличение фононной теплопроводности за счет импульса, передаваемого от

электронов фононам, полностью компенсируется благодаря обратному процессу. Как видно из сравнения (39) и (48), соотношение Видемана–Франца при учете эффекта увлечения электронов фононами  $A_{ph}$  и влияния неравновесности электронов на фононную подсистему (характеризуемое параметром  $\Gamma$ ) не выполняется из-за неупругости рассеяния электронов фононами. В приближении упругого рассеяния ( $A_{ph} = 0$  и  $\Gamma = 0$ ) соотношение Видемана–Франца выполняется. Из формулы (48) можно определить эффективный Лоренц-фактор  $L^* = L_0 \kappa_c / \bar{\sigma}_{xx} T$ . Он равен выражению в фигурных скобках в формуле (48), из которой видно, что эффекты взаимного увлечения могут привести к существенному уменьшению эффективного Лоренц-фактора при низких температурах.

Таким образом, разработан метод расчета кинетических коэффициентов вырожденных проводников, в котором учитывается взаимное влияние неравновесности электронной и фононной подсистем. Проанализировано влияние взаимного увлечения электронов и фононов на электропроводность, термоэдс и теплопроводность вырожденных проводников в линейном приближении параметру вырождения. Рассмотрены также важные физические аспекты теории электрон-фононного увлечения, которым ранее уделялось недостаточно внимания. В первых, в потоках тепла и заряда выделены дрейфовые, диффузионные вклады и вклады увлечения электронов фононами, рассмотрена перенормировка каждого из этих вкладов, связанная с взаимным увлечением электронов и фононов. Это позволило установить, что из-за эффекта взаимного увлечения в термоэдс перенормируется только диффузионный вклад. Во-вторых, детально проанализирован поток тепла, переносимый фононами, но обусловленный неравновесностью электронов. В нем, как и в электронных потоках, выделены вклады, обусловленные дрейфом, диффузией и эффектом увлечения. Установлено, что этот поток приводит к перенормировке как электронного, так и фононного потоков тепла. Показано, что необходимым условием выполнения соотношений микроскопической обратимости Онзагера является учет вклада этого потока в полный электронный поток тепла.

В дальнейшем предполагается обобщить развитый в данной работе метод на предмет учета магнитного поля и рассмотреть влияние неравновесности электронов и фононов на термомагнитные эффекты, такие как продольный и поперечный эффекты Нернста–Эттинггаузена. Термомагнитные эффекты являются гораздо более тонкими индикаторами механизмов рассеяния носителей тока в полупроводниках, чем подвижность [2]: если при изменении механизма рассеяния носителей тока подвижность меняется только по величине, то термомагнитные эффекты меняют свой знак. Поэтому есть основания полагать, что взаимное увлечение электронов и фононов может дать заметный вклад в эти эффекты. В качестве приложения развитой в данной работе теории будут рассмотрены термоэдс и теплопроводность кристаллов HgSe и HgSe:Fe, на которых наиболее ярко проявляются

особенности, обусловленные электрон-фононным увлечением [16,17].

Автор выражает благодарность И.Ю. Араповой за полезные замечания и помощь в оформлении рукописи статьи, А.П. Танкееву и В.И. Окулову за обсуждение результатов работы.

Работа выполнена при поддержке программы ИНТАС (грант № 93-3657 EXT).

## Список литературы

- [1] Э.Л. Гуревич. ЖЭТФ **16**, 3 193 (1946); **16**, 5, 416 (1946).
- [2] И.М. Цидильковский. Термомагнитные явления в полупроводниках. Наука, М. (1960). 296 с.
- [3] В.М. Аскеров. Электронные явления переноса в полупроводниках. Наука, М. (1985). 318 с.
- [4] Ф.Дж. Блат, П.А. Шредер, К.А. Фоилс, Д. Грейг. Термоэлектродвижущая сила металлов. Металлургия, М. (1980). 248 с.
- [5] Р.Н. Гуржи. УФН **94**, 4, 689 (1968); Р.Н. Гуржи, А.И. Копелиович. УФН **133**, 1, 33 (1981).
- [6] П.С. Зырянов, Г.И. Гусева. УФН **95**, 4, 565 (1968); R.T. Delves. Rept. Progr. Phys. **28**, 2, 249 (1965).
- [7] J.E. Parrott. Proc. Phys. Soc. **B70**, 6, 590 (1957).
- [8] J. Appel. Zs. Naturfor. **12a**, 5, 410 (1957); **13a**, 5, 386 (1958).
- [9] I.I. Hanna, E.H. Sondheimer. Proc. Roy. Soc. **A238**, 247 (1957).
- [10] E.H. Sondheimer. Proc. Roy. Soc. **A234**, 391 (1956).
- [11] Э.Л. Гуревич, И.Я. Коренблит. ФТТ **6**, 3, 856 (1964).
- [12] И.Г. Ланг, С.Т. Павлов. ЖЭТФ **63**, 4, 1495 (1972).
- [13] H.P.R. Frederikse. Phys. Rev. **91**, 1, 491 (1953).
- [14] C. Herring. Phys. Rev. **96**, 5, 1163 (1954).
- [15] П.С. Зырянов, М.И. Клиггер. Квантовая теория явлений электронного переноса в кристаллических полупроводниках. Наука, М. (1976). 480 с.
- [16] I.M. Tsidilkovskii, I.G. Kuleyev. Semicond. Sci. Technol. **11**, 5, 625 (1996).
- [17] И.Г. Кулеев, А.Т. Лончаков, И.Ю. Арапова, Г.И. Кулеев. ЖЭТФ **114**, 1, 207 (1998).