

УДК 531

Элементы статистической физики. Учебное пособие.

Авторы А. М. КОВНАЦКИЙ, Ю. Ф. МАТЮШИЧЕВ.

План 1984 г. п. 29.

Одобрено редакционно-издательским советом института.  
Протокол № 6 от 17.05.84 г.

В настоящем пособии рассмотрен раздел «Элементы статистической физики» общего курса физики. Изложены два типа квантовой статистики и классическая статистика на примере электронов в металле, фотонного газа, молекулярного газа, электронов и дырок в полупроводниках.

Пособие предназначено для студентов всех специальностей дневной формы обучения.

Ответственный редактор Г. Н. ФУРСЕЙ.

Рецензенты: А. П. ЖИЛИНСКИЙ (МЭИС), А. И. ПАВЛОВ

© Издание Ленинградского электротехнического института связи им. проф. М. А. Бонч-Бруевича. 1984.

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Основные положения статистической физики . . . . .	1
2. Электроны в металле как пример квантовой статистики Ферми—Дирака . . . . .	13
3. Фотонный газ как пример квантовой статистики Бозе—Эйнштейна . . . . .	19
4. Идеальный газ молекул как пример классической статистики Максвелла—Больцмана . . . . .	23
5. Статистика электронов и дырок в полупроводниках . . . . .	38

А. М. Ковнацкий, Ю. Ф. Матюшичев

## ЭЛЕМЕНТЫ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Учебное пособие

Ответственный редактор Г. Н. Фурсей

Технический редактор В. В. Галочкинская

Корректор И. И. Щеняк

План 1984 г. п. 29

Сдано в набор 24.10.84 г. Подписано к печати 24.12.84 г. М-43374.  
Объем 3 1/4 л. л. Тираж 650 экз. Формат 60×90<sup>1</sup>/16. Цена 45 коп.  
Зак. 1196. Высокая печать.

Типография ЛЭИС. 198320, Ленинград, ул. Свободы, 31

# 1. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

## 1.1. Предмет и метод статистической физики

В природе мы постоянно встречаемся с так называемыми макроскопическими телами. К ним относятся все тела, состоящие из огромного числа отдельных частиц. Такими частицами могут быть электроны, атомы, молекулы, фотоны, нуклоны и т. д. В этом смысле к макроскопическим телам можно отнести все газообразные, жидкые и твердые тела, а также плазму, электромагнитное излучение, рассматриваемое как поток фотонов, сложные ядра, состоящие из большого числа нуклонов, и другие системы.

Частицы, из которых состоят макроскопические тела, находятся в постоянном беспорядочном движении. Если учесть, что в любом макроскопическом теле таких частиц чрезвычайно много, то может показаться, что в поведении макроскопического тела не наблюдается никакой закономерности. Однако это не так. Оказалось, что макроскопические тела обнаруживают особые свойства и в поведении их наблюдаются особые закономерности, связанные исключительно с большим количеством составляющих их частиц. Изучением этих закономерностей занимается раздел теоретической физики, который получил название **статистической физики** или просто **статистики**. Таким образом, предметом статистической физики является изучение законов, которым подчиняется поведение макроскопических тел. При этом предполагается, что законы движения каждой частицы, из которых состоит макроскопическое тело, известны. Отсюда основную задачу статистической физики можно сформулировать следующим образом: Зная законы движения отдельных частиц, из которых построена система, установить законы поведения всей макроскопической системы в целом.

Однако на этом пути встречаются непреодолимые практические трудности. Действительно, даже если предположить, что частицы подчиняются законам классической механики, то для решения такой задачи нужно было бы составить уравнения Ньютона для каждой частицы, решить все эти уравнения и подставить в них начальные условия. Для такого огромного

числа частиц это является практически неосуществимым. Исходя из этого, статистическая физика не ставит своей целью вычислить точные значения физических величин, характеризующих макроскопическую систему. Используя тот факт, что макроскопическая система (тело) состоит из огромного числа частиц, статистическая физика применяет статистический метод и ставит своей целью вычислить вероятности различных значений любых физических величин, характеризующих состояние системы. Зная вероятности различных значений, можно вычислить средние значения этих величин в любом состоянии.

Поскольку все частицы, из которых состоят макроскопические системы, подчиняются законам квантовой механики, статистическая физика таких систем должна быть прежде всего квантовой. Однако при определенных условиях квантовые свойства частиц могут быть выражены слабо. В этом случае движение частиц можно описать законами классической механики, а для описания свойств макроскопической системы использовать классическую статистическую физику, которую можно рассматривать как частный случай квантовой.

## 1.2. Тождественность частиц. Два типа квантовых статистик

Рассмотрим систему одинаковых частиц, подчиняющихся законам квантовой механики. Однаковыми в квантовой механике называются частицы, имеющие одинаковые физические свойства и тождественные, т. е. абсолютно неразличимые. Тождественные частицы могут быть переставлены в любых условиях без изменения физического состояния системы, в которую они входят.

Принцип неразличимости одинаковых частиц приводит к чрезвычайно важным следствиям. Рассмотрим эти следствия на примере системы, состоящей всего из двух частиц. (Полученные результаты легко обобщаются на случай любого числа частиц.)

Как известно из квантовой механики, состояние частицы или системы частиц описывается при помощи волновой функции, физический смысл которой заключается в том, что квадрат ее модуля равен плотности вероятности, т. е. вероятности обнаружить частицу в единичном объеме, взятом около некоторой точки пространства. Обозначим через

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (1)$$

волновую функцию системы, состоящей из двух частиц. Здесь  $\vec{r}$  — совокупность координат частицы вместе со спиновым индексом, т. е. числом, указывающим направление спина частицы.

Плотность вероятности обнаружить первую частицу вблизи точки  $\vec{r}_1$ , а вторую вблизи  $\vec{r}_2$  будет тогда иметь вид

$$|\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2. \quad (2)$$

Воспользуемся принципом тождественности частиц и переставим частицы. При этом физическое состояние системы, а вместе с ним и распределение вероятностей, не должно измениться, т. е.

$$|\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = |\Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)|^2. \quad (3)$$

Из (3) следует, что

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \mp \Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1). \quad (4)$$

Таким образом, мы приходим к следующему выводу: при перестановке двух тождественных частиц волновая функция системы либо меняет знак, либо не меняет. В первом случае волновая функция называется **антисимметричной**, во втором — **симметричной**. Будет ли система описываться антисимметричной или симметричной волновой функцией зависит от рода частиц. Оказалось, что антисимметричными волновыми функциями описываются частицы, имеющие полуцелый спин (в единицах  $\hbar$ ), а симметричными — частицы, имеющие целый спин. Первые получили название **фермионы**, а вторые — **бозоны**. Как известно из квантовой механики, для первых справедлив известный принцип Паули: в каждом квантовом состоянии может находиться только одна частица. Такое различие в физических свойствах систем, состоящих либо из фермионов, либо из бозонов, привело к тому, что для описания каждой из систем была создана своя квантовая статистика. Частицы, описываемые антисимметричными волновыми функциями, подчиняются статистике Ферми — Дирака, а частицы, описываемые симметричными волновыми функциями, подчиняются статистике Бозе — Эйнштейна.

### 1.3. Функция распределения

При изучении любой макроскопической системы независимо от того, какой статистикой, квантовой или классической, она описывается, приходится находить так называемую функцию распределения. Для того чтобы понять, в чем ее физический смысл, рассмотрим следующий простой пример.

Выберем в качестве изучаемой системы газ, состоящий из большого числа молекул. Каждая молекула характеризуется целым рядом параметров: энергией, импульсом, скоростью и т. д. Для того чтобы изучать поведение такого газа, нужно уметь прежде всего задавать состояние этого газа, так как поведение есть не что иное, как изменение состояния со временем.

Казалось бы, для того чтобы описать состояние, в котором находится газ, нужно просто указать, сколько молекул в данный момент времени имеют те или иные определенные значения энергии, импульса, скорости и т. д. (в дальнейшем разговор будет идти только об энергии, хотя все рассуждения справедливы и для других динамических параметров, характеризующих молекулу). Однако нетрудно видеть, что даже если бы это и удалось сделать, то такое описание представляло бы мало интереса и являлось практически совершенно ненужным. Дело в том, что молекулы газа испытывают за одну секунду огромное число столкновений друг с другом, причем при каждом столкновении энергия молекулы меняется случайным образом. Следовательно, число молекул  $n(\epsilon)$ , имеющих в данный момент  $\epsilon$  определенную энергию  $\epsilon$ , есть величина переменная, поэтому даже если  $n(\epsilon)$  точно известно сейчас, то в следующий момент времени оно может сильно измениться. Может оказаться так, что в данный момент времени вообще нет ни одной молекулы, имеющей заданную энергию  $\epsilon$ . Ясно, что для описания состояния макроскопической системы следует опираться на какие-то постоянные или, во всяком случае, мало меняющиеся параметры.

Для того чтобы выяснить, какие параметры удовлетворяют этому условию, изменим саму постановку задачи: будем интересоваться не числом молекул  $n(\epsilon)$ , имеющим в данный момент определенную энергию  $\epsilon$ , а числом молекул  $\Delta n(\epsilon)$ , энергия которых лежит в интервале от  $\epsilon$  до  $\epsilon + \Delta\epsilon$ . Если этот интервал  $\Delta\epsilon$  выбран достаточно широким, так что в него попадает достаточно большое число молекул, то небольшое изменение величины  $\Delta n(\epsilon)$ , связанное с тем, что какое-то число молекул в результате столкновений получит энергию, большую  $\epsilon + \Delta\epsilon$  и, следовательно, выйдет из данного интервала, а какое-то число молекул, энергия которых была меньше  $\epsilon$ , войдет в него, будет малозаметным на фоне общего числа молекул, энергия которых лежит в данном интервале. При этом величина  $\Delta n(\epsilon)$  будет испытывать слабые колебания около некоторого среднего значения  $\langle \Delta n(\epsilon) \rangle$ . Именно эта величина  $\langle \Delta n(\epsilon) \rangle$  и может быть выбрана в качестве устойчивой характеристики системы. (Заметим, что если интервал взят слишком узким, так что в него попадает слишком мало молекул, например две, никакого разумного среднего значения ввести нельзя.)

Рассмотрим теперь, от чего может зависеть величина  $\langle \Delta n(\epsilon) \rangle$ . Разумно предположить, что она зависит как от общего числа молекул в газе  $N$ , так и от ширины выбранного интервала  $\Delta\epsilon$ :

$$\langle \Delta n(\epsilon) \rangle \sim N \Delta\epsilon. \quad (5)$$

Коэффициент пропорциональности в (5) обозначается как  $f(\varepsilon)$  и носит название функции распределения молекул газа по энергиям:

$$\langle \Delta n(\varepsilon) \rangle = f(\varepsilon) N \Delta \varepsilon \quad (6)$$

или

$$f(\varepsilon) = \frac{\langle \Delta n(\varepsilon) \rangle}{N \Delta \varepsilon}. \quad (7)$$

Согласно (7)  $f(\varepsilon)$  можно дать следующее определение: функцией распределения называется физическая величина, численно равная относительному числу молекул, энергия которых лежит в единичном интервале, взятом около некоторой энергии  $\varepsilon$ .

Выше уже упоминалось о том, что интервал  $\Delta \varepsilon$  не должен быть слишком узким. Однако часто при математическом описании системы рассматривают бесконечно малый интервал  $d\varepsilon$  и, следовательно, бесконечно малую величину  $\langle dn(\varepsilon) \rangle$ . Нужно помнить, что это есть просто математический прием, так как, конечно, число молекул не может быть бесконечно малой величиной, оно не может быть даже меньше единицы. Под величиной  $\langle dn(\varepsilon) \rangle$  понимают физически бесконечно малую величину, т. е. значительно меньшую, чем полное число молекул газа  $N$ , но все же содержащую достаточно большое число молекул, так что можно говорить о их среднем значении. С учетом этого (7) можно переписать в следующем виде:

$$f(\varepsilon) = \frac{dn(\varepsilon)}{Nd\varepsilon}, \quad (8) \quad dn(\varepsilon) = f(\varepsilon) Nd\varepsilon. \quad (9)$$

(При этом в дальнейшем знак  $\langle \dots \rangle$  у  $dn(\varepsilon)$  будем опускать, так как речь пойдет только о среднем числе частиц). Если (9) проинтегрировать по всем энергиям от 0 до  $\infty$ , получим полное число частиц в системе  $N$

$$\int_0^{\infty} dn(\varepsilon) = \int_0^{\infty} f(\varepsilon) Nd\varepsilon = N \int_0^{\infty} f(\varepsilon) d\varepsilon = N. \quad (10)$$

Из (10), сокращая на  $N$ , получим

$$\int_0^{\infty} f(\varepsilon) d\varepsilon = 1. \quad (11)$$

Условие (11) получило название условия нормировки. Функцию распределения можно нормировать не только на 1, но и на  $N$ . Если определить  $f(\varepsilon)$  не как относительное, а как абсолютное число частиц, энергия которых лежит в единичном интервале около некоторого  $\varepsilon$ , то аналогично предыдущему, имеем

$$dn(\varepsilon) = f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad f(\varepsilon) = \frac{dn(\varepsilon)}{d\varepsilon}; \quad (12)$$

$$\int_0^{\infty} f(\varepsilon) d\varepsilon = N. \quad (13)$$

Мы рассмотрели распределение молекул газа по энергиям. Совершенно также можно ввести функцию распределения молекул газа по импульсу, по абсолютному значению скорости, по величине составляющей скорости вдоль некоторого направления и т. д.

Выше была введена величина  $dn(\epsilon)$ , определяющая среднее число молекул, энергия которых лежит в интервале от  $\epsilon$  до  $\epsilon+de$ . Эту величину можно также вычислить другим, отличным от предыдущего, способом. Как известно из квантовой механики, энергетический спектр макроскопической системы представляет из себя систему близко лежащих энергетических уровней, причем в общем случае каждой разрешенной энергии  $\epsilon$  может соответствовать несколько квантовых состояний. Обозначим через  $dN(\epsilon)$  число квантовых состояний, лежащих в интервале энергий от  $\epsilon$  до  $\epsilon+de$ . Далее, обозначим через  $\bar{n}(\epsilon)$  среднее число частиц в квантовом состоянии с энергией  $\epsilon$ . Тогда величину  $dn(\epsilon)$  можно вычислить, если умножить число квантовых состояний в интервале от  $\epsilon$  до  $\epsilon+de$  на среднее число частиц в каждом квантовом состоянии, т. е.

$$dn(\epsilon) = \bar{n}(\epsilon) \cdot dN(\epsilon). \quad (14)$$

Величину  $dN(\epsilon)$  можно записать следующим образом:

$$dN(\epsilon) = \underbrace{\frac{dN(\epsilon)}{de}}_{\text{где обозначено}} de = \underbrace{g(\epsilon)}_{\text{плотность состояний}} de, \quad (15)$$

где обозначено

$$g(\epsilon) = \frac{dN(\epsilon)}{de}. \quad (16)$$

Величина  $g(\epsilon)$  носит название плотности состояний. Из (16) нетрудно видеть, что плотность состояний определяет число квантовых состояний в единичном интервале энергий, взятом около некоторой энергии  $\epsilon$ . Сравнивая (12) и (14) с учетом (15), получим

$$f(\epsilon) = \bar{n}(\epsilon)g(\epsilon). \quad (17)$$

Величина  $\bar{n}(\epsilon)$  зависит от того, какой статистикой описывается данная макроскопическая система

Таблица 1

Типы статистик

Квантовая статистика Ферми—Дирака	Квантовая статистика Бозе—Эйнштейна	Классическая статистика Максвелла—Больцмана
1. Частицы абсолютно тождественны 2. В каждом квантовом состоянии может быть не более одной частицы	1. Частицы абсолютно тождественны 2. В каждом квантовом состоянии может быть произвольное число частиц	1. Частицы полностью различимы 2. В каждом состоянии может быть произвольное число частиц

Для того чтобы иллюстрировать различие в статистических свойствах систем, подчиняющихся той или иной статистике, рассмотрим следующий пример. Пусть нам нужно распределить две частицы по трем «ячейкам» («ячейки» играют роль квантовых состояний). Если частицы подчиняются статистике Ферми—Дирака, то возможны всего 3 различных распределения (рис. 1).



Рис. 1

Если частицы подчиняются статистике Бозе—Эйнштейна, то возможно 6 различных распределений (рис. 2).

Если частицы подчиняются статистике Максвелла—Больцмана, то возможно 9 различных распределений (при этом поскольку в этой статистике частицы считаются различными, мы должны их обозначать по-разному: одну темным, а одну светлым кружком) (рис. 3).

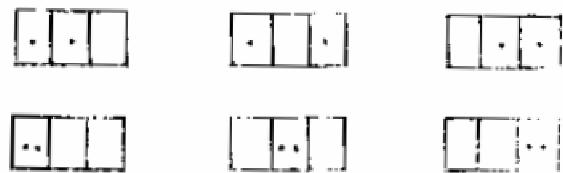


Рис. 2

Таким образом, данный пример показывает, что в зависимости от того, какой статистикой описывается данная система,

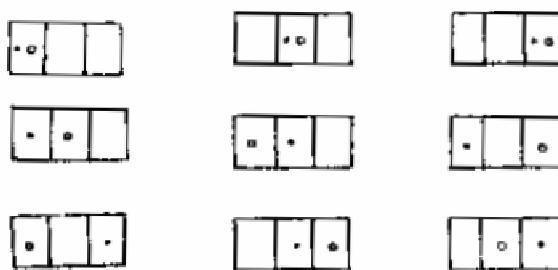


Рис. 3

будет то или иное распределение частиц по квантовым состояниям, а следовательно, будет различным среднее число частиц в данном квантовом состоянии.

Итак, из всего изложенного выше следует, что зная плотность состояния и сред-

нее число частиц в данном квантовом состоянии, можно найти функцию распределения для данной макроскопической системы. Зная же функцию распределения, можно вычислить любые макроскопические величины, характеризующие данную систему в целом. Это и будет сделано в дальнейшем на примере различных макроскопических систем.

#### 1.4. Квантовая статистика Ферми—Дирака

Как уже говорилось выше, статистике Ферми—Дирака подчиняются частицы с полуцелым спином, описываемые антисимметричной волновой функцией. К таким частицам относятся электроны, нейтроны, протоны, позитроны, нейтрино,  $\mu$ -мезоны и др. Эта статистика была предложена для электронов италь-

янским физиком Э. Ферми в 1926 г., а ее связь с квантовой механикой была установлена английским физиком П. Дираком.

Согласно принципу Паули, в каждом квантовом состоянии может находиться либо 0 частиц, либо 1 частица. В основе квантовой статистики Ферми—Дирака лежит утверждение, что **среднее** число частиц  $\bar{n}(\varepsilon)$  в квантовом состоянии с энергией  $\varepsilon$  равно

$$\boxed{\bar{n}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} + 1}}, \quad (18)$$

где  $T$  — абсолютная температура;  $k$  — постоянная Больцмана;  $\mu$  — энергия Ферми (или химический потенциал). Функция  $\bar{n}(\varepsilon)$  носит название функции Ферми—Дирака. Этой функции можно придать следующий физический смысл. Обозначим через  $\omega(\varepsilon)$  **вероятность** обнаружить частицу в данном квантовом состоянии с энергией  $\varepsilon$ . Тогда по определению

$$\boxed{\omega(\varepsilon) = \frac{\bar{n}(\varepsilon)}{N}}, \quad (19)$$

где  $N$  — полное число частиц в данном квантовом состоянии. Поскольку  $N=1$ ,  $\omega(\varepsilon) = \bar{n}(\varepsilon)$ . Таким образом, **функция Ферми—Дирака численно равна вероятности обнаружить частицу в квантовом состоянии с энергией  $\varepsilon$ .** Проанализируем вид функции  $\bar{n}(\varepsilon)$  для различных температур.

При  $T=0 K$  имеем следующие случаи:

при  $\varepsilon < \mu$   $\bar{n}(\varepsilon) = 1$ , т. е. все квантовые состояния с энергией  $\varepsilon < \mu$  заняты;

при  $\varepsilon > \mu$   $\bar{n}(\varepsilon) = 0$ , т. е. все квантовые состояния с энергией  $\varepsilon > \mu$  совершенно пусты.

График функции  $\bar{n}(\varepsilon)$  при  $T=0 K$  показан на рис. 4 (кривая 1).

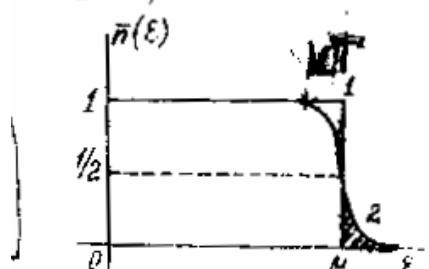


Рис. 4

При  $T \neq 0 K$  имеем следующие случаи:

при  $\varepsilon = \mu$   $\bar{n}(\varepsilon) = \frac{1}{2}$ . Таким образом, уровень Ферми совпадает с таким энергетическим уровнем, вероятность обнаружить частицу на котором равна 1/2;

при  $\varepsilon - \mu \gg kT$  единицей в знаменателе (18) можно пренебречь по сравнению с экспонентой и тогда

$$\bar{n}(\varepsilon) \approx \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}}} = e^{\frac{-\varepsilon + \mu}{kT}} = e^{\frac{\mu}{kT}} \cdot e^{-\frac{\varepsilon}{kT}},$$

т. е.  $\bar{n}(\varepsilon)$  уменьшается экспоненциально с ростом энергии  $\varepsilon$ ;

при  $\varepsilon < \mu$  и  $|\varepsilon - \mu| \gg kT$   $e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}} \ll 1$  и экспонентой в знаменателе (18) можно пренебречь по сравнению с единицей. В этом случае  $\bar{n}(\varepsilon) \approx 1$ .

График функции  $\bar{n}(\varepsilon)$  при  $T \neq 0 K$  показан на рис. 4, (кривая 2).

### 1.5. Квантовая статистика Бозе—Эйнштейна

Статистике Бозе—Эйнштейна подчиняются частицы с нулевым или целым спином, описываемые симметричными волновыми функциями. К таким частицам относятся световые кванты-фотоны (спин равен 1), мезоны, составные частицы из четного числа фермионов (дейtron,  $\alpha$ -частица), молекулы газов. Эта статистика была предложена в 1924 г. Бозе и развита Эйнштейном. Характерной особенностью статистики Бозе—Эйнштейна является то, что в одном и том же квантовом состоянии может находиться любое число одинаковых частиц. Если обозначить через  $n$  число частиц в данном квантовом состоянии, то  $n$  может принимать значения 0, 1, 2, 3...

Рассмотрим систему из  $N$  одинаковых невзаимодействующих бозонов, находящихся в равновесии при температуре  $T$ . Основное соотношение статистики Бозе—Эйнштейна определяет среднее число частиц  $\bar{n}(\varepsilon)$ , находящихся в квантовом состоянии с энергией  $\varepsilon$ . Оно имеет вид

$$\bar{n}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}} - 1}, \quad (20)$$

где  $k$  — постоянная Больцмана;  $\mu$  — химический потенциал.

Если  $N$  задано, то  $\mu$  находится из условия

$$N = \sum \bar{n}(\varepsilon), \quad (21)$$

где суммирование производится по всем квантовым состояниям.

Функция  $\bar{n}(\varepsilon)$  носит название функции распределения Бозе. Проанализируем вид этой функции. Из (20) нетрудно видеть, что при  $\varepsilon \rightarrow \infty$   $\bar{n}(\varepsilon) \rightarrow 0$ , а при  $\varepsilon \rightarrow \mu$   $\bar{n}(\varepsilon) \rightarrow \infty$ . Если выбрать за начало отсчета наименьшее значение энергии, которую может иметь одна частица, т. е.  $\varepsilon = 0$ , то график функции  $\bar{n}(\varepsilon)$  будет иметь вид, представленный на рис. 5. При этом  $\mu < 0$ . В статистической физике доказывается, что химический потенциал  $\mu$  для системы фотонов равен 0. При этом если фотоны находятся в некотором объеме, то их полное число  $N$  не остается постоянным, так как фотоны могут поглощаться и испускаться.

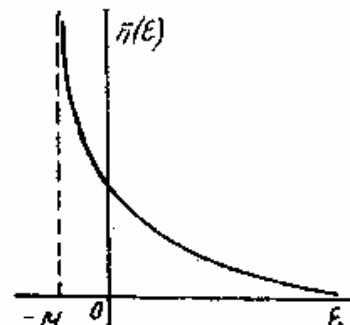


Рис. 5

ся стенками сосуда. Подробное поведение системы фотонов описано в разд. 3.

### 1.6. Классическая статистика Максвелла—Больцмана

Как уже указывалось в подразд. 1.1, при определенных условиях квантовые особенности движения частиц, входящих в состав макроскопической системы, становятся несущественными, и можно пользоваться классической статистической физикой, которая была создана в конце прошлого века английским физиком К. Максвеллом и австрийским физиком Л. Больцманом. Особенностью этой статистики является то, что в каждом состоянии с энергией  $\epsilon$  может находиться любое число частиц, при этом частицы являются различимыми, т. е. принцип тождественности частиц не имеет места. Для среднего числа частиц  $\bar{n}(\epsilon)$  в состоянии с энергией  $\epsilon$  основное соотношение статистики Максвелла—Больцмана имеет вид

$$\bar{n}(\epsilon) = A e^{-\frac{\epsilon}{kT}}, \quad (22)$$

где  $k$  — постоянная Больцмана;  $A$  — постоянная, не зависящая от  $\epsilon$ ;  $T$  — абсолютная температура.

Сравнивая (22) с (18) и (20), нетрудно видеть, что статистики Ферми—Дирака и Бозе—Эйнштейна переходят в статистику Максвелла—Больцмана при выполнении условия

$$e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}} \gg 1. \quad (23)$$

Действительно, согласно (18) и (20)

$$\bar{n}(\epsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}} + 1}, \quad (24)$$

где «+» относится к статистике Ферми—Дирака, а «—» — к статистике Бозе—Эйнштейна.

Учитывая (23), из (24) получим

$$\bar{n}(\epsilon) \approx \frac{1}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}}} = e^{-\frac{\epsilon - \mu}{kT}} = e^{\frac{\mu}{kT}} \cdot e^{-\frac{\epsilon}{kT}}. \quad (25)$$

Из сравнения (25) и (22) можно выразить постоянную  $A$ :

$$A = e^{\frac{\mu}{kT}}. \quad (26)$$

Таким образом, основное соотношение классической статистики может быть записано в виде

$$\bar{n}(\epsilon) = e^{\frac{\mu - \epsilon}{kT}}. \quad (27)$$

График этой функции приведен на рис. 6.

Условие (23), определяющее переход от квантовой статистики к классической, может быть записано и в другом виде. Если вычислить  $\mu$  для идеального газа молекул (это будет сделано в разд. 4) и подставить его в (23), то это условие примет вид

УСЛ. 
$$\left(\frac{V}{N}\right)^{1/3} \gg \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi mkT}}, \quad (28)$$

где  $V$  — объем, занимаемый системой;  $N$  — полное число частиц в системе;  $m$  — масса частиц;  $\hbar$  — постоянная Планка.

Если условие (28) выполнено, то можно пользоваться классической статистикой. В противном случае следует пользоваться квантовой статистикой. Условие (28) носит название «критерий вырождения».

Условию (28) можно придать простой физический смысл. Величина  $\frac{V}{N}$  есть объем, приходящийся на одну частицу,  $\left(\frac{V}{N}\right)^{1/3}$  есть по порядку величины среднее расстояние между частицами в системе. Величина  $\sqrt{2\pi mkT}$  есть по порядку величины импульс частицы  $p$ , соответствующий тепловой энергии  $e \sim kT$ ,  $\frac{\hbar}{p}$  есть длина волны де Броиля, соответствующая этому импульсу, или, как говорят, «тепловая длина волны де Броиля». Таким образом, условие (28) имеет следующий физический смысл: переход к классической статистике возможен, если среднее расстояние между частицами намного больше длины волны де Броиля частицы (т. е. система должна быть в достаточной мере разрежена).

Рассмотрим теперь переход от квантовой статистики к классической более подробно. Как уже упоминалось, квантовая статистика при рассмотрении распределения частиц по квантовым состояниям учитывает три основных положения: 1. соотношение неопределеностей Гейзенberга, из которого следует, что в общем случае частицы не имеют определенных координат и импульса и не движутся по траекториям; 2. принцип Паули (для фермионов); 3. принцип тождественности частиц. Поскольку в классической физике эти три положения в расчет не принимаются, следует выяснить, при каких условиях от них можно отказаться.

Рассмотрим сначала первое положение. В классической механике частицам приписываются определенные положения, импульс и траектория, т. е. частица в каждый момент времени считается локализованной, находящейся в определенном месте пространства. При каком условии квантовую частицу можно считать с определенной точностью локализованной? Легко по-

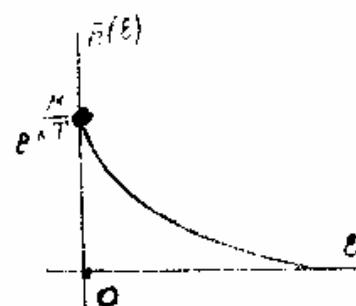


Рис. 6

нять, что это можно сделать, если неопределенность в координате частицы (играющая роль как бы «размера» частицы) намного меньше среднего расстояния между частицами.

Перейдем теперь ко второму положению, касающемуся принципа Паули. Заметим прежде всего, что если условие перехода к классической статистике выполнено, т. е.

$$\underbrace{e^{\frac{\epsilon-\mu}{kT}}}_{\sim\sim\sim} \gg 1, \text{ то } \overline{n}(\epsilon) = \frac{1}{\underbrace{e^{\frac{\epsilon-\mu}{kT}}}_{\sim\sim\sim}} \ll 1,$$

то это означает, что среднее число частиц в определенном квантовом состоянии намного меньше единицы, а следовательно, и вероятность обнаружить частицу в этом квантовом состоянии чрезвычайно мала. Вероятность того, что в это квантовое состояние попадет еще и вторая частица (что запрещено принципом Паули) настолько ничтожна, что специальный запрет этого становится практически совершенно излишним.

Наконец, что касается принципа тождественности частиц, то рассуждения, аналогичные тем, которые были приведены выше, показывают, что в системе с малой плотностью частиц этот принцип оказывается несущественным.

Итак, мы познакомились с основными положениями квантовой и классической статистик. Приведем в заключение список важнейших соотношений:

квантовая статистика Ферми—Дирака

$$\overline{n}(\epsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon-\mu}{kT}} + 1}; \quad (29)$$

квантовая статистика Бозе—Эйнштейна

$$\overline{n}(\epsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon-\mu}{kT}} - 1}; \quad (30)$$

классическая статистика Максвелла—Больцмана

$$\overline{n}(\epsilon) = e^{\frac{\mu-\epsilon}{kT}}; \quad (31)$$

условие перехода к классической статистике («критерий вырождения»)

$$\left(\frac{V}{N}\right)^{1/3} \gg \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi mkT}}. \quad (32)$$

Перейдем теперь к более подробному рассмотрению конкретных макроскопических систем, подчиняющихся статистике того или иного рода.

#### Контрольные вопросы

Что такое макроскопическое тело? В чем состоит предмет и метод статистической физики?

В чем заключается принцип тождественности частиц?

Какие волновые функции называются симметричными, а какие антисимметричными? Какие два типа квантовых статистик вы знаете?

В чем заключается физический смысл функции распределения?

Каков физический смысл функции Ферми—Дирака?

Что такое уровень Ферми?

Каков физический смысл функции Бозе—Эйнштейна?

При каком условии обе квантовые статистики переходят в классическую?

В чем физический смысл критерия вырождения?

## 2. ЭЛЕКТРОНЫ В МЕТАЛЛЕ КАК ПРИМЕР КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКИ ФЕРМИ—ДИРАКА

### 2.1. Введение

В качестве примера макроскопической системы, подчиняющейся квантовой статистике Ферми—Дирака, рассмотрим электронный газ в металле.

Основы электронной теории металлов были заложены Друде и Лоренцом. В их теории, которую иногда называют классической электронной теорией металлов, предполагалось, что в металле существуют два типа электронов — свободные и связанные. Много лет спустя это предположение было обосновано с помощью зонной теории, которая является фундаментом современной теории твердого тела. Согласно теории Друде—Лоренца свободные электроны в металле движутся подобно молекулам газа. К ним применимы все результаты кинетической теории газов. Так, электроны подчиняются статистике Максвелла—Больцмана, их энергия равномерно распределена по степеням свободы, и, следовательно, так же, как у молекул газа, средняя кинетическая энергия электронов равна  $\frac{3}{2} kT$ , где  $T$  — абсолютная температура,  $k$  — постоянная Больцмана.

Теория Друде—Лоренца имела существенный успех в объяснении электропроводности и теплопроводности металлов. В частности, на основе их модели металла удалось вывести закон Ома и закон Видемана—Франца (закон, который связывает электропроводность и теплопроводность металлов). Однако эта теория не смогла объяснить целый ряд других явлений и прежде всего предсказать правильную величину теплопроводности металлов. Все это говорит о том, что модель Друде—Лоренца является приближенной и неточно отражает физические процессы, происходящие в металлах.

Современная электронная теория металлов была создана в 1927 г. Зоммерфельдом, который применил квантовую механику к электронной теории Друде—Лоренца. Свободные электроны в теории Зоммерфельда движутся по законам квантовой

механики, они подчиняются принципу Паули, а следовательно, их распределение по энергиям в металле описывается не классической статистикой Максвелла—Больцмана, а квантовой статистикой Ферми—Дирака. Теория Зоммерфельда полностью разрешила трудности теории Друде—Лоренца.

Прежде чем переходить к конкретным расчетам, определим тип статистики, которая может быть применена для свободных электронов в металле. Согласно результатам, изложенным в первой главе, квантовая статистика должна использоваться тогда, когда выполнено условие

$$\left(\frac{V}{N}\right)^{1/3} < \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi mkT}}. \quad (1)$$

Подставляя в (1)  $\hbar = 6,6 \cdot 10^{-34}$  Дж·с,  $m = 9,1 \cdot 10^{-31}$  кг,  $k = 1,38 \cdot 10^{-23}$  Дж/К,  $T = 300$  К,  $\frac{N}{V} = n = 10^{28}$  м<sup>-3</sup>, убеждаемся что условие (1) выполнено. Таким образом, к свободным электронам в металле должна быть применена квантовая статистика.

## 2.2. Плотность состояний

Одна из основных задач теории металлов — вычисление функции распределения электронов по энергиям  $f(\epsilon)$ . Для этого, как было указано в подразд. 1.3 разд. 1, требуется знание так называемой плотности состояний. Напомним, что плотность состояний

$$g(\epsilon) = \frac{dN(\epsilon)}{d\epsilon} \quad (2)$$

есть физическая величина, численно равная числу квантовых состояний, лежащих в единичном энергетическом интервале, взятом около некоторой энергии  $\epsilon$ . Перейдем к вычислению плотности состояний.

Для решения поставленной задачи удобно сначала найти число квантовых состояний, приходящихся на интервал импульсов от  $p$  до  $p+dp$ , а потом перейти к энергиям. Так как в модели свободных электронов полная энергия электрона равна кинетической, то энергия и импульс связаны простым соотношением  $\epsilon = \frac{p^2}{2m}$ . Введем новое понятие импульсного (или фазового) пространства. Импульсным пространством называется пространство, по осям декартовой системы координат которого отложены три составляющие импульса  $p_x, p_y, p_z$ . Рассмотрим, как изображается состояние электрона в этом пространстве. Чтобы задать состояние электрона в классической механике, нужно знать одновременно его координаты  $x, y, z$  и три составляющие его импульса  $p_x, p_y, p_z$ . Если точное положение электрона для нас несущественно, состояние электрона будет определяться только  $p_x, p_y, p_z$ . Нетрудно увидеть, что в импульсном

пространстве такое состояние изображается точкой (рис. 7, а).

В квантовой механике дело обстоит иначе. Как известно, электроны — частицы, обладающие волновыми свойствами. Для них справедливо известное соотношение неопределенностей Гейзенберга:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \simeq h, \Delta p_y \cdot \Delta y \simeq h, \Delta p_z \cdot \Delta z \simeq h, \quad (3)$$

где  $\Delta x, \Delta y, \Delta z$  — неопределенностии в координатах  $x, y, z$ ;  $\Delta p_x, \Delta p_y, \Delta p_z$  — неопределенностии в составляющих импульса. Перемножим три соотношения неопределенностей:

$$\Delta x \Delta y \Delta z \cdot \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z \simeq h^3. \quad (4)$$

Произведение  $\Delta x \Delta y \Delta z$  определяет область пространства, в котором находится частица. Соответственно  $\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z$  определяет область импульсного пространства, в котором находится импульс частицы. Из формулы (4) следует

$$\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z \simeq \frac{h^3}{\Delta x \Delta y \Delta z}. \quad (5)$$

Таким образом, если в классической механике состояние в импульсном пространстве изображается точкой, то в квантовой механике на каждое состояние приходит объем  $\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z$  (рис. 7, б), взятый около точки с «координатами»  $p_x, p_y, p_z$ .

Если предположить, что электрон находится в куске металла, имеющего форму куба с ребрами  $L$ , то естественно, что область пространства, в котором находится электрон, равна  $L^3$ , т. е.  $\Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z = L^3 = V$ , где  $V$  — объем рассматриваемого куска металла.

Отсюда  $\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z = \frac{h^3}{V}$ , т. е. в

квантовой механике на каждое состояние электрона приходит объем  $\frac{h^3}{V}$  импульсного пространства.

Найдем число квантовых состояний в интервале импульсов от  $p$  до  $p+dp$ . Изобразим в пространстве импульсов поверхность, отвечающую состояниям с постоянной энергией  $\epsilon$  (рис. 8). Так как  $\epsilon = \frac{p^2}{2m}$ , то условию  $\epsilon = \text{const}$  соответствует  $p^2 = \text{const}$  или  $p = \text{const}$  независимо от направления, иными словами, подобная поверхность представляет собой сферу радиусом  $p$ . Энергии  $\epsilon + d\epsilon$  будет соответствовать сфера радиусом  $p+dp$ . Эти две сферы вырежут в импульсном пространстве

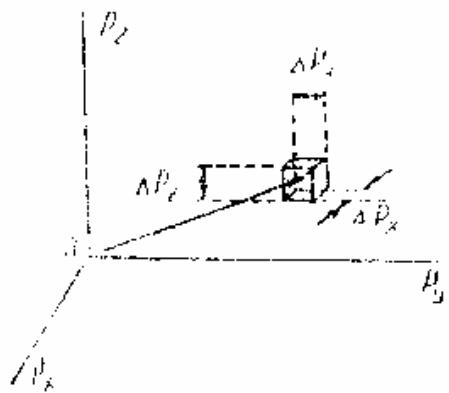


Рис. 7б

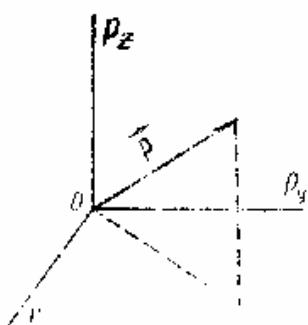


Рис. 7а

отсюда  $\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z = \frac{h^3}{V}$ , т. е. в

сферический слой толщиной  $dp$ . Объем сферы радиусом  $p$  в пространстве импульсов равен  $\frac{4}{3} \pi p^3$ , а объем сферического слоя толщиной  $dp$  будет равен дифференциалу этого выражения, т. е.  $4\pi p^2 dp$ . Итак, на все состояния с импульсом от  $p$  до  $p+dp$  приходится объем в импульсном пространстве  $4\pi p^2 dp$ . Так как на одно состояние приходится объем  $\frac{h^3}{V}$ , то

$$dN(p) = \frac{4\pi p^2 dp \cdot V}{h^3}. \quad (6)$$

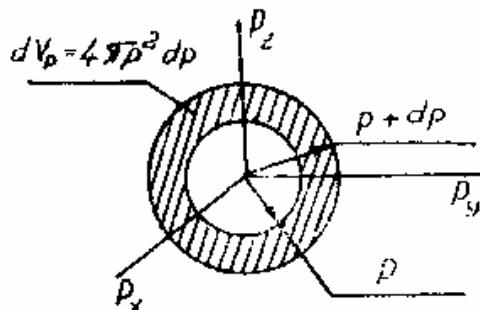


Рис. 8

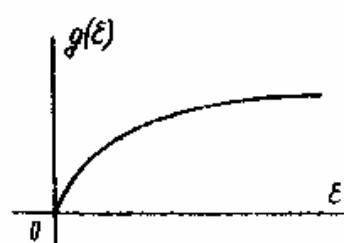


Рис. 9

В полученном выражении нужно выразить  $p$  и  $dp$  через  $\epsilon$  и  $d\epsilon$ , воспользовавшись соотношением  $\epsilon = \frac{p^2}{2m}$ . Поскольку  $p^2 = 2m\epsilon$ , продифференцировав правую и левую части, найдем

$$pd\epsilon = mdp, \quad dp = \frac{md\epsilon}{p}, \quad dp = \frac{md\epsilon}{\sqrt{2m\epsilon}}. \quad (7)$$

Подставив (7) в  $dN(p)$ , получим число состояний, приходящихся на энергетический интервал от  $\epsilon$  до  $\epsilon+d\epsilon$ :

$$dN(\epsilon) = \frac{2\pi(2m)^{3/2} V \sqrt{\epsilon}}{h^3} d\epsilon. \quad (8)$$

Так как по определению  $dN(\epsilon) = g(\epsilon) d\epsilon$ , выражение для плотности состояний имеет вид

$$g(\epsilon) = \frac{2\pi(2m)^{3/2} V}{h^3} \sqrt{\epsilon}. \quad (9)$$

Поскольку каждому квантовому состоянию с импульсом  $p$  и энергией  $\epsilon$  соответствуют два возможных направления спина частицы, число квантовых состояний следует удвоить, поэтому функция  $g(\epsilon)$  будет иметь вид

$$g(\epsilon) = \frac{4\pi(2m)^{3/2} V}{h^3} \sqrt{\epsilon}.$$

На рис. 9. изображен график функции  $g(\epsilon)$ .

### 2.3. Распределение электронов по энергиям в металле

Рассмотрим распределение электронов по энергиям в металле. Для простоты будем считать, что имеется кусок металла единичного объема, т. е.  $V=1$ .

Согласно подразделу 1.3 разд. 1

$$dn(\epsilon) = g(\epsilon) \bar{n}(\epsilon) d\epsilon. \quad (10)$$

Так как выражения для  $g(\epsilon)$  и  $\bar{n}(\epsilon)$  нами получены ранее, имеем

$$dn(\epsilon) = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \cdot \frac{\sqrt{\epsilon}}{\frac{\epsilon - \mu}{e^{-\kappa T}} + 1} d\epsilon. \quad (11)$$

Величина

$$f(\epsilon) = \frac{dn(\epsilon)}{d\epsilon} = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \cdot \frac{\sqrt{\epsilon}}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{\kappa T}} + 1} \quad (12)$$

носит название функции распределения электронов по энергиям в металле. Она равна среднему числу электронов в единице объема металла в единичном интервале энергий, взятом около энергии  $\epsilon$ . Построим график функции  $f(\epsilon) = \frac{dn(\epsilon)}{d\epsilon}$ . При  $T = 0$  К, как известно,  $\bar{n}(\epsilon) = 1$ , если  $\epsilon < \mu$ , и, следовательно,  $f(\epsilon) = g(\epsilon)$ ; при  $\epsilon > \mu$   $\bar{n}(\epsilon) = 0$  и, следовательно,  $f(\epsilon) = 0$ . Таким образом, график функции имеет вид, указанный на рис. 10.

Выберем на оси  $\epsilon$  участок  $d\epsilon$  около какой-либо энергии  $\epsilon$  и подсчитаем площадь заштрихованной полоски. Для бесконечно малого основания  $d\epsilon$  эту полоску можно считать прямоугольником с основанием  $d\epsilon$  и высотой  $\frac{dn(\epsilon)}{d\epsilon}$ . Тогда площадь этой полоски равна  $\frac{dn(\epsilon)}{d\epsilon} \cdot d\epsilon = dn(\epsilon)$ .

Результат имеет простой физический смысл: площадь заштрихованной полоски равна числу электронов в единице объема, имеющих энергию от  $\epsilon$  до  $\epsilon + d\epsilon$ . Нетрудно видеть, что площадь под всей кривой равна числу электронов в 1 см<sup>3</sup>, имеющих любые энергии от 0 до  $\mu$ , т. е. равна концентрации электронов в металле. Если концентрацию обозначить через  $n$ , то

$$n = \int_0^\mu g(\epsilon) d\epsilon = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^\mu \sqrt{\epsilon} d\epsilon. \quad (13)$$

Считая концентрацию заданной величиной, из данного выражения просто найти уровень Ферми  $\mu$

$$\int_0^\mu \epsilon^{1/2} d\epsilon = \frac{2}{3} \mu^{3/2}; \quad n = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \cdot \frac{2}{3} \mu^{3/2}.$$

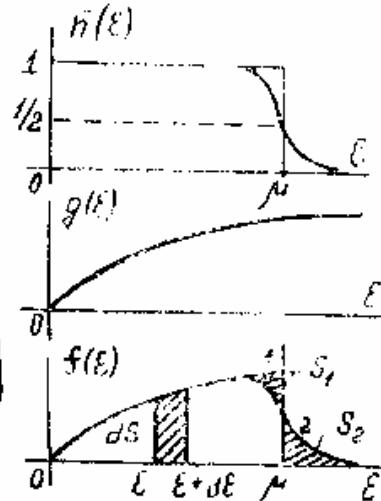


Рис. 10

Отсюда  $\mu = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{3n}{8\pi} \right)^{1/3}$ . (14)

Мы получили результат: при абсолютном 0 уровне Ферми, совпадающий с максимальной энергией электронов  $\epsilon_{\max}$ , определяется только концентрацией электронов.

Теперь рассмотрим распределение электронов по энергиям при  $T > 0$  (рис. 10). Заметим, что качественно такую зависимость можно построить как произведение графика  $g(\epsilon)$  на график  $n(\epsilon)$  при  $T > 0$  (рис. 10, кривая 2). Из графика видно, что имеется некоторое количество электронов за уровнем Ферми. Так как площадь под кривой по-прежнему есть концентрация  $n$  электронов в металле (которая считается постоянной), очевидно, что за уровень Ферми перешли электроны, лежащие под уровнем Ферми в среднем в интервале энергий  $\sim kT$ , поэтому заштрихованные площади  $S_1$  и  $S_2$  равны. Из графика рис. 10 видно, что температура сильно возмущает только те электроны, которые лежат вблизи уровня Ферми. Для остальных электронов распределение такое же, как и при  $T = 0$  К.

Вычисленный в этом подразделе уровень Ферми соответствует  $T = 0$  К. При температуре, отличной от 0, более точный расчет дает следующее выражение для уровня Ферми в металле:

$$\mu = \mu_0 \left[ 1 - \frac{\pi^2}{12} \left( \frac{kT}{\mu_0} \right)^2 \right], \quad (15)$$

где  $\mu_0$  — уровень Ферми при абсолютном 0. Добавочный член  $\left( \frac{kT}{\mu_0} \right)^2 \ll 1$ .

#### 2.4. Средняя энергия электронов в металле

Вычислим среднюю энергию электронов в металле.

Полную энергию электронов в единице объема можно подсчитать следующим образом. Рассмотрим сначала случай абсолютного нуля. В единице объема находится  $dn(\epsilon)$  электронов, имеющих энергию от  $\epsilon$  до  $\epsilon + d\epsilon$ . Тогда  $\epsilon \cdot dn(\epsilon)$  — суммарная энергия этих  $dn$  электронов. Чтобы подсчитать энергию всех электронов, нужно проинтегрировать  $\epsilon \cdot dn(\epsilon)$  от 0 до  $\mu$ . Тогда

$$\bar{\epsilon} = \frac{1}{n} \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{\hbar^3} \int_0^\mu \epsilon^{3/2} d\epsilon = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{3}{8\pi} n \right)^{3/2} = \frac{3}{5} \mu. \quad (16)$$

Таким образом, квантовая теория дает среднюю энергию электрона в металле при абсолютном нуле  $\bar{\epsilon} = \frac{3}{5} \mu$ , тогда как классическая статистика в этом случае дала бы  $\bar{\epsilon} = 0$ . Более точный расчет для температур  $T > 0$  дает

$$\bar{e} = \frac{3}{5} \mu_0 \left[ 1 - \frac{5\pi^2}{12} \left( \frac{\kappa T}{\mu_0} \right)^2 \right]. \quad (17)$$

Так, как  $kT \ll \mu_0$ ,  $\bar{e} \approx \frac{3}{5} \mu_0$  и при  $T > 0$ . Физически важным является тот факт, что средняя энергия электрона в металле практически не зависит от температуры, а следовательно,  $C = \frac{d\bar{e}}{dT} \approx 0$ , т. е. электроны не вносят почти никакого вклада в теплоемкость металлов, поэтому теплоемкость металлов практически не отличается от теплоемкости диэлектриков.

### Контрольные вопросы

В чем заключается классическая электронная теория металлов?

В чем состоит квантовая теория металлов («модель свободных электронов»)?

Что такое плотность состояний?

Какой объем импульсного пространства приходится в квантовой механике на одно квантовое состояние?

В чем заключается соотношение неопределеностей Гейзенберга?

Какой вид имеет распределение электропроводности по энергиям в металле?

## 3. ФОТОННЫЙ ГАЗ КАК ПРИМЕР КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКИ БОЗЕ-ЭЙНШТЕЙНА

### 3.1. Формула Планка

В качестве примера макроскопической системы, подчиняющейся квантовой статистике Бозе-Эйнштейна, рассмотрим равновесное тепловое излучение, находящееся в полости объемом  $V$  при температуре  $T$ . Спектральный состав этого излучения сложен. В нем имеются составляющие всех частот от 0 до  $\infty$ . Основная задача при изучении такой системы состоит в том, чтобы определить, как энергия этого излучения распределена по различным частотам или дли нам волн. Для того чтобы применить к решению этой задачи статистику Бозе-Эйнштейна, будем рассматривать электромагнитное излучение в полости как газ невзаимодействующих фотонов, имеющих энергию  $\epsilon = h\nu$  и импульс  $p = \frac{h\nu}{c}$ , где  $h$  — постоянная Планка,  $\nu$  — частота,  $c$  — скорость света в вакууме.

Обозначим через  $dE(\nu, T)$  энергию излучения, приходящуюся на диапазон частот от  $\nu$  до  $\nu + d\nu$ . Эта энергия зависит как от температуры полости, так и от частоты  $\nu$ , вблизи которой выбран интервал частот  $d\nu$ . Величина  $dE(\nu, T)$  пропорциональна выбранному интервалу частот  $d\nu$ :

$$dE(\nu, T) = f(\nu, T)d\nu, \quad (1)$$

Замечание: в формуле 17 должен быть +, а не -!

где  $f(v, T)$  — некоторая функция, зависящая от частоты и температуры. Эта величина называется функцией распределения энергии излучения по частоте. Разрешая (1) относительно  $f(v, T)$ , получим

$$f(v, T) = \frac{dE(v, T)}{dv}, \quad (2)$$

Из (2) видно, что функция распределения численно равна энергии излучения, приходящейся на единичный интервал частот, взятый около некоторой частоты  $v$ . Эту функцию иногда называют спектральной плотностью излучения.

Для того чтобы вычислить  $f(v, T)$ , следует знать число квантовых состояний, приходящихся на единичный интервал частот, среднее число фотонов  $\bar{n}(\varepsilon)$  в каждом квантовом состоянии и энергию фотона:

$$f(v, T) = g(v) \cdot \bar{n}(\varepsilon) \cdot h v, \quad (3)$$

где  $g(v)$  — плотность состояний, т. е. число квантовых состояний, приходящихся на единичный интервал частот. Число состояний, приходящихся на интервал импульса  $dp$  для не взаимодействующих частиц с импульсом  $p$ , было вычислено в разд. 2. Оно равно

$$\frac{4\pi p^2 dp}{h^3} V. \quad (4)$$

Учитывая, что в каждом состоянии с импульсом  $p$  фотон может иметь два различных направления поляризации, выражение (4) должно быть удвоено. Подставляя в (4) импульс фотона  $p = \frac{h v}{c}$ , получим

$$g(v) = \frac{8\pi v^2}{c^3} V. \quad (5)$$

Среднее число фотонов в одном квантовом состоянии дается распределением Бозе—Эйнштейна:

$$\bar{n}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} - 1}. \quad (6)$$

Учитывая, что для фотонов  $\mu = 0$ , и подставляя в (6) энергию фотона  $\varepsilon = h v$ , получим

$$\bar{n}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{hv}{kT}} - 1}. \quad (7)$$

Подставляя в (3) формулы (5) и (7), получим функцию распределения энергии излучения по частоте

$$f(v, T) = \frac{8\pi h v^3}{c^3} \cdot \frac{1}{e^{\frac{hv}{kT}} - 1}$$

(1)
(8)

Это и есть известная формула Планка для равновесного теплового излучения (для простоты положено  $V=1$ ).

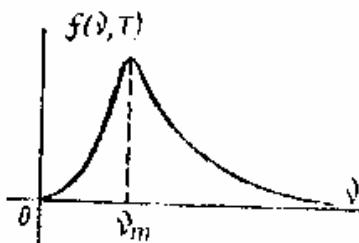


Рис. 11

График зависимости этой функции от частоты приведен на рис. 11.

### 3.2. Законы излучения абсолютно черного тела

Получим известные из раздела «Квантовая оптика» общего курса физики законы излучения для абсолютно черного тела. Напоминаем, что если в замкнутой полости проделать небольшое отверстие и направить через это отверстие в полость электромагнитное излучение, то это излучение практически полностью будет поглощено полостью. Отсюда следует, что такая полость является моделью абсолютно черного тела. С другой стороны, если такую систему поддерживать при некоторой температуре  $T$  и рассматривать электромагнитное излучение, исходящее через отверстие из полости, то это излучение можно рассматривать как излучение абсолютно черного тела. Формула Планка (8) дает распределение энергии по частотам при излучении абсолютно черного тела.

Определим внутреннюю энергию фотонного газа  $V$ , приходящуюся на единицу объема полости,

$$U = \int_0^{\infty} f(v, T) d\nu. \quad (9)$$

Подставляя (8) в (9) и вынося постоянные за знак интеграла, получим

$$U = \frac{8\pi h}{c^3} \int_0^{\infty} \frac{v^3}{e^{\frac{hv}{kT}} - 1} d\nu. \quad (10)$$

Для вычисления интеграла, стоящего в выражении (10), произведем замену переменных, введя новую переменную

$$z = \frac{hv}{kT}.$$

$$v = \frac{kT}{h} z, \quad (11)$$

$$d\nu = \frac{kT}{h} dz. \quad (12)$$

Подставляя (11) и (12) в (10), получим

$$V = \frac{8\pi h}{c^3} \left( \frac{\kappa T}{h} \right)^3 \cdot \frac{\kappa T}{h} \int_0^\infty \frac{z^3}{e^z - 1} dz = \frac{8\pi k^4 T^4}{c^3 h^3} \int_0^\infty \frac{z^3}{e^z - 1} dz. \quad (13)$$

Интеграл, стоящий в (13), является табличным и равен  $\frac{\pi^4}{15}$ .

Подставляя его значение в (13), получим

$$U = \frac{8\pi^5 k^4}{15 c^3 h^3} T^4. \quad (14)$$

Обозначая  $\sigma' = \frac{8\pi^5 k^4}{15 c^3 h^3}$ , окончательно получим

$$U = \sigma' T^4. \quad (15)$$

Обозначим через  $R$  энергию, излучаемую абсолютно черным телом с единицы поверхности в единицу времени, т. е. плотность потока энергии излучения. Эту величину в теории теплового излучения называют энергетической светимостью. Из раздела «Электромагнитные волны» общего курса физики известно, что плотность потока энергии равна

$$R = 1/4 c U \quad (15)'$$

(множитель 1/4 появляется вследствие того, что не все фотоны в полости движутся по направлению к отверстию).

Подставляя (15) в (15)', получим

$$R = \frac{1}{4} c \sigma' T^4 = \sigma T^4, \text{ где } \sigma = \frac{1}{4} \frac{8\pi^5 k^4}{15 c^3 h^3} = 5,7 \cdot 10^{-8} \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \text{К}^4}; \quad R = \sigma T^4.$$

Это и есть известный закон Стефана—Больцмана.

Получим теперь закон Вина, определяющий длину волны  $\lambda_{\max}$ , на которую приходится максимум излучения. Для этого перепишем формулу Планка через  $\lambda$ , воспользовавшись соотношением

$$\lambda = \frac{c}{\nu}; \quad f(\nu, T) = f(\nu, T) \Big|_{\nu = \frac{c}{\lambda}} = \frac{c}{\lambda} \cdot \left| \frac{d\nu}{d\lambda} \right|. \quad (16)$$

Учитывая это, получим после подстановки (16) в (8)

$$\textcircled{2} \quad \boxed{f(\lambda, T) = \frac{8\pi h c}{\lambda^3} \cdot \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k T}} - 1}}. \quad (17)$$

Для нахождения  $\lambda_m$  необходимо исследовать  $f(\lambda, T)$  на максимум, т. е. взять производную по  $\lambda$  и приравнять ее 0:

$$\frac{d f(\lambda, T)}{d\lambda} = 8\pi h c \left\{ -\frac{5}{\lambda^4} \cdot \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda k T}} - 1} - \frac{hc(e^{\frac{hc}{\lambda k T}} - 1)}{\lambda^5 k T (e^{\frac{hc}{\lambda k T}} - 1)^2} \right\} = 0. \quad (18)$$

Введем новую переменную  $x = \frac{hc}{\lambda k T}$ , тогда из (18) получаем трансцендентное уравнение

$$x e^x = 5e^x - 5, \quad (19)$$

решение которого дает  $x = 4,9650$ . Отсюда получаем

$$\frac{hc}{kT\lambda} = 4,9650. \quad (20)$$

Подставляя в (20) численные значения  $h$ ,  $c$  и  $k$ , получим  $\lambda_{\max}$  в м

$$\lambda_{\max} = \frac{2,9 \cdot 10^{-3}}{T}. \quad (21)$$

Это и есть известный закон Вина. Из (21) следует, что длина волны  $\lambda_{\max}$ , на которую приходится максимум излучения, обратно пропорциональна температуре (рис. 12).

Зная внутреннюю энергию  $U$ , можно получить некоторые другие характеристики фотонного газа. Так, например, теплоемкость  $C_V$  фотонного газа при постоянном объеме равна

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \varepsilon' V T^3. \quad (22)$$

Полное число частиц фотонного газа может быть найдено из условия

$$N = \int_0^{\infty} \bar{n}(\varepsilon) g(\nu) d\nu. \quad (23)$$

Подставляя  $g(\nu)$  и  $\bar{n}(\varepsilon)$  в (23), получим

$$N = \frac{8\pi V}{c^3} \int_0^{\infty} \frac{\nu^2 d\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}. \quad (24)$$

Если число фотонов  $N$  остается постоянным, то, интегрируя (24), можно получить следующую связь между объемом и температурой для фотонного газа:

$$V T^3 = \text{const.} \quad (25)$$

#### Контрольные вопросы

Что такое функция распределения энергии излучения по частоте?

В чем состоит закон Стефана—Больцмана?

В чем состоит закон Вина?

### 4. ИДЕАЛЬНЫЙ ГАЗ МОЛЕКУЛ КАК ПРИМЕР КЛАССИЧЕСКОЙ СТАТИСТИКИ МАКСВЕЛЛА—БОЛЬЦМАНА

#### 4.1. Распределение молекул газа по энергиям

В качестве примера макроскопической системы, подчиняющейся классической статистике Максвелла—Больцмана, рас-

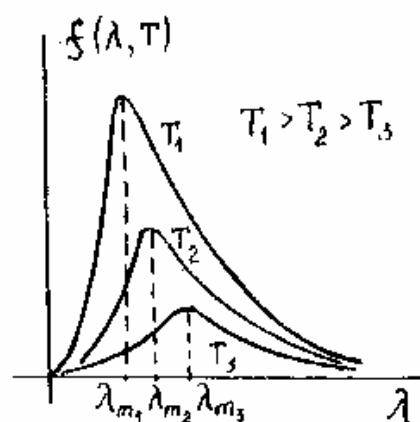


Рис. 12

смотрим идеальный газ молекул. Идеальным называется такой газ, для которого выполняются следующие условия: 1. взаимодействием между молекулами можно пренебречь, если это не непосредственное их столкновение; 2. собственным объемом молекул можно пренебречь по сравнению с объемом сосуда, в котором находится газ; 3. все столкновения молекул газа друг с другом и со стенками сосуда можно считать абсолютно упругими. Из экспериментов известно, что при достаточном разрежении все газы ведут себя одинаковым образом. Можно сказать поэтому, что идеальный газ представляет собой идеализированную макроскопическую систему, обладающую свойствами предельно разреженных газов.

Убедимся в том, что к такому газу применима классическая статистика. В подразд. 3.5 упоминалось о том, что критерием применимости классической статистики является выполнение следующего условия: длина волны де Броиля частицы должна быть намного меньше среднего расстояния между частицами:

$$\left(\frac{V}{N}\right)^{1/3} \gg \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}} \cdot \frac{n^{1/3}h}{\sqrt{2\pi mkT}} \ll 1, \text{ где } n = \frac{N}{V}. \quad (1)$$

Подставим в формулу (1) числовые значения для азота, находящегося при нормальных условиях. В этом случае  $n = 10^{25} \text{ м}^{-3}$ ,  $m = 5 \cdot 10^{-26} \text{ кГ}$ ,  $T = 273 \text{ К}$ ,  $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К}$ . Подставляя эти цифры в (1), получим

$$\frac{n^{1/3}h}{\sqrt{2\pi mkT}} = \frac{(10^{25})^{1/3} \cdot 6,6 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 3,14 \cdot 10^{-26} \cdot 1,38 \cdot 10^{-23} \cdot 273}} =$$

Таким образом, обычные молекулярные газы при нормальных условиях являются невырожденными и к ним может быть применена классическая статистика.

Перейдем теперь к изучению распределения молекул по энергиям.

Обозначим через  $dn(\epsilon)$  среднее число молекул, энергия которых лежит в интервале от  $\epsilon + d\epsilon$ . Для определения этой величины необходимо знать число квантовых состояний, приходящихся на интервал энергий от  $\epsilon$  до  $\epsilon + d\epsilon$ , и среднее число молекул в данном квантовом состоянии. Число квантовых состояний в интервале  $d\epsilon$  может быть записано как  $g(\epsilon)d\epsilon$ , где  $g(\epsilon)$  — плотность состояний, вычисленная в разд. 2:

$$g(\epsilon) = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{\epsilon}, \quad (2)$$

где  $V$  — объем системы. Среднее число частиц в данном состоянии определяется статистикой Максвелла—Больцмана:

$$\bar{n}(\epsilon) = e^{\frac{\mu - \epsilon}{kT}}. \quad (3)$$

Отсюда

$$dn(\epsilon) = \bar{n}(\epsilon)g(\epsilon)d\epsilon. \quad (4)$$

Подставляя (2) и (3) в (4), получим

$$dn(\epsilon) = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{\epsilon} e^{\frac{\mu-\epsilon}{kT}} d\epsilon.$$

Для определения  $\mu$  воспользуемся условием

$$N = \int_0^{\infty} dn(\epsilon), \quad (5)$$

где  $N$  — полное число молекул газа. Подставляя (4) в (5), получим:

$$N = \frac{2\pi V}{h^3} (2m)^{3/2} e^{\frac{\mu}{kT}} \int_0^{\infty} \sqrt{\epsilon} e^{-\frac{\epsilon}{kT}} d\epsilon. \quad (6)$$

Интеграл, стоящий в (6), является табличным:

$$\int_0^{\infty} \sqrt{\epsilon} e^{-\frac{\epsilon}{kT}} d\epsilon = \frac{\sqrt{\pi}}{2} (\kappa T)^{3/2}. \quad (7)$$

Подставляя (7) в (6), получим

$$N = \left( \frac{2\pi m \kappa T}{h^3} \right)^{3/2} \cancel{N} e^{\frac{\mu}{kT}} \quad (8)$$

Обозначая  $n = \frac{N}{V}$  и разрешая (8) относительно  $\mu$ , получим

$$\underline{n = \left( \frac{2\pi m \kappa T}{h^3} \right)^{3/2} e^{\frac{\mu}{kT}}}, \quad \mu = \kappa T \ln \left[ n \left( \frac{h^3}{2\pi m \kappa T} \right)^{3/2} \right]. \quad (9)$$

Подставляя (9) в (4), получим

$$dn(\epsilon) = \frac{2N}{\sqrt{\pi(\kappa T)^3}} e^{-\frac{\epsilon}{kT}} \sqrt{\epsilon} d\epsilon. \quad (10)$$

Окончательно имеем

$$dn(\epsilon) = \frac{2N}{\sqrt{\pi(\kappa T)^3}} e^{-\frac{\epsilon}{kT}} \sqrt{\epsilon} d\epsilon. \quad (11)$$

Величина

$$f(\epsilon) = \frac{dn(\epsilon)}{d\epsilon \cdot N} \quad (12)$$

называется функцией распределения молекул газа по энергиям. Из (12) видно, что  $f(\epsilon)$  определяет относительное число молекул газа, энергии которых лежат в единичном энергетическом интервале, взятом около некоторой энергии  $\epsilon$ . Сравнивая (12) и (11), получаем

$$f(\epsilon) = \frac{2}{\sqrt{\pi(\kappa T)^3}} e^{-\frac{\epsilon}{kT}} \sqrt{\epsilon}. \quad (13)$$

График этой функции приведен на рис. 13. Нетрудно видеть, что площадь под кривой на рис. 13 равна 1. Действительно,

$$S = \int_0^{\infty} f(\varepsilon) d\varepsilon = \int_0^{\infty} \frac{dn(\varepsilon)}{N d\varepsilon} d\varepsilon = \int_0^{\infty} \frac{dn(\varepsilon)}{N} = \frac{1}{N} \int_0^{\infty} dn(\varepsilon) = \frac{N}{N} = 1.$$

Условие

$$\int_0^{\infty} f(\varepsilon) d\varepsilon = 1 \quad (14)$$

носит название **условия нормировки**.

Как уже указывалось в разд. 1, условием перехода к классической статистике является выполнение следующего неравенства:

$$e^{\frac{\mu}{kT}} \gg 1. \quad (15)$$

Поскольку это должно быть выполнено для частиц любых энергий, начиная с  $\varepsilon = 0$ ,

$$e^{-\frac{\mu}{kT}} \gg 1. \quad (16)$$

Из (8) имеем

$$e^{\frac{\mu}{kT}} = n \left( \frac{\hbar^3}{2\pi mkT} \right)^{3/2}. \quad (17)$$

Подставляя (17) в (16), получим

$$e^{\frac{\mu}{kT}} \ll 1, n \left( \frac{\hbar^3}{2\pi mkT} \right)^{3/2} \ll 1 \text{ или } \frac{n^{1/2} \hbar}{\sqrt{2\pi mkT}} \ll 1.$$

Таким образом, условие (15) доказано.

## 4.2. Распределение молекул по скоростям

Зная распределение молекул по энергиям, легко получить распределение молекул по скоростям. Для этого в выражении (10) следует выразить энергию через скорость, а именно:

$$\varepsilon = \frac{mv^2}{2}, \quad (18) \quad v = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m}}; \quad d\varepsilon = mv^2 dv, \quad (19)$$

$$V\varepsilon = v \sqrt{\frac{m}{2}}. \quad (20)$$

Подставляя (18), (19) и (20) в (10), получим

$$dn(v) = \frac{2N}{\sqrt{\pi(mkT)^3}} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} v \sqrt{\frac{m}{2}} mv^2 dv,$$

$$\text{или} \quad dn(v) = 4\pi \left( \frac{m}{4\pi mkT} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} v^2 dv. \quad (21)$$

Аналогично тому, как это было сделано в подразд. 4.1, введем функцию распределения молекул по скоростям

$$f(v) = \frac{dn(v)}{Ndv}. \quad (22)$$

Из (22) видно, что  $f(v)$  определяет относительное число молекул, скорости которых лежат в единичном интервале, взятом около некоторой скорости  $v$ . Сравнивая (22) и (21), получим:

$$f(v) = 4\pi \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} v^2. \quad (23)$$

График этой функции для различных температур изображен на рис. 1.4. На этом рисунке через  $v_b$  обозначена наивероятнейшая скорость, т. е. скорость, при которой функция распределения  $f(v)$  достигает максимума.

Рассуждая аналогично тому, как это было сделано в подразд. 4.1, можно показать, что  $f(v)$  удовлетворяет условию нормировки

$$\int_0^{\infty} f(v) dv = 1. \quad (24)$$

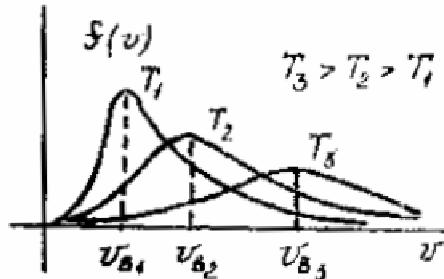


Рис. 1.4

#### 4.3. Характерные скорости молекул газа

Зная функцию распределения молекул идеального газа по скоростям, можно определить характерные скорости движения молекул газа. К ним относятся: наивероятнейшая скорость, среднеарифметическая скорость, среднеквадратичная скорость.

##### Наивероятнейшая скорость $v_b$

Наивероятнейшей скоростью называется такая скорость, при которой функция распределения молекул по скоростям имеет максимум. Чтобы найти ее значение, нужно исследовать  $f(v)$  на  $\max$ , т. е. проанализировать функцию  $f(v)$  по  $v$  и приравнять производную нулю. Согласно (23) имеем

$$f(v) = 4\pi \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} \cdot v^2.$$

Отсюда

$$\frac{df(v)}{dv} = 4\pi \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \left( -\frac{m}{2kT} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} \cdot v^2 \cdot 2v + e^{-\frac{mv^2}{2kT}} \cdot 2v \right) = 0,$$

$$v_b = \sqrt{\frac{2kT}{m}}. \quad (25)$$

##### Среднеарифметическая скорость $\bar{v}$

Для того чтобы понять, как вычисляется скорость  $\bar{v}$ , рассмотрим сначала идеализированный случай, когда все моле-

кулы газа разбиты на группы с определенными скоростями. Пусть, например,  $n_1$  молекул имеют скорость  $v_1$ ,  $n_2$  молекул — скорость  $v_2$ ,  $n_3$  — скорость  $v_3$  и т. д. Согласно обычному определению среднеарифметической скорости имеем

$$\bar{v} = \frac{n_1 v_1 + n_2 v_2 + \dots + n_k v_k}{n_1 + n_2 + \dots + n_k} = \frac{n_1 v_1 + n_2 v_2 + \dots + n_k v_k}{N}, \quad (26)$$

где  $k$  — число групп молекул, а  $N$  — полное число молекул газа.

Из (26) имеем

$$\bar{v} = \sum_{i=1}^N v_i \frac{n_i}{N} = \sum_{i=1}^N v_i f_i, \quad (27)$$

где  $f_i = \frac{n_i}{N}$  — относительное число молекул газа, имеющих скорость  $v_i$ .

Отличие реального случая от идеализированного заключается в том, что в реальном случае молекулы газа распределены по скоростям непрерывным образом, поэтому при вычислении  $\bar{v}$  в (27) нужно от суммирования перейти к интегрированию, а относительное число молекул газа, имеющих скорость вблизи  $v$ , дается функцией распределения молекул по скоростям  $f(v)dv$ . Таким образом, имеем

$$\bar{v} = \int_0^{\infty} v f(v) dv. \quad (28)$$

Подставляя (23) в (28), получим

$$\bar{v} = 4\pi \left( \frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} v^3 e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv. \quad (29)$$

Интеграл, стоящий в выражении (29), относится к интегралам Пуассона вида

$$\int_0^{\infty} e^{-ax^2} x^{2n+1} dx.$$

Этот интеграл равен  $\frac{n!}{2^{n+1}}$ . В нашем случае  $n=1$ ,  $a = \frac{m}{2kT}$ . Отсюда

$$\int_0^{\infty} v^3 e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv = \frac{1}{2} \left( \frac{m}{2kT} \right)^{3/2}. \quad (30)$$

Подставляя (30) в (29), получим

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}. \quad (31)$$

### Среднеквадратичная скорость $v_{\text{ср}}$

Среднеквадратичная скорость определяется как квадратный корень из среднего значения квадрата скорости молекул:

$$v_{\text{св}} = \sqrt{\bar{v}^2} \quad (32)$$

где  $\bar{v}^2$  — среднее значение квадрата скорости молекул. Рассуждая аналогично тому, как это было сделано в предыдущем пункте при вычислении скорости  $\bar{v}$ , получим

$$\bar{v}^2 = \int_0^\infty v^2 f(v) dv. \quad (33)$$

После подстановки (23) в (33) имеем

$$\bar{v}^2 = 4\pi \left( \frac{m}{2\kappa T} \right)^{3/2} \int_0^\infty v^4 e^{-\frac{mv^2}{2\kappa T}} dv. \quad (34)$$

Интеграл, стоящий в (34), относится к табличным интегралам Пуассона:

$$\int_0^\infty e^{-ax^2} x^{2n} dx = \frac{(2n-1)!!}{2^{n+1}} \sqrt{\frac{\pi}{a^{2n+1}}},$$

В нашем случае  $a = \frac{m}{2\kappa T}$ ,  $n = 2$ . Отсюда

$$\int_0^\infty v^4 e^{-\frac{mv^2}{2\kappa T}} dv = \frac{3}{8} \sqrt{\frac{\pi}{\left(\frac{m}{2\kappa T}\right)^5}}, \quad (35)$$

$$\bar{v}^2 = \frac{3\kappa T}{m}. \quad (36)$$

Подставляя (36) в (32), получим

$$v_{\text{св}} = \sqrt{\frac{3\kappa T}{m}}. \quad (37)$$

В дальнейшем при изучении столкновений молекул друг с другом нам понадобится еще одна средняя скорость. Это средняя относительная скорость молекул  $v_{\text{отн}}$ . Действительно, рассмотрим две молекулы, движущиеся в идеальном газе со скоростями  $v_1$  и  $v_2$ . Очевидно, что для столкновений этих молекул друг с другом величины и направления этих скоростей в пространстве (например, по отношению к стенкам сосуда) не играют роли. Важно лишь, как происходит движение одной молекулы по отношению к другой. Таким образом, при решении задачи о столкновениях необходимо рассмотреть относительное движение молекул. Это относительное движение и описывается средней относительной скоростью  $v_{\text{отн}}$ . Мы не будем здесь приводить подробный расчет для  $v_{\text{отн}}$  а укажем лишь результат. Расчет показывает, что

$$\bar{v}_{\text{отн}} = \sqrt{2} \bar{v}. \quad (38)$$

#### 4.4. Средняя энергия, приходящаяся на одну степень свободы молекулы

Зная распределение молекул газа по энергиям, можно определить среднюю кинетическую энергию поступательного движения молекул. Рассуждая аналогично тому, как это было сделано в подразд. 4.3 при расчете средней скорости  $\bar{v}$ , получим

$$\bar{e}_{\text{пост}} = \int_0^{\infty} \epsilon f(\epsilon) d\epsilon. \quad (39)$$

Подставляя (13) в (39) и вынося постоянные за знак интеграла, получим

$$\bar{e}_{\text{пост}} = \frac{2}{\sqrt{\pi(\kappa T)^3}} \int_0^{\infty} \epsilon^{3/2} e^{-\frac{\epsilon}{\kappa T}} d\epsilon. \quad (40)$$

Введем новую переменную  $x = \frac{\epsilon}{\kappa T}$ . Тогда

$$\epsilon = x\kappa T, \quad d\epsilon = \kappa T dx, \quad \epsilon^{3/2} = (\kappa T)^{3/2} x^{3/2}. \quad (41)$$

Подставляя (41) в (40), получим

$$\bar{e}_{\text{пост}} = \frac{2}{\sqrt{\pi(\kappa T)^3}} (\kappa T)^{3/2} \kappa T \int_0^{\infty} x^{3/2} e^{-x} dx. \quad (42)$$

Интеграл, стоящий в (41), является табличным:

$$\int_0^{\infty} x^{3/2} e^{-x} dx = \frac{3}{4} \sqrt{\pi}. \quad (43)$$

Подставляя (43) в (41), получим

$$\bar{e}_{\text{пост}} = \frac{3}{2} \kappa T. \quad (44)$$

Как видно из (43), средняя кинетическая энергия поступательного движения молекул идеального газа не зависит от его природы и определяется только абсолютной температурой  $T$ . Используя (43), можно придать температуре  $T$  физический смысл, т. е. рассматривать ее как меру средней кинетической энергии молекул.

Под числом степеней свободы молекулы понимается число независимых величин, необходимых для задания положения молекулы в пространстве. Если молекула движется поступательно, то она имеет три степени свободы (ее движение может быть разложено на движение в трех взаимно перпендикулярных направлениях). В силу равноправия всех направлений в пространстве средняя энергия в каждом направлении должна быть одинакова. Это означает, что на каждую степень свободы в среднем должна приходиться энергия  $\frac{\bar{e}_{\text{пост}}}{3}$ . Используя (44), получим, что на каждую степень свободы молекулы в среднем приходится энергия  $1/2 \kappa T$ .

В общем случае молекула может иметь не только поступательные степени свободы, но и другие: вращательные, колебательные и т. д. Зная полное число степеней свободы молекулы  $i$ , можно записать среднюю кинетическую энергию молекулы в следующем виде:

$$\bar{\epsilon} = \frac{i}{2} \kappa T. \quad (44')$$

Одной из важнейших характеристик газа является его внутренняя энергия  $U$ . Под внутренней энергией газа понимается сумма энергий всех молекул, входящих в состав данного газа. Для идеального газа невзаимодействующих молекул, энергия которых равна  $\bar{\epsilon}$ , внутренняя энергия равна

$$U = N \bar{\epsilon}, \quad (44'')$$

где  $N$  — полное число молекул газа. Учитывая, что

$$N = \frac{M}{\mu} N_a \quad (44''')$$

(где  $M$  — масса газа,  $\mu$  — масса киломоля,  $N_a$  — число Авогадро), и подставляя (44''') в (44''), получим

$$U = \frac{M}{\mu} N_a \cdot \frac{i}{2} \kappa T = \frac{i}{2} \frac{M}{\mu} R T.$$

Здесь использовано соотношение  $k N_a = R$ , где  $R$  — универсальная газовая постоянная.

#### 4.5. Основное уравнение кинетической теории газов

Рассмотрим газ, состоящий из  $N$  молекул, находящихся в некотором сосуде с объемом  $V$ , и определим давление, оказываемое этим газом на одну из стенок сосуда площадью  $S$  (рис. 15). Это давление вызвано тем, что молекулы, хаотически двигаясь внутри сосуда, постоянно ударяются о его стенки, передавая им некоторый импульс. Импульс, переданный стенке за 1 с, численно равен силе, действующей на стенку, а сила, отнесенная к единице площади стенки, и есть давление.

Предположим, что столкновения молекул со стенками являются абсолютно упругими и что все молекулы движутся в газе с одинаковыми скоростями  $v$ . Каждая молекула, ударяясь нормально о стенку, передает ей импульс  $2mv$ , где  $m$  — масса молекулы. Число молекул, ударяющихся о стенку  $S$  за

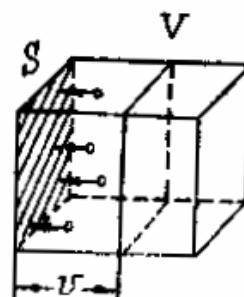


Рис. 15

в газе равноправны, можно считать, что в среднем только 1/3 всех молекул движется в направлении, перпендикулярном стенке, из которых половина, т. е. 1/6, — к стенке, а другая половина — от нее. На это указывает, в частности, вид функции распределения. Действительно, функция распределения  $f(v)$  есть на самом деле  $f(v^2)$ . Это означает, что изменение знака у скорости с  $v$  на  $-v$  не изменяет функцию распределения, т. е.

$$f(v) = f(-v). \quad (45)$$

Поскольку функция распределения определяет относительное число частиц, имеющих скорость вблизи  $v$ , то (45) означает, что среднее число частиц, движущихся вдоль некоторого направления и против него, одинаково.

Из всех молекул, движущихся к стенке, за 1 с о стенку успеют ударить только те, которые находятся от стенки на расстоянии, не большем, чем  $v$ , т. е. находятся в объеме параллелепипеда с площадью основания  $S$  и длиной  $v$  (рис. 15). Таких молекул будет  $\frac{1}{6}nvS$ , где  $n$  — концентрация молекул. Полный импульс, переданный этими молекулами стенке за 1 с, равен

$$\Delta p = \frac{1}{6} nvS \cdot 2mv = \frac{1}{3} nSmv^2. \quad (46)$$

Это выражение является неточным, так как при выводе его предполагалось, что все молекулы движутся с одинаковой скоростью  $v$ . Для того чтобы исправить (46), следует усреднить это выражение по всем возможным скоростям молекул. Будем изображать усреднение чертой сверху:

$$\overline{\Delta p} = \overline{\frac{1}{3} nSmv^2} = \frac{1}{3} nSm\overline{v^2}, \quad (47)$$

где  $\overline{\Delta p}$  — средний импульс, переданный стенке за 1 с;  $\overline{v^2}$  — среднее значение квадрата скорости молекулы. Согласно сказанному выше  $\overline{\Delta p}$  численно равен силе  $\overline{f}$ , действующей на стенку, а давление

$$P = \frac{\overline{f}}{S}. \quad (48)$$

Подставляя (48) в (47), получим

$$P = \frac{1}{3} nSm\overline{v^2}. \quad (49)$$

Умножая и деля (49) на 2 и обозначая  $\overline{\epsilon}_{\text{пост}} = \frac{\overline{mv^2}}{2}$ , получим

$$P = \frac{2}{3} n \overline{\epsilon}_{\text{пост}}. \quad (50)$$

Это есть основное уравнение кинетической теории газов. Оно связывает давление — макроскопическую величину, относящуюся ко всей системе в целом, с концентрацией и средней кинети-

ческой энергией поступательного движения молекул газа, являющимися микроскопическими величинами.

• Ранее на основе распределения молекул газа по энергиям было показано, что

$$\bar{\epsilon}_{\text{пост}} = \frac{3}{2} \kappa T. \quad (51)$$

Подставим (51) в (50) и умножим (50) слева и справа на объем  $V$ :

$$PV = \frac{2}{3} Vn \cdot \frac{3}{2} \kappa T = Vn\kappa T = N\kappa T. \quad (52)$$

Поскольку

$$N = N_a \cdot \frac{M}{\mu}, \quad (53)$$

(где  $M$  — масса газа,  $\mu$  — масса киломоля,  $N_a$  — число Авогадро), то подставляя (53) в (52) и заменяя  $N_a \cdot k = R$ , получим уравнение состояния идеального газа

$$PV = \frac{M}{\mu} RT, \quad (54)$$

где  $R$  — универсальная газовая постоянная.

Основное уравнение кинетической теории газов иногда записывают в несколько ином виде.

Учитывая, что  $\bar{\epsilon}_{\text{пост}} = \frac{3}{2} \kappa T$ , то подставляя  $\bar{\epsilon}_{\text{пост}}$  в (50), получим  $P = n\kappa T$ .

#### 4.6. Средняя длина свободного пробега молекул

Одной из важнейших характеристик движения молекул в газе является их средняя длина свободного пробега  $\bar{\lambda}$ . Под этой величиной понимается средний путь, проходимый молекулой между двумя последовательными столкновениями. Если обозначить через  $v$  среднюю скорость молекул, а через  $\bar{z}$  среднее число столкновений за 1 с, то

$$\bar{\lambda} = \frac{\bar{v}}{\bar{z}}. \quad (55)$$

Таким образом, задача сводится к определению  $\bar{z}$ .

Для расчета числа столкновений, которые испытывают молекулы за 1 с, представим молекулы идеального газа в виде ~~одных~~ сфер диаметра  $d$ . Две молекулы, следовательно, не ~~будут~~ приблизиться друг к другу на расстояние, меньшее  $d$ , если расстояние между молекулами отсчитывать от центров ~~молекул~~. Будем следить за одной молекулой, считая остальные ~~молекулами~~ движущимися. По отношению к ним данная молекула будет двигаться с относительной скоростью  $\bar{v}_{\text{отн}} = \sqrt{2} \bar{v}$ . За 1 с дан-

ная молекула пройдет путь, равный  $\sqrt{2}v$ , и столкнется со всеми молекулами, центры которых лежат внутри цилиндра радиуса  $R=d$  и длины  $\sqrt{2}v$  (рис. 16).

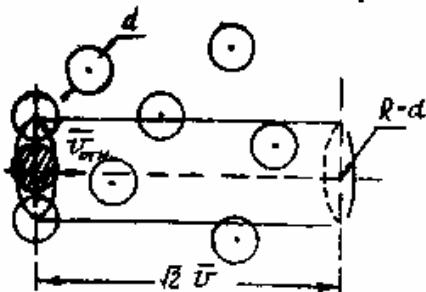


Рис. 16

Число таких молекул равно  $n\pi d^2 \sqrt{2}v$ , где  $n$  — концентрация молекул газа, а  $\pi d^2 \sqrt{2}v$  — объем цилиндра. Таким образом, число столкновений за 1 с равно

$$\bar{z} = \sqrt{2}v n \pi d^2. \quad (56)$$

Подставляя (56) в (55), получим

$$\bar{\lambda} = \frac{1}{\sqrt{2}n\pi d^2}. \quad (57)$$

Величина

$$\sigma_{\text{эфф}} = \pi d^2. \quad (58)$$

носит название эффективного сечения молекулы. Подставляя (58) в (57), получим

$$\bar{\lambda} = \frac{1}{\sqrt{2}n\sigma_{\text{эфф}}}. \quad (59)$$

В действительности, конечно, молекулы не представляют собой твердые сферы. В реальном газе при сближении двух молекул между ними начинают действовать силы отталкивания. В этом случае под  $d$  следует понимать некоторый эффективный диаметр, равный минимальному расстоянию, на которое могут сблизиться две молекулы. Это расстояние зависит от кинетической энергии двух сближающихся молекул, т. е. от температуры газа. Измеряя на опыте  $\bar{\lambda}$ , можно оценить  $\sigma_{\text{эфф}}$  и размеры молекул.

#### 4.7. Явления переноса

До сих пор мы рассматривали газ, находящийся в состоянии равновесия. Такое состояние отличается тем, что все величины, характеризующие газ в этом состоянии, такие, например, как давление, температура и т. д., не зависят от времени и имеют одинаковые значения в различных частях газа. Молекулы такого газа, двигаясь хаотически, с течением времени переходят из одних точек пространства в другие, перенося присущую им массу, энергию и импульс. Однако благодаря тому, что среднее число частиц, движущихся в газе вдоль некоторого направления и против него, одинаково, результирующего переноса массы, энергии и импульса не происходит.

Иная ситуация возникает тогда, когда физические величины, характеризующие состояние газа, имеют отличные значения в различных частях газа. В этом случае газ уже не на-

ходится в состоянии равновесия, и в нем возникают специфические внутренние процессы, стремящиеся перевести газ в равновесное состояние. Эти процессы получили название явлений переноса. К явлениям переноса относятся: диффузия (обусловленная переносом массы), теплопроводность (обусловленная переносом энергии) и внутреннее трение (обусловленное переносом импульса).

### Диффузия

Пусть в некотором газе имеется посторонняя примесь другого газа с концентрацией  $n$ . В общем случае концентрация примеси  $n$  может быть различной в различных объемах газа. Предположим, что  $n = f(x)$ , где  $x$  — некоторое направление, выбранное в газе (рис. 17). Опытным путем было установлено, что в этом случае возникает поток массы газа, стремящийся выровнять концентрацию примеси. Это явление получило название диффузии. Основной закон диффузии имеет следующий вид:

$$\Delta M = -D \frac{dn}{dx}, \quad (60)$$

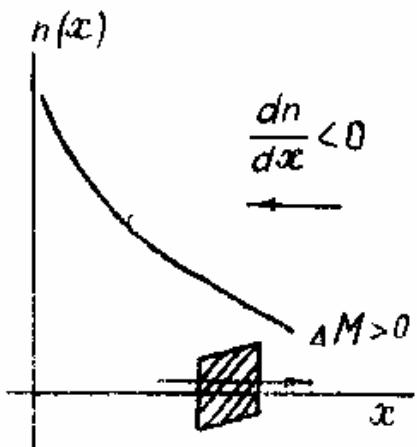


Рис. 17

где  $\Delta M$  — поток массы газа, проходящий за единицу времени через единичную площадку, расположенную перпендикулярно направлению  $x$ ;  $D$  — коэффициент диффузии;  $\frac{dn}{dx}$  — так называемый градиент концентрации молекул, показывающий, как быстро меняется концентрация молекул примеси на единицу длины вдоль направления  $x$ . Знак « $\leftarrow$ » указывает на то, что поток массы  $\Delta M$  направлен в сторону уменьшения концентрации: при  $\frac{dn}{dx} < 0$ ,  $\Delta M > 0$  и наоборот. Окончательно основной закон диффузии можно сформулировать следующим образом: поток массы газа примеси, проходящий за единицу времени через единичную площадку, прямо пропорционален градиенту концентрации примеси.

### Теплопроводность

Пусть в некотором газе температура не является одинаковой в различных точках газа, а меняется вдоль некоторого направления  $x$ . В этом случае опытным путем было установлено, что вдоль направления  $x$  устанавливается поток тепла, стремящийся выровнять температуру:

$$Q = -k \frac{dT}{dx}, \quad (61)$$

где  $Q$  — поток тепла (энергии), т. е. количество тепла, протекающее за единицу времени через единичную площадку, расположенную перпендикулярно направлению  $x$ ;  $\frac{dT}{dx}$  — градиент температуры,  $\kappa$  — коэффициент теплопроводности. Знак « $-$ » указывает на то, что поток тепла идет в сторону убывания температуры ( $Q$  — величина алгебраическая:  $Q > 0$  при  $\frac{dT}{dx} < 0$  и наоборот). Соотношение (61) можно сформулировать следующим образом: количество тепла, протекающее за единицу времени через единичную площадку, расположенную перпендикулярно некоторому направлению, пропорционально градиенту температуры, вдоль этого направления. Это явление получило название теплопроводности.

### Внутреннее трение (вязкость)

Рассмотрим поток газа вдоль некоторого направления  $x$ . Пусть различные слои газа движутся с различными скоростями  $u$ .

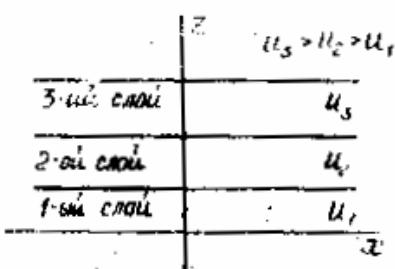


Рис. 18

Обозначим через  $z$  направление, перпендикулярное к слоям (рис. 18). Опытным путем установлено, что если в газе имеются слои, движущиеся с различными скоростями, то между такими слоями возникает сила трения, стремящаяся выровнять скорость слоев. Это явление получило название внутреннего трения, или вязкости.

Сила внутреннего трения определяется следующим соотношением:

$$f = \eta \frac{du}{dz} S, \quad (62)$$

где  $\eta$  — коэффициент внутреннего трения (вязкости);  $S$  — площадь соприкосновения слоев;  $\frac{du}{dz}$  — градиент скорости слоев, взятый в направлении, перпендикулярном к движению слоев. Соотношение (62) можно сформулировать следующим образом: сила внутреннего трения пропорциональна градиенту скорости слоев и площади их соприкосновения.

Соотношения (60) — (62) были получены опытным путем задолго до того, как была создана молекулярно-кинетическая теория газа. Задача этой теории состояла в том, чтобы объяснить эти законы на основе молекулярно-кинетических представлений и получить теоретические соотношения для коэффициентов  $D$ ,  $\kappa$ ,  $\eta$ , которые раньше находились только из опыта. Рассмотрим, как была выполнена эта задача на основе молекулярно-кинетической теории внутреннего трения.

Рассмотрим границу  $S$  между двумя слоями газа, движущимися с различными скоростями: 1-й слой — со скоростью  $u_1$ , 2-й — со скоростью  $u_2$ . Пусть  $u_2 > u_1$ . Молекулы газа в каждом слое участвуют как в тепловом, хаотическом движении со скоростью  $\bar{v}$ , так и в направленном движении со скоростью  $u$ . Обычно  $u \ll \bar{v}$ . Двигаясь хаотически, молекулы 1-го слоя могут попасть во 2-й слой, а молекулы 2-го слоя — в 1-й. Таким образом оба соприкасающихся слоя по мере движения все время обмениваются молекулами. Выше при рассмотрении основного уравнения кинетической теории газов было показано, что число молекул, проходящих за единицу времени через площадку  $S$ , равно  $\Delta N = \frac{1}{6} n \bar{v} S$ . Таким образом, за единицу времени из 1-го слоя во 2-й уйдет  $\Delta N_1 = \frac{1}{6} n \bar{v} S$  молекул, которые унесут импульс  $\Delta k_1 = \frac{1}{6} n \bar{v} S m u_1$ , а из 2-го слоя в 1-й уйдет  $\Delta N_2 = \frac{1}{6} n \bar{v} S$  молекул, которые унесут импульс  $\Delta k_2 = \frac{1}{6} n m u_2 \bar{v} S$ .

Изменение количества движения 1-го слоя равно:

$$\Delta k^{(1)} = \Delta k_2 - \Delta k_1 = \frac{1}{6} n m \bar{v} S (u_2 - u_1).$$

Изменение количества движения второго слоя

$$\Delta k^{(2)} = \Delta k_1 - \Delta k_2 = \frac{1}{6} n m \bar{v} S (u_1 - u_2), \Delta k^{(2)} = -\Delta k^{(1)}.$$

Согласно основным законам механики изменение количества движения слоя за единицу времени численно равно силе, действующей на слой:

$$f_1 = \frac{\Delta k^{(1)}}{\Delta t} = \frac{1}{6} n m (u_2 - u_1) S, f_2 = \frac{\Delta k^{(2)}}{\Delta t} = \frac{1}{6} n m S (u_1 - u_2). \quad (63)$$

Таким образом, между двумя слоями действуют равные по величине и противоположные направленные силы трения, стремящиеся выровнять скорость слоев.

Для вычисления разности  $u_2 - u_1$  заметим, что скорость слоев в действительности изменяется в направлении  $z$  не скачком, а непрерывно. В этом случае вместо скоростей  $u_1$  и  $u_2$  следует брать скорости, которые имели молекулы на расстоянии, большем, чем  $\bar{\lambda}$  от границы раздела  $S$  ( $\bar{\lambda}$  — средняя длина свободного пробега молекулы).

Можно считать, что молекулы, пересекающие границу раздела, имеют такую же скорость на-

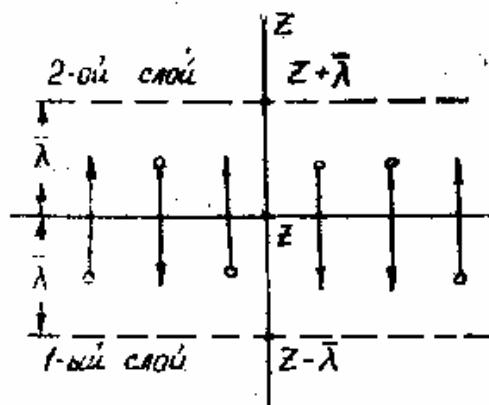


Рис. 19

правленного движения, какую они имели после последнего столкновения перед границей раздела, т. е. на расстоянии, не большем, чем  $\bar{\lambda}$  от границы раздела. Отсюда (рис. 19)  $u_2 = u(z + \bar{\lambda})$ ,  $u_1 = u(z - \bar{\lambda})$ , где  $z$  — координата поверхности раздела. Поскольку  $\bar{\lambda}$  мало, скорости  $u_2$  и  $u_1$  можно представить следующим образом:

$$u_2 = u(z + \bar{\lambda}) = u_z + \frac{du}{dz} \bar{\lambda}, \quad u_1 = u(z - \bar{\lambda}) = u_z - \frac{du}{dz} \bar{\lambda},$$

$$u_2 - u_1 = 2 \frac{du}{dz} \bar{\lambda}. \quad (64)$$

Подставляя (64) в (63), получим

$$f = \frac{1}{3} \bar{n} \bar{v} \bar{m} \left( \frac{du}{dz} \bar{\lambda} \right) S. \quad (65)$$

Сравнивая (65) с (62), получим  $\eta = \frac{1}{3} \bar{n} \bar{v} \bar{m} \bar{\lambda} = \frac{1}{3} \bar{q} \bar{v} \bar{\lambda}$ , где  $\bar{q} = \bar{n} \bar{m}$  — плотность газа.

Аналогичный расчет позволяет таким же образом получить основные законы диффузии и теплопроводности и вычислить коэффициенты  $D$  и  $\chi$ .

#### Контрольные вопросы

Что такое идеальный газ?

Какие характерные скорости движения молекул вы знаете?

Какова средняя энергия, приходящаяся на одну степень свободы молекулы?

Что такое внутренняя энергия газа?

В чем состоит основное уравнение кинетической теории газов?

Что такое средняя длина свободного пробега?

Какие явления переноса вам известны и в чем их физический смысл?



## 5. СТАТИСТИКА ЭЛЕКТРОНОВ И ДЫРОК В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

### 5.1. Введение

Прежде чем приступить к конкретным статистическим расчетам, относящимся к системе электронов и дырок в полупроводниках, напомним основные положения зонной теории полупроводников:

энергетический спектр электрона в полупроводнике представляет собой систему энергетических зон, причем при  $T = 0$  К имеются либо полностью заполненные, либо полностью пустые зоны (рис. 20). Самая верхняя полностью заполненная зона называется валентной зоной, самая нижняя пустая зона называется зоной проводимости. Валентная зона отделена от

зоны проводимости запрещенной зоной, которая в полупроводниках является сравнительно узкой ( $\Delta E \ll 1$  эВ);

при температуре, отличной от 0 К, часть электронов из валентной зоны может перейти в зону проводимости. При этом у верха валентной зоны образуются свободные квантовые состояния, которые получили название «дырки». Дырки можно рассматривать как некоторые квазичастицы, имеющие положительный заряд, равный заряду электрона. При рассмотрении процессов, происходящих в валентной зоне, удобно считать, что в ней имеются только дырки;

если электроны находятся вблизи дна зоны проводимости, а дырки вблизи верха валентной зоны (это обычно имеет место в действительности), то можно считать, что под действием внешнего электрического поля они ведут себя как свободные частицы с некоторыми эффективными массами. Это позволяет применить к ним некоторые результаты, полученные для металлов в модели свободных электронов.

Таким образом, модель полупроводника, рассматриваемая в дальнейшем, выглядит следующим образом: в полупроводнике имеются два типа носителей — электроны и дырки; электроны с эффективной массой  $m_e^*$  находятся в зоне проводимости с концентрацией  $n$ ; дырки с эффективной массой  $m_p^*$  находятся в валентной зоне с концентрацией  $p$ ; электроны в зоне проводимости и дырки в валентной зоне можно рассматривать как свободные частицы с энергиями

$$\text{для электронов } e = E_e + \frac{p^2}{2m_e^*},$$

для дырок  $e = E_v - \frac{p^2}{2m_n^*}$ .

где  $E_c$  — энергия, соответствующая дну зоны проводимости,  $E_v$  — энергия, соответствующая верху валентной зоны,  $p$  — импульс электрона или дырки.

## 5.2. Собственные полупроводники

Собственным называется полупроводник, в котором отсутствуют примеси, то есть чужеродные атомы, находящиеся в кристаллической решетке основного вещества. В таком полупроводнике свободные носители тока — электроны в зоне проводимости и дырки в валентной зоне — образуются только за счет переходов электронов из валентной зоны в зону проводимости.

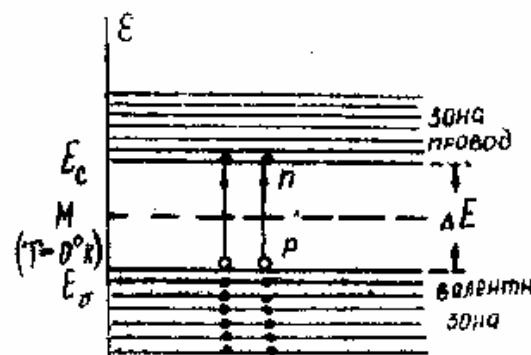


Рис. 20

димости. Ясно, что при этом число электронов  $n$  равно числу дырок  $p$ :

$$n=p. \quad (1)$$

Основная задача статистики полупроводников состоит в том, чтобы определить  $n$  и  $p$  при данной температуре  $T$ . Начнем с определения концентрации электронов в зоне проводимости.

Выделим в зоне проводимости бесконечно малый интервал энергий  $de$ , взятый около некоторой энергии  $e$ , и определим среднее число электронов  $dn(e)$ , имеющих энергию в этом интервале, т. е. от  $e$  до  $e+de$ . Согласно (12) подразд. 1.3 разд. 1

$$dn(e) = \bar{n}(e)g(e)de. \quad (2)$$

Прежде всего определим  $g(e)$  для электронов в зоне проводимости. Ранее, в разд. 2, было получено выражение для плотности состояний для свободных частиц с импульсом  $p$

$$g(e) = 4\pi \left( \frac{2m}{h^3} \right)^{3/2} \sqrt{e}. \quad (3)$$

Для того чтобы перейти к электронам в зоне проводимости, следует учесть, что в этой зоне электроны ведут себя как свободные частицы с эффективной массой  $m_n^*$ , а энергия электронов вблизи дна зоны проводимости может быть записана в следующем виде:

$$e = E_c + \frac{p^2}{2m_n^*}. \quad (4)$$

С учетом этого в выражении (3) следует  $m$  заменить на  $m_n^*$ , а  $e$  заменить на  $e - E_c$ . Тогда плотность состояний для электронов в зоне проводимости будет иметь вид

$$g(e) = 4\pi \left( \frac{2m_n^*}{h^3} \right)^{3/2} \sqrt{e - E_c}. \quad (5)$$

Что касается  $\bar{n}(e)$ , то оно зависит от того типа статистики, которому подчиняется поведение свободных электронов в полупроводнике. Для выяснения этого вопроса воспользуемся критерием вырождения (формула (28), разд. 1). Для перехода к классической статистике необходимо условие

$$\left( \frac{V}{N} \right)^{1/3} \gg \frac{\hbar}{\sqrt{2\pi mkT}}. \quad (6)$$

Опыт показывает, что при температурах, близких к комнатным,  $n = \frac{N}{V} = 10^{18} \text{ м}^{-3}$ . Подставляя в (6)  $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$ ,  $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К}$ ,  $T = 300 \text{ К}$ , получим, что условие (6) выполнено. Это означает, что при комнатных температурах к электронам в полупроводнике может быть применена классическая статистика Максвелла—Больцмана. В этом случае:

$$\bar{n}(e) = e^{\frac{e - E_c}{kT}} \quad (\text{формула (27), разд. 1}). \quad (7)$$

Электронный газ, подчиняющийся классической статистике Максвелла—Больцмана, называется невырожденным, а полупроводники — невырожденными полупроводниками. Подставляя (7) и (5) в (2), получим

$$dn(\epsilon) = 4\pi \left( \frac{2m_n^*}{h^2} \right)^{3/2} \sqrt{\epsilon - E_c} e^{\frac{\mu-\epsilon}{kT}} d\epsilon. \quad (8)$$

Функция  $\rho_n(\epsilon)$ , равная  $\frac{dn(\epsilon)}{d\epsilon}$ , называется функцией распределения электронов в зоне проводимости по энергиям. Согласно (8)

$$\rho_n(\epsilon) = 4\pi \left( \frac{2m_n^*}{h^2} \right)^{3/2} \sqrt{\epsilon - E_c} e^{\frac{\mu-\epsilon}{kT}}. \quad (9)$$

Функция распределения (9) определяет среднее число электронов, имеющих энергию в единичном энергетическом интервале, взятом около энергии  $\epsilon$  в зоне проводимости.

Для вычисления концентрации электронов  $n$  в зоне проводимости следует выражение (8) проинтегрировать по всем энергиям от  $E_c$  до  $\infty$ :

$$n = \int_{E_c}^{\infty} dn(\epsilon) = \int_{E_c}^{\infty} \rho_n(\epsilon) d\epsilon = 4\pi \left( \frac{2m_n^*}{h^2} \right)^{3/2} e^{\frac{\mu}{kT}} \int_{E_c}^{\infty} \sqrt{\epsilon - E_c} e^{-\frac{\epsilon-\mu}{kT}} d\epsilon. \quad (10)$$

Интегрирование следовало бы проводить от дна зоны проводимости  $E_c$  до верха зоны проводимости  $E_{\text{стах}}$ , однако поскольку электроны находятся только вблизи дна зоны проводимости, расширение верхнего предела до  $\infty$  не меняет значения интеграла.

Интеграл в (10) вычисляется следующим образом. Введем новую переменную  $E = \epsilon - E_c$ . Тогда

$$e^{-\frac{\epsilon}{kT}} = e^{-\frac{E+E_c}{kT}} = e^{-\frac{E_c}{kT}} \cdot e^{-\frac{E}{kT}}; dE = d\epsilon. \quad (11)$$

Подставляя (11) в (10) и меняя пределы интегрирования, получим

$$n = 4\pi \left( \frac{2m_n^*}{h^2} \right)^{3/2} e^{\frac{\mu-E_c}{kT}} \int_0^{\infty} E^{1/2} \cdot e^{-\frac{E}{kT}} dE. \quad (12)$$

Интеграл, стоящий в (12), является табличным:

$$\int_0^{\infty} E^{1/2} e^{-\frac{E}{kT}} dE = \frac{\sqrt{\pi}}{2} (\kappa T)^{3/2}. \quad (13)$$

Подставляя (13) в (12), получим

$$n = 2 \left( \frac{2\pi m_n^* \kappa T}{h^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{E_c-\mu}{kT}}, \text{ или } n = N_c e^{\frac{\mu-E_c}{kT}}, \quad (14)$$

$$N_c = 2 \left( \frac{2\pi m_n^* \kappa T}{h^2} \right)^{3/2}, \quad (15)$$

Аналогично расчету концентрации электронов в зоне проводимости производится расчет концентрации дырок в валентной зоне. Проведем этот расчет для невырожденного полупроводника.

Выделим в валентной зоне интервал энергий  $d\varepsilon$  вблизи некоторой энергии  $\varepsilon$ . Среднее число дырок  $d\rho(\varepsilon)$ , имеющих энергию в интервале от  $\varepsilon$  до  $\varepsilon+d\varepsilon$ , равно

$$d\rho(\varepsilon) = \bar{p}(\varepsilon)dN_p(\varepsilon) = \bar{p}(\varepsilon)g_p(\varepsilon)d\varepsilon, \quad (16)$$

где  $g_p(\varepsilon)$  — плотность дырочных состояний в валентной зоне;  $\bar{p}(\varepsilon)$  — среднее число дырок в квантовом состоянии с энергией  $\varepsilon$ .

Энергия дырки вблизи верха валентной зоны может быть записана в виде

$$\varepsilon = E_v - \frac{p^2}{2m_p^*}, \quad (17)$$

где  $E_v$  — энергия верха валентной зоны.

Для определения  $g_p(\varepsilon)$  вспомним, что вблизи верха валентной зоны дырки ведут себя как свободные частицы с эффективной массой  $m_p^*$  и энергией  $\varepsilon = E_v - \frac{p^2}{2m_p^*}$ . Рассуждая аналогично тому, как это было сделано выше при вычислении  $g(\varepsilon)$  для электронов, получим

$$g_p(\varepsilon) = 4\pi \left(\frac{2m_p^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{E_v - \varepsilon}. \quad (18)$$

Согласно (19) разд. 1  $\bar{p}(\varepsilon)$  совпадает с вероятностью обнаружить дырку в состоянии с энергией  $\varepsilon$ . Вероятность того, что на уровне с энергией  $\varepsilon$  в валентной зоне находится дырка, равна вероятности того, что на этом уровне отсутствует электрон:

$$\begin{aligned} \bar{p}(\varepsilon) &= 1 - \bar{n}(\varepsilon) = 1 - \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} + 1} = \frac{1}{1 + e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}}} = \\ &\simeq \frac{1}{e^{-\frac{\varepsilon - \mu}{kT}}} = e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}}. \end{aligned} \quad (19)$$

Подставляя (19) и (18) в (16), получим

$$d\rho(\varepsilon) = 4\pi \left(\frac{2m_p^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} \sqrt{E_v - \varepsilon} d\varepsilon. \quad (20)$$

Функция  $Q_p(\varepsilon) = \frac{d\rho(\varepsilon)}{d\varepsilon}$  называется функцией распределения дырок по энергиям в валентной зоне. Учитывая (20), получим

$$\rho_p(\varepsilon) = 4\pi \left(\frac{2m_p^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} \sqrt{E_v - \varepsilon}. \quad (21)$$

Для определения концентрации дырок  $\rho$  в валентной зоне следует (21) проинтегрировать от дна валентной зоны  $E_{v_{\min}}$

до верха  $E_v$ , однако, учитывая, что дырки лежат вблизи  $E_v$ , можно нижний предел распространить до  $-\infty$  без изменения значения интеграла:

$$p = \int_{-\infty}^{E_v} dp(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{E_v} \rho_p(\varepsilon) d\varepsilon = 4\pi \left(\frac{2m_p^*}{h^2}\right)^{3/2} e^{-\frac{\mu}{kT}} \int_{-\infty}^{E_v} \sqrt{E_v - \varepsilon} e^{\frac{\varepsilon}{kT}} d\varepsilon. \quad (22)$$

Для вычисления интеграла, входящего в (22), введем новую переменную  $E = E_v - \varepsilon$ . Тогда

$$e^{\frac{\varepsilon}{kT}} = e^{\frac{E_v - E}{kT}}; \quad dE = -d\varepsilon. \quad (23)$$

Подставляя (23) в (22), получим

$$p = -4\pi \left(\frac{2m_p^*}{h^2}\right)^{3/2} e^{\frac{E_v - \mu}{kT}} \int_{\infty}^0 E^{1/2} e^{-\frac{E}{kT}} dE; \\ - \int_{\infty}^0 E^{1/2} e^{-\frac{E}{kT}} dE = \int_0^{\infty} E^{1/2} e^{-\frac{E}{kT}} dE = \frac{\sqrt{\pi}}{2} (kT)^{3/2}. \quad (24)$$

Подставляя (24) в (22), получим

$$p = 2 \left(\frac{2m_p^* \pi kT}{h^2}\right)^{3/2} e^{\frac{E_v - \mu}{kT}}, \quad \text{или} \quad p = N_v e^{\frac{E_v - \mu}{kT}}, \quad (25)$$

где

$$N_v = 2 \left(\frac{2m_p^* \pi kT}{h^2}\right)^{3/2}. \quad (26)$$

### 5.3. Положение уровня Ферми в собственном полупроводнике

Выражения, полученные в подразд. 5.2, позволяют определить уровень Ферми в собственном полупроводнике. Для этого воспользуемся тем, что в таком полупроводнике число электронов в зоне проводимости равно числу дырок в валентной зоне:

$$n = p. \quad (27)$$

Подставив в (27) (14) и (26), получим

$$N_c e^{\frac{\mu - E_c}{kT}} = N_v e^{-\frac{\mu - E_v}{kT}}.$$

Разрешая это уравнение относительно  $\mu$ , получаем

$$\mu = \frac{E_c + E_v}{2} - \frac{kT}{2} \ln \left( \frac{N_c}{N_v} \right) = \frac{E_c + E_v}{2} - \frac{kT}{2} \ln \left( \frac{m_n^*}{m_p^*} \right)^{3/2}. \quad (28)$$

Это соотношение и определяет положение уровня Ферми в собственном полупроводнике. При  $T = 0$  К уровень Ферми проходит посередине запрещенной зоны. Подставляя (28) в (14) и (25), получим

$$n = N_0 e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}, \quad (29)$$

$$p = N_0 e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}, \quad (30)$$

где  $N_0 = \sqrt{N_e N_v}$ ;  $\Delta E = E_c - E_v$  — ширина запрещенной зоны.

Полная проводимость  $\sigma$  полупроводника складывается из проводимости  $\sigma_n$ , создаваемой электронами, и проводимости  $\sigma_p$ , создаваемой дырками:  $\sigma = \sigma_n + \sigma_p$ . Так как  $\sigma_n = e \mu_n \cdot n$ , а  $\sigma_p = e \mu_p \cdot p$ , где  $\mu_n$  и  $\mu_p$  — подвижности электронов и дырок соответственно, учитывая  $n = p$ , имеем

$$\sigma = e n (\mu_n + \mu_p). \quad (31)$$

Подставляя (29') в (31), получим  $\sigma = e(\mu_n + \mu_p) N_0 e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}$ , или, обозначая  $\sigma_0 = e N_0 (\mu_p + \mu_n)$ , получим

$$\sigma = \sigma_0 \cdot e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}. \quad (32)$$

Из этого выражения следует, что проводимость полупроводника определяется шириной запрещенной зоны  $\Delta E$  и температурой. При увеличении температуры проводимость полупроводника увеличивается, а следовательно, сопротивление падает. Этим полупроводники существенно отличаются от металлов, сопротивление которых растет с увеличением температуры.

Если построить зависимость  $\ln \sigma$  от  $\frac{1}{T}$ , то получится прямая линия, тангенс угла наклона которой равен  $\frac{\Delta E}{2kT}$ . Измеряя этот угол, можно экспериментально определить ширину запрещенной зоны.

#### 5.4. Примесные уровни

Рассмотрим теперь, как влияет на свойства полупроводника введение примесных атомов, которые замещают атомы основного вещества в узлах кристаллической решетки. Введение «чужого» атома нарушает поле кристаллической решетки, или, как говорят, вносит некоторое возмущение. Это возмущение не распространяется по всему кристаллу, а сосредоточено вблизи примесного атома, поэтому его называют локальным нарушением поля кристаллической решетки. Такие нарушения могут быть созданы не только примесными атомами, но и другими причинами, например, отсутствием в данном месте атома основного вещества (так называемые вакансии), дислокациями и др. Однако квантовая теория полупроводников показывает, что независимо от того, чем создано локальное нарушение поля кристаллической решетки, всегда при этом в запрещенной зоне полупроводника возникают разрешенные уровни энергии.

Разберем это на примере примесного атома, введенного в полупроводник, и оценим положение разрешенного уровня энергии, возникающего при этом в запрещенной зоне.

Каждый примесный атом характеризуется прежде всего своей энергией ионизации, т. е. энергией, необходимой для того, чтобы удалить из атома один из его валентных электронов. Энергия ионизации свободного атома составляет величину от 4—5 эВ для щелочных металлов до 24 эВ для атомов гелия. Как изменяется энергия ионизации, если такой атом не изолирован, а находится в качестве примеси в полупроводнике? Прежде всего, этот атом вступает во взаимодействие с другими атомами основного вещества. Внешний электрон атома примеси испытывает при этом воздействие не только со стороны своих «собственных» ядра и электронов, но и со стороны других атомов. При этом как расчет, так и опыт показывают, что энергия связи электрона в примесном атоме уменьшается по сравнению с энергией связи в изолированном атоме, а следовательно, уменьшается и энергия ионизации. В этом случае электрон начинает двигаться вокруг примесного ядра по орбите значительно **большего** радиуса, которая может охватывать сотни атомов основного вещества. При этом все происходит так, как если бы электрон в атоме примеси двигался вокруг ядра не в вакууме, а в некоторой среде, состоящей из атомов основного вещества. То, что здесь было сказано, можно проиллюстрировать на простом расчете, который основан на элементарной квантовой теории атома водорода, данной Бором.

Проведем расчет на примере германия, в который введена примесь мышьяка As. Германий находится в четвертом столбце таблицы Менделеева и имеет четыре валентных электрона. В чистом германии эти четыре электрона образуют ковалентные связи, которые и связывают атомы германия в кристаллическую решетку (рис. 21). На рис. 21 кружком обозначены атомы германия в узлах кристаллической решетки, а черточками — ковалентные связи, в образовании которых участвуют два электрона. Что произойдет, если в одном из узлов кристаллической решетки вместо атома германия поместить атом As, находящийся в пятом столбце таблицы Менделеева и, следовательно, имеющий пять валентных электронов? При этом четыре электрона будут участвовать в образовании ковалентных связей с другими атомами германия, а пятый будет «лишним» (рис. 21). Как уже говорилось, можно считать, что этот электрон движется в среде, составленной из атомов основного вещества.

Рассчитаем энергетические уровни примесного атома. Пусть основное вещество (германий) имеет диэлектрическую проницаемость  $\epsilon_{oc}$ . Тогда потенциальная энергия примесного атома

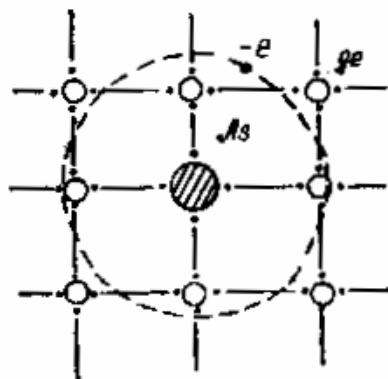


Рис. 21

будет  $V(r) = -\frac{Ze^2}{\epsilon_{oc}r}$  (а не  $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$ , как для свободного атома). Заряд иона равен  $Ze$ , где  $Z$  — порядковый номер элемента в таблице Менделеева. Полная энергия электрона примесного атома равна  $E = \frac{p^2}{2m} - \frac{Ze^2}{\epsilon_{oc}r}$  (знак « $-$ » в потенциальной энергии связан с тем, что потенциальная энергия электрона, удаленного из атома, принята за 0). При движении электрона по круговой орбите в поле заряда  $+Ze$  имеет место равенство

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{Ze^2}{\epsilon_{oc}r^2}, \quad (33)$$

которое говорит о том, что кулоновская сила, связывающая электрон и ядро, является в данном случае центростремительной. Разделим это равенство на два и сократим на  $r$ :

$$\frac{p^2}{2m} = \frac{mv^2}{2} = \frac{Ze^2}{2\epsilon_{oc}r}, \quad E = -\frac{Ze^2}{2\epsilon_{oc}r},$$

т. е. полная энергия равна половине потенциальной. Из постулатов Бора известно, что для электрона на стационарной орбите должно быть выполнено условие  $mvr = n\frac{h}{2\pi}$ , где  $m$  — масса электрона,  $v$  — скорость электрона на орбите,  $r$  — радиус орбиты,  $h$  — постоянная Планка,  $n$  — целое число, начиная с 1. Тогда, комбинируя это условие с условием (33), имеем

$$mvr = n\frac{h}{2\pi}, \quad \frac{mv^2}{r} = \frac{ze^2}{\epsilon_{oc}r^2}.$$

Отсюда радиус орбиты равен  $r_n = \frac{\epsilon_{oc}h^2n^2}{Zme^2}$ .

Видим, что радиус орбит электронов атома примеси, находящегося в полупроводнике, в  $\epsilon_{oc}$  раз больше радиусов орбит изолированного атома (рис. 21). Уровни энергии при этом

$$E_n = -\frac{2\pi^2ze^2e^4m}{h^2n^2\epsilon_{oc}^2}.$$

Энергия ионизации при  $n=1$  равна  $E_{ia} = -\frac{2\pi^2Z^2e^4m}{h^2\epsilon_{oc}^2}$ .

Из соотношения видно, что энергия ионизации атома примеси, находящегося в полупроводнике, в  $e^2$  раз меньше, чем энергия ионизации того же атома в свободном состоянии. Для германия  $\epsilon_{oc} = 16$ , для кремния  $\epsilon_{oc} = 12$ , т. е. энергия ионизации атома примеси уменьшается в сотни раз. Она составляет сотые доли электрон-вольт. Определим теперь, где находится уровень энергии электрона примесного атома на диаграмме энергетических зон. При ионизации атома примеси, т. е. при удалении из атома примеси валентного электрона, последний становится свободным и может перемещаться по кристаллу, участвуя в переносе электрического тока. На зонной диаграмме этот электрон находится в зоне проводимости. Таким обра-

зом, ионизация атома примеси есть не что иное, как перевод электрона с примесного уровня в зону проводимости. Поскольку на этот перевод нужно затратить энергию, равную энергии ионизации, электрон в зоне проводимости имеет энергию, **большую**, чем на примесном уровне, или, другими словами, дно зоны проводимости лежит выше примесного уровня как раз на энергию ионизации, т. е. примесный уровень находится в запрещенной зоне. Так как ширина запрещенной зоны порядка единиц электрон-вольт, а  $E_i$  составляет сотые доли электрон-вольта, окончательно имеем: примесный уровень лежит в запрещенной зоне вблизи дна зоны проводимости (рис. 22). Обычно при комнатных температурах такие примеси почти полностью ионизованы, т. е. их «лишние» электроны переведены в зону проводимости. Такие примеси, которые являются поставщиками дополнительных электронов в зону проводимости, носят название **донарных примесей**.

Донарными примесями не исчерпываются все типы примесей в полупроводниках. Существует еще один тип примеси, так называемая акцепторная примесь, которая является поставщиком дырок в валентную зону. Рассмотрим действие акцепторной примеси на примере примеси индия в германии. Что проис-

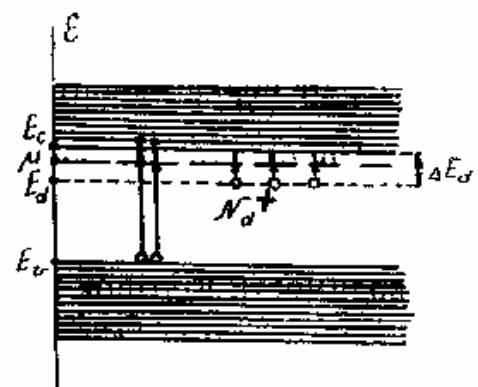


Рис. 22

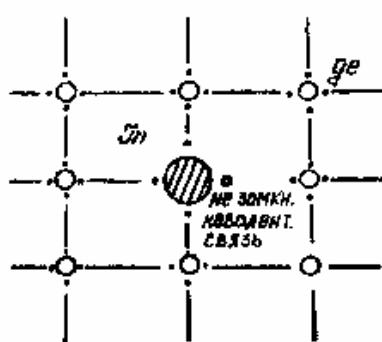


Рис. 23

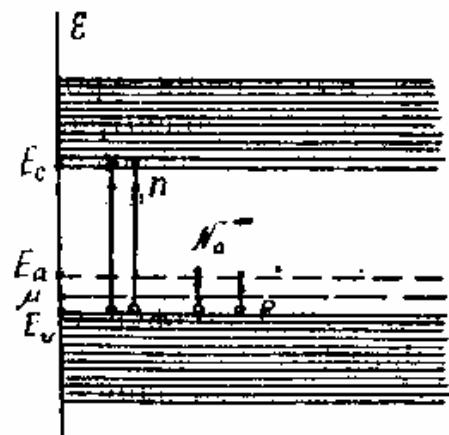


Рис. 24

ходит, если в кристаллической решетке германия один атом германия заменить на атом индия (рис. 23)? Атом индия находится в третьем столбце таблицы Менделеева, следовательно, имеет три валентных электрона. Он может образовать три ковалентные связи с атомами германия. Четвертая связь оказывается незавершенной из-за отсутствия четвертого электрона у индия. Но отсутствие электрона есть не что иное, как нали-

чие дырки, поэтому можно условно считать, что у атома индия имеется «лишняя» дырка (незавершенная связь). Незавершенная связь может быть завершена, если какой-либо электрон основного вещества ее завершит (рис. 23). Но при этом дырка образуется у другого атома. Таким образом, незавершенная связь (дырка) может перемещаться по кристаллу и давать вклад в ток. Другими словами, акцепторные уровни являются поставщиками дырок. Расчет, аналогичный тому, который был проведен для донорных уровней, показывает, что энергетический уровень, соответствующий акцепторной примеси, лежит в запрещенной зоне. Акцепторный уровень лежит на расстоянии  $E_a$  от верха валентной зоны (рис. 24).

### 5.5. Положение уровня Ферми в примесном полупроводнике

При изучении собственных полупроводников были получены следующие соотношения для концентрации электронов в зоне проводимости и дырок в валентной зоне:

$$n = N_c e^{-\frac{E_F - \mu}{kT}}, \quad (34) \quad p = N_v e^{-\frac{\mu - E_F}{kT}}. \quad (35)$$

Эти соотношения позволяют найти  $n$  и  $p$  при условии, что положение уровня Ферми  $\mu$  в данном полупроводнике известно. Однако, как было показано ранее, уровень Ферми зависит от концентрации носителей заряда и температуры. Поэтому при введении в полупроводник примесей, которые сильно изменяют концентрацию носителей заряда и распределение их по состояниям, может сильно измениться и уровень Ферми. Цель данного подраздела состоит в том, чтобы определить положение уровня Ферми в примесном полупроводнике.

Для вычисления уровня Ферми служит так называемое уравнение электронейтральности. Это уравнение отражает тот простой и ясный физический результат, что поскольку полупроводник в целом является незаряженным, как во всем кристалле, так и в физически малом объеме вещества полный заряд всех частиц должен быть равен нулю, т. е. полный положительный заряд должен быть точно равен полному отрицательному заряду.

Отрицательный заряд создают электроны в зоне проводимости  $n$  и электроны, находящиеся на акцепторных уровнях, число которых равно числу ионизированных акцепторных атомов  $N_a^-$ . Таким образом, полный отрицательный заряд в полупроводнике равен  $-(n + N_a^-)e$ . Положительный заряд создается дырками в валентной зоне  $p$  и ионизованными атомами донорной примеси  $N_d^+$ . Таким образом, суммарный положительный заряд равен  $(p + N_d^+)e$ . Приравнивая полный положительный и отрицательный заряды и сокращая на  $e$ , получим уравнение электронейтральности

$$n + N_a^- = p + N_d^+. \quad (36)$$

Для того чтобы из этого уравнения получить уровень Ферми  $\mu$ , следует выразить все величины  $n$ ,  $p$ ,  $N_a^-$  и  $N_d^+$  через уровень Ферми. Как связаны  $n$  и  $p$  с уровнем Ферми, уже известно, поэтому остается определить  $N_a^-$  и  $N_d^+$  как функцию  $\mu$ . Для этого нужно прежде всего знать функцию распределения электронов по примесным состояниям. Мы не будем здесь приводить подробный расчет, в результате которого получается эта функция распределения. Отметим только, что использовав известный в статистической физике метод Гиббса для систем с переменным числом частиц, можно получить следующее выражение для функции распределения электронов по примесным состояниям:

$$f = \frac{1}{\frac{1}{g_i} e^{\frac{E_i - \mu}{kT}} + 1} \quad (37)$$

$E_i$  — энергия  $i$ -го примесного уровня;  $f$  — вероятность электрону находиться на  $i$ -м примесном уровне;  $g_i$  — степень вырождения  $i$ -го примесного уровня, причем, если уровень является донорным, т. е.  $E_i = E_d$ , то  $g_i = 2$ , а если акцепторным, т. е.  $E_i = E_a$ , то  $g_i = \frac{1}{2}$ .

Таким образом, вероятность обнаружить электрон на донорном уровне равна

$$f = \frac{1}{\frac{1}{2} e^{\frac{E_d - \mu}{kT}} + 1}, \quad (38)$$

а вероятность обнаружить дырку на донорном уровне, т. е. вероятность того, что электрон отсутствует на донорном уровне, или, что то же самое, вероятность ионизации донорного уровня равна

$$f_p = 1 - f = \frac{1}{2 e^{\frac{\mu - E_d}{kT}} + 1}. \quad (39)$$

Если имеется  $N_d$  примесных донорных атомов, то число ионизованных донорных атомов  $N_d^+$  равно

$$N_d^+ = N_d \cdot f_p = \frac{N_d}{2 e^{\frac{\mu - E_d}{kT}} + 1}. \quad (40)$$

Аналогично вероятность обнаружить электрон на акцепторном уровне равна

$$f = \frac{1}{\frac{1}{2} e^{\frac{E_a - \mu}{kT}} + 1}, \quad (41)$$

а вероятность обнаружить дырку на акцепторном уровне равна

$$f_p = 1 - f = \frac{1}{\frac{1}{2} e^{\frac{\mu - E_a}{kT}} + 1}. \quad (42)$$

Так как вероятность ионизации акцепторного уровня равна вероятности обнаружить электрон на акцепторном уровне, то число ионизированных акцепторных атомов примеси  $N_a^-$  равно

$$N_a^- = N_a \cdot f = \frac{N_a}{\frac{1}{2} e^{\frac{\mu - E_a}{kT}} + 1}. \quad (43)$$

Итак, мы выразили все члены, входящие в уравнение электронейтральности, через уровень Ферми:

$$n = N_c e^{-\frac{E_c - \mu}{kT}}; \quad p = N_a e^{-\frac{\mu - E_a}{kT}}; \\ N_a^+ = \frac{N_d}{\frac{1}{2} e^{\frac{\mu - E_d}{kT}} + 1}; \quad N_a^- = \frac{N_a}{\frac{1}{2} e^{\frac{\mu - E_a}{kT}} + 1}. \quad (44)$$

Знание всех этих величин позволяет в принципе решить уравнение электронейтральности. Так как решение этого уравнения чрезвычайно сложно в общем виде, оно будет решено для нескольких частных случаев, имеющих практическое значение.

Вычислим положение уровня Ферми в полупроводнике, в котором имеется только донорная примесь. Тогда  $N_a = 0$ , и уравнение электронейтральности примет вид

$$n = p + N_a^+. \quad (45)$$

Это уравнение имеет простой физический смысл. Число свободных электронов в зоне проводимости  $n$  равно числу электронов, перешедших из валентной зоны, в результате чего там образовалось  $p$  дырок, и электронов, перешедших с донорных уровней, в результате чего образовалось  $N_a^+$  ионизированных донорных примесных атомов.

Итак, электроны в зоне проводимости появляются в результате двух процессов: перехода «зона — зона» и перехода «примесь — зона». Нетрудно видеть, что в зависимости от температуры эти процессы могут играть неодинаковую роль. Действительно, для перевода электрона из валентной зоны в зону проводимости нужна энергия, равная ширине запрещенной зоны  $\Delta E$ , тогда как для перевода электрона с примесного уровня в зону проводимости нужна энергия  $E_a$ , которая значительно меньше  $\Delta E$ , поэтому при низкой температуре основную роль будут играть переходы «примесь — зона», а следовательно, можно положить  $p \ll N_a^+$ . В этом случае уравнение электронейтральности будет иметь простой вид

$$n = N_d^+. \quad (46)$$

Что равенство означает, что все электроны в зоне проводимости созданы только за счет переходов «примесь — зона». Подставим в уравнение (45)  $n$  и  $N_d^+$ , выраженные через уровень Ферми  $\mu$  (43). Тогда получим

$$N_c e^{-\frac{E_c - \mu}{kT}} = \frac{N_d}{\frac{\mu - E_d}{kT} + 1}.$$

Рассмотрим случай настолько низких температур, при которых выполнено условие:

$$e^{\frac{\mu - E_d}{kT}} \gg 1, \text{ или } \mu - E_d \gg kT.$$

В этом случае уравнение электронейтральности примет вид

$$N_c e^{-\frac{E_c - \mu}{kT}} = \frac{1}{2} N_d e^{-\frac{\mu - E_d}{kT}}.$$

Решая это уравнение относительно  $\mu$ , получим

$$\mu = \frac{E_c + E_d}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_d}{2N_c}. \quad (47)$$

При  $T = 0^\circ\text{K}$   $\mu = \frac{E_c + E_d}{2}$ , т. е. при абсолютном нуле температуры уровень Ферми лежит посередине между дном зоны проводимости и примесным уровнем.

Посмотрим теперь, как изменится уровень Ферми при изменении температуры. Здесь нужно иметь в виду, что  $N_d = \text{const}$ , а  $N_c$  зависит от температуры по следующему закону:

$$N_c = 2 \left( \frac{2\pi m_e^* kT}{h^2} \right)^{3/2}.$$

При низких температурах  $N_c < N_d$  и уровень Ферми растет с увеличением температуры ( $\ln \frac{N_d}{2N_c} > 0$ ). При дальнейшем увеличении температуры, когда  $N_c$  возрастает настолько, что  $N_d$  становится меньше  $2N_c$ , логарифм в выражении для  $\mu$  изменяет знак и уровень Ферми начинает падать при увеличении температуры. При  $N_d = 2N_c$  уровень Ферми проходит опять посередине между  $E_c$  и  $E_d$ . При больших температурах, как несложно видеть, уровень Ферми будет стремиться к тому положению, которое он должен занимать в собственном полупроводнике. Действительно, при высоких температурах, когда все примеси будут ионизованы, начинают существенную роль играть переходы «зона — зона». При достаточно высокой температуре  $\mu$  станет больше  $N_d^+$ , т. е.  $\mu \gg N_d^+$ , и уравнение электронейтральности будет иметь вид  $n = p$ .

Рассмотрим, как меняется концентрация электронов в зоне проводимости в примесном полупроводнике при изменении температуры. Имеем

$$n = N_c e^{-\frac{E_c - \mu}{kT}}, \quad (48)$$

$$\mu = \frac{E_c + E_d}{2} + \frac{kT}{2} \ln \frac{N_d}{2N_c}. \quad (49)$$

Подставив (48) в (49), получим

$$n = \sqrt{\frac{N_c N_d}{2}} e^{-\frac{\Delta E_d}{2kT}}, \text{ где } \Delta E_d = E_c - E_d, \text{ т. е. } n \sim e^{-\frac{\Delta E_d}{2kT}}. \quad (50)$$

Прологарифмировав выражение (50), получим

$$\ln n = \ln \sqrt{\frac{N_c N_d}{2}} - \frac{\Delta E_d}{2kT}. \quad (51)$$

Если построить график  $\ln n = f\left(\frac{1}{T}\right)$ , то он имеет вид прямой линии с тангенсом угла наклона, равным  $\frac{\Delta E_d}{2kT}$ . Измерив этот угол на графике, можно экспериментально получить значение  $\Delta E_d$ , т. е. энергию ионизации донорных примесей.

Перейдем теперь к рассмотрению полупроводника с акцепторной примесью. Не будем полностью проводить подробный расчет, так как решение задачи для нахождения уровня Ферми в данном случае совершенно аналогично предыдущему случаю; поэтому ограничимся качественным рассмотрением и приведем основные результаты.

Если в полупроводнике имеется только акцепторная примесь, то  $N_d = 0$  и уравнение электронейтральности имеет вид

$$p = n + N_a^-. \quad (52)$$

Уравнение (52) имеет простой физический смысл. Дырки в валентной зоне создаются как за счет переходов из валентной зоны в зону проводимости (переход «зона — зона»), при этом в зоне проводимости образуется *и* электронов, так и за счет переходов электронов из валентной зоны на акцепторный уровень (переход «зона — примесь»). При этом образуется  $N_a^-$  ионизованных примесных атомов. Так как для перехода первого типа требуется энергия  $\Delta E$ , равная ширине запрещенной зоны, а для перехода второго типа энергия  $\Delta E_a$ , которая значительно меньше  $\Delta E$ , то при низких температурах переходы «зона — примесь» играют основную роль. В этом случае переходы в «зона — зона» можно пренебречь, т. е. положить  $\ll N_a^-$  и уравнение электронейтральности примет вид

$$p = N_a^-, \quad (53)$$

или, используя выражения для  $p$  и  $N_a^-$  через уровень Ферми, имеем

$$N_a e^{-\frac{\mu - E_a}{kT}} = \frac{N_a}{2e^{\frac{E_a - \mu}{kT}} + 1}.$$

Если температуры настолько низки, что  $E_a - \mu \gg kT$  и, следовательно,  $e^{\frac{E_a - \mu}{kT}} \gg 1$ , то уравнение электронейтральности принимает вид

$$N_v e^{-\frac{\mu - E_v}{kT}} = \frac{1}{2} N_a e^{-\frac{E_a - \mu}{kT}}.$$

Решая это уравнение относительно  $\mu$ , получим

$$\mu = \frac{E_v + E_a}{2} - \frac{kT}{2} \ln \frac{N_a}{2N_v}. \quad (54)$$

Три  $T = 0$  К  $\mu = \frac{E_v + E_a}{2}$ , т. е. при абсолютном нуле температуры уровень Ферми проходит посередине между верхом валентной зоны и примесным уровнем.

Анализ положения уровня Ферми при более высоких температурах, проведенный аналогично донорным примесям, показывает, что при увеличении температуры уровень Ферми сначала падает, т. е. приближается к верху валентной зоны, затем растет и при  $N_a = 2N_v$  опять проходит посередине между  $E_v$  и  $E_a$ , а затем при дальнейшем увеличении температуры стремится в положению, которое занимает уровень Ферми в собственном полупроводнике. Это происходит при таких температурах, когда переходы «зона — зона» начинают играть основную роль. В уравнении электронейтральности можно пренебречь  $N_a$  по сравнению с  $n$ . Тогда  $N_a \ll p$  и  $n = p$ .

Наконец, очень коротко рассмотрим случай, когда в полупроводнике имеются примеси обоих типов  $N_d$  и  $N_a$ . Если  $N_d = N_a$  (такой полупроводник называется скомпенсированным), то уровень Ферми лежит почти посередине запрещенной зоны, т. е. там же, где и в собственном полупроводнике. Если же преобладает примесь одного вида, например  $N_d$ , так что  $N_d = N_d - N_a$ , то  $N_d$  играет такую же роль, как и примесь одного вида. При этом имеется существенная особенность. Уровень Ферми будет при  $T = 0$  К совпадать с уровнем той примеси, которой больше (в данном случае донорной примеси). Если  $N_d$  и  $N_a$  отличаются очень сильно, так что  $N_d \gg N_a$ , то полупроводник ведет себя как полупроводник с одним типом примеси.

#### Контрольные вопросы

Какова рассматриваемая модель полупроводника?

Что такое «дырка»?

Какие полупроводники называются собственными?

Где лежит уровень Ферми на энергетической схеме собственного полупроводника при  $T = 0$  К?

Что такое донорные и акцепторные примеси?

Где лежат примесные уровни и уровень Ферми на энергетической схеме примесного полупроводника?