

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО СВЯЗИ
ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ТЕЛЕКОММУНИКАЦИЙ
им. проф. М. А. БОНЧ-БРУЕВИЧА»

А. М. Ковнацкий, Ю. Ф. Матюшичев

ЭЛЕМЕНТЫ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Учебное пособие

СПб ГУТ)))

Санкт-Петербург
2010

УДК 530.1(075.8)

ББК В31я73

К 56

Рецензент

доктор физико-математических наук, профессор *Л. М. Баскин*

*Рекомендовано редакционно-издательским советом СПбГУТ
в качестве учебного пособия*

Ковнацкий, А. М.

К 56 Элементы статистической физики : учебное пособие /
А. М. Ковнацкий, Ю. Ф. Матюшичев. – СПб. : Изд-во «Теледом»
ГОУВПО СПбГУТ, 2010. – 60 с.

Подробно рассмотрен раздел «Элементы статистической физики» общего курса физики, посвященный изучению свойств макроскопических тел, т. е. систем, состоящих из очень большого числа одинаковых частиц (молекул, атомов, электронов и т. д.) исходя из свойств этих частиц и взаимодействий между ними. Данный раздел изучается в рамках утвержденной программы курса общей физики.

Изложен материал по двум типам квантовой статистики и классической статистике на примере электронов в металле, электронов и дырок в полупроводниках, фотонного газа и молекулярного газа.

Предназначено для студентов, обучающихся по техническим специальностям в Санкт-Петербургском государственном университете телекоммуникаций им. проф. М. А. Бонч-Бруевича.

УДК 530.1(075.8)

ББК В31я73

© Ковнацкий А. М., Матюшичев Ю. Ф., 2010

© Государственное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Санкт-Петербургский государственный
университет телекоммуникаций
им. проф. М. А. Бонч-Бруевича», 2010

*Посвящается светлой памяти нашего коллеги и товарища
профессора А. М. Ковнацкого*

ПРЕДИСЛОВИЕ

Основным материалом, определившим содержание данного учебного пособия, послужили лекции авторов в Санкт-Петербургском государственном университете телекоммуникаций им. проф. М.А.Бонч-Бруевича (СПбГУТ) по утвержденной программе курса общей физики.

Это пособие представляет собой расширенное изложение одного из разделов курса общей физики, который читается в СПбГУТ. В пособии сделана попытка такого изложения основных положений и закономерностей статистической физики, которое облегчало бы их понимание и способствовало ознакомлению студентов с основами науки.

Идея создания пособия принадлежит профессору А. М. Ковнацкому, который длительное время работал на кафедре физики СПбГУТ. Именно А. М. Ковнацкий разработал общее построение данного пособия и порядок изложения учебного материала.

Пособие состоит из 5 разделов, в которых рассмотрены следующие вопросы:

- основные положения статистической физики;
- электроны в металле как пример квантовой статистики Ферми–Дирака;
- фотонный газ как пример квантовой статистики Бозе–Эйнштейна;
- идеальный газ молекул как пример классической статистики Максвелла–Больцмана;
- статистика электронов и дырок в полупроводниках.

В конце каждого раздела сформулированы контрольные вопросы для самопроверки изученного материала.

Это второе издание пособия. Со времени выхода первого издания прошло уже много лет. В течение этого времени авторы имели возможность проверить целесообразность построения программного учебного материала и доступность его изложения. Полученные отзывы преподавателей и студентов СПбГУТ, а также и преподавателей других вузов, были весьма доброжелательными и не содержали указаний на необходимость изменения общего построения и содержания учебного материала. Поэтому во втором издании план, порядок и характер изложения остались прежними.

В заключение приносим благодарность коллективу кафедры физики СПбГУТ, и в особенности заведующему кафедрой, лауреату государственной премии, доктору физико-математических наук, профессору Г. Н. Фурсею, за методические рекомендации, данные при обсуждении учебного пособия.

Также выражаем благодарность доктору физико-математических наук, профессору Л. М. Баскину, взявшему на себя труд по редактированию данного пособия.

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, нейтроны и протоны (нуклоны) и т. д. В этом смысле к макроскопическим телам можно отнести все газообразные, жидкие и твердые тела, а также плазму, электромагнитное излучение, рассматриваемое как поток фотонов, сложные ядра, содержащие большое число нуклонов, и другие системы.

Частицы, из которых состоят макроскопические тела, находятся в непрерывном беспорядочном движении. Если учесть, что в любом макроскопическом теле таких частиц чрезвычайно много, то может показаться, что в поведении макроскопических тел не наблюдается никакой закономерности. Однако это не так. Оказалось, что макроскопические тела обнаруживают особые свойства, и в поведении их наблюдаются новые закономерности, связанные именно 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. Даже если предположить, что частицы подчиняются законам классической механики, то для решения такой задачи нужно было бы составить систему уравнений Ньютона (по три уравнения для каждой частицы) и решить все эти взаимосвязанные уравнения с заданными начальными условиями. При современном развитии вычислительной техники такая процедура может проводиться в том случае, когда число частиц не превосходит 10^4 . Данное направление статистической физики в настоящее время бурно развивается и носит название *молекулярной динамики*. Однако для реальных макроскопических тел, состоящих из огромного числа структурных элементов ($>10^{19}$) такие расчеты практически неосуществимы. Исходя из этого, статистическая физика не ставит

своей целью вычислить точные значения физических величин, характеризующих макроскопическую систему. Используя тот факт, что макроскопическое тело (система) 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. Одинаковыми 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

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \quad (1.1)$$

волновую функцию системы, состоящей из двух частиц. Здесь \vec{r} – совокупность координат частицы вместе со спиновым индексом, т. е. числом, указывающим направление спина частицы. Тогда плотность вероятности обнаружения первой частицы вблизи точки \vec{r}_1 , а второй – вблизи точки \vec{r}_2 выражается в виде

$$|\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2. \quad (1.2)$$

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

$$|\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 = |\Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1)|^2. \quad (1.3)$$

Из (1.3) следует, что

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \mp \Psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1). \quad (1.4)$$

Таким образом, приходим к следующему выводу: при перестановке двух тождественных частиц волновая функция системы либо меняет знак, либо остается неизменной. 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, вторые – бозоны. Как известно из квантовой механики, для первых справедлив 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, моментом импульса и т. д. Для того чтобы изучать поведение такого газа, нужно уметь прежде всего задавать состояние такого 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 количество столкновений друг с другом, причем при каждом столкновении энергия меняется случайным образом. Следовательно, число молекул $n(\varepsilon)$, имеющих в данный момент t определенную энергию ε , есть величина переменная.

Поэтому даже если $n(\varepsilon)$ 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 данную энергию ε . Ясно, что для описания состояния микроскопической системы следует опираться на какие-то постоянные или мало меняющиеся параметры.

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

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

$$\langle \Delta n(\varepsilon) \rangle \sim N \Delta\varepsilon. \quad (1.5)$$

Коэффициент пропорциональности в (1.5) обозначается как $f(\varepsilon)$ и называется *функцией распределения молекул газа по энергиям*:

$$\langle \Delta n(\varepsilon) \rangle = f(\varepsilon) N \Delta\varepsilon, \quad (1.6)$$

или

$$f(\varepsilon) = \frac{\langle \Delta n(\varepsilon) \rangle}{N \Delta\varepsilon}. \quad (1.7)$$

Согласно (1.7) для $f(\varepsilon)$ можно дать следующее определение: ***функцией распределения называется физическая величина, численно равная отношению к числу молекул, энергия которых лежит в единичном интервале, взятом около некоторой энергии ε .***

Выше уже упоминалось, 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 $\langle dn(\varepsilon) \rangle$ понимают физически бесконечно малую величину, т. е. величину, значительно меньшую, чем полное число молекул газа, но все же содержащую достаточно большое число молекул, так что можно говорить об их среднем значении. С учетом этого (1.7) можно переписать в следующем виде:

$$f(\varepsilon) = \frac{\langle dn(\varepsilon) \rangle}{N d\varepsilon}. \quad (1.8)$$

(В дальнейшем знак $\langle \dots \rangle$ будем опускать, так как речь будет идти только о среднем числе частиц.) Если (1.8) проинтегрировать по всем энергиям от 0 до ∞ , получим полное число частиц в системе N :

$$\int_0^{\infty} dn(\varepsilon) = \int_0^{\infty} f(\varepsilon) N d\varepsilon = N. \quad (1.9)$$

Из (1.9), сокращая на N , получим

$$\int_0^{\infty} f(\varepsilon) d\varepsilon = 1. \quad (1.10)$$

Условие (1.10) 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, энер-

гия которых лежит в единичном интервале около некоторого ε , то аналогично предыдущему имеем

$$dn(\varepsilon) = f(\varepsilon)d\varepsilon; \quad f(\varepsilon) = \frac{dn(\varepsilon)}{d\varepsilon}; \quad (1.11)$$

$$\int_0^{\infty} f(\varepsilon) d\varepsilon = N. \quad (1.12)$$

Таким образом, рассмотрено распределение молекул газа по энергии. 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 $dn(\varepsilon)$, определяющая среднее число молекул, энергия которых лежит в интервале от ε до $\varepsilon + d\varepsilon$. Эту величину можно также вычислить способом, отличным от предыдущего. Как известно из квантовой механики, энергетический спектр макроскопической системы представляет собой систему близко лежащих энергетических уровней. При этом в общем случае каждой разрешенной энергии ε может соответствовать несколько квантовых состояний. Обозначим через $dN(\varepsilon)$ число квантовых состояний, лежащих в интервале энергий от ε до $\varepsilon + d\varepsilon$. Далее, обозначим через $\bar{n}(\varepsilon)$ среднее число частиц в квантовом состоянии с энергией ε . Тогда величину $dn(\varepsilon)$ можно вычислить, если умножить число квантовых состояний в интервале от ε до $\varepsilon + d\varepsilon$ на среднее число частиц в каждом квантовом состоянии, т. е.

$$dn(\varepsilon) = \bar{n}(\varepsilon)dN(\varepsilon). \quad (1.13)$$

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

$$dN(\varepsilon) = \frac{dN(\varepsilon)}{d\varepsilon} d\varepsilon = g(\varepsilon)d\varepsilon, \quad (1.14)$$

где обозначено

$$g(\varepsilon) = \frac{dN(\varepsilon)}{d\varepsilon}. \quad (1.15)$$

Величина $g(\varepsilon)$ называется *плотностью состояний*. Из (1.15) нетрудно видеть, что плотность состояний определяет число квантовых состояний в единичном интервале энергий, взятом около некоторой энергии ε . Сравнивая (1.11) и (1.13) с учетом (1.14), получим

$$f(\varepsilon) = \bar{n}(\varepsilon)g(\varepsilon). \quad (1.16)$$

Величина $\bar{n}(\varepsilon)$ зависит от того, какой статистикой описывается данная макроскопическая система (табл. 1.1).

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 проиллюстрировать различие в статистических свойствах систем, подчиняющихся той или иной статистике, рассмотрим следующий пример. Пусть нам

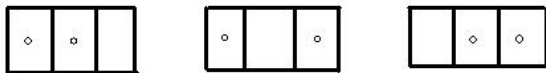


Рис. 1

нужно распределить две частицы по трем «ячейкам» («ячейки» играют роль квантовых состояний). Если частицы подчиняются статистике Ферми–Дирака, то возможно всего 3 различных распределения (рис. 1).

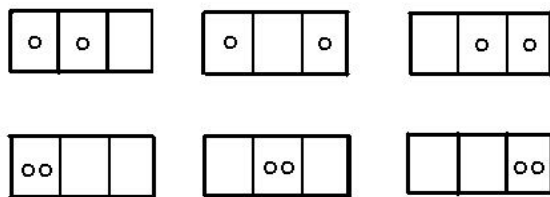


Рис. 2

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

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

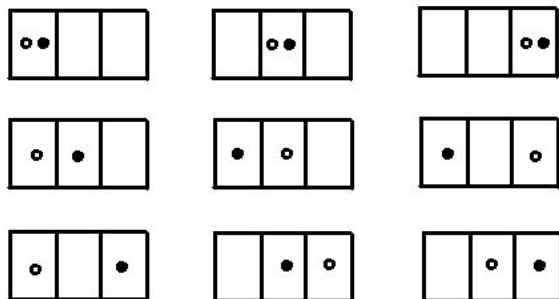


Рис. 3

Таким образом, данный пример показывает, что в зависимости от того, какой статистикой описывается данная система, 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 состояний и среднее 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 полужелым спином, описываемые антисимметричной волновой функцией. К таким частицам относятся электроны, протоны, позитроны, нейтрино, μ -мезоны и др. Эта статистика была предложена для электронов итальянским 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 ε равно

$$\bar{n}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} + 1}, \quad (1.17)$$

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

$$w(\varepsilon) = \frac{\bar{n}(\varepsilon)}{N}, \quad (1.18)$$

где N – полное число частиц в данном квантовом состоянии с энергией ε . Согласно принципу Паули, $N = 1$, тогда из (1.18) $w(\varepsilon) = \bar{n}(\varepsilon)$. Таким образом, функция Ферми–Дирака численно равна вероятности обнаружить частицу в квантовом состоянии с энергией ε . Проанализируем вид функции $\bar{n}(\varepsilon)$ для различных температур.

При $T = 0$ К имеем следующие случаи:

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

- если $\varepsilon > \mu$, то $\bar{n}(\varepsilon) = 0$, т. е. все квантовые состояния с энергией $\varepsilon > \mu$ совершенно пусты. График функции $\bar{n}(\varepsilon)$ при $T = 0$ К показан на рис. 4 (кривая 1).

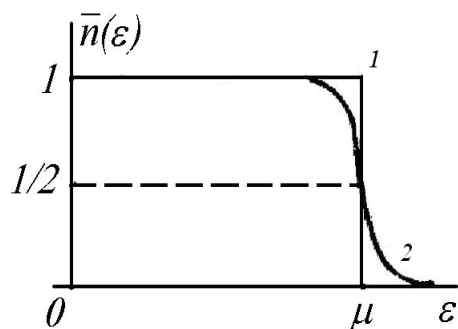


Рис. 4

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

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

- если $\varepsilon - \mu \gg kT$, то единицей в знаменателе (1.17) можно пренебречь по сравнению с экспонентой и тогда

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

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

- если $\varepsilon < \mu$ и $|\varepsilon - \mu| \gg kT$, то $e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} \ll 1$, тогда в этом случае экспонентой в знаменателе (1.17) можно пренебречь по сравнению с единицей. При этом $\bar{n}(\varepsilon) \cong 1$.

График функции $\bar{n}(\varepsilon)$ при $T \neq 0$ К 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, частицы, составленные из четного числа фермионов (дейтрон, α -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 термодинамическом равновесии при температуре T . Основное соотношение статистики Бозе–Эйнштейна определяет среднее число частиц

$$\bar{n}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} - 1}, \quad (1.19)$$

где k – постоянная Больцмана; μ – химический потенциал.

Если N задано, то μ находится из условия

$$N = \sum \bar{n}(\varepsilon), \quad (1.20)$$

где суммирование производится по всем квантовым состояниям.

Функция $\bar{n}(\varepsilon)$ называется *функцией распределения Бозе*. Проанализируем вид этой функции. Из (1.19) нетрудно видеть, что если $\varepsilon \rightarrow \infty$,

то $\bar{n}(\varepsilon) \rightarrow 0$, а если $\varepsilon \rightarrow \mu$, то $\bar{n}(\varepsilon) \rightarrow \infty$. Если выбрать за начало отсчета наименьшее значение энергии, которую может иметь одна частица, т. е. считать $\varepsilon = 0$, то график функции $\bar{n}(\varepsilon)$ будет иметь вид, представленный на рис. 5.

При этом $\mu \leq 0$. В статистической физике доказывается, что химический потенциал μ 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 испускаться и поглощаться стенками сосуда. Подробное поведение системы фотонов описано в разд. 3.

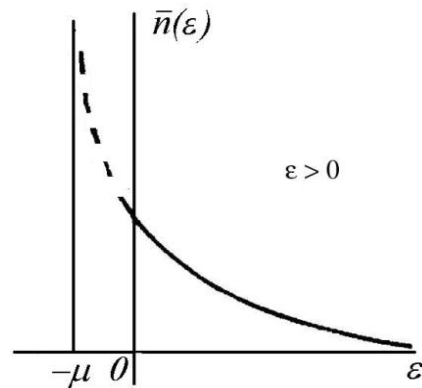


Рис. 5

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. В этом случае можно пользоваться классической статистической физикой, которая была создана в конце прошлого века английским физиком Д. Максвеллом и австрийским физиком Л. Больцманом.

Особенностью этой статистики является то, что в каждом состоянии с энергией ε может находиться любое число частиц, при этом частицы являются различимыми, т. е. принцип тождественности частиц не имеет места. Для среднего числа частиц $\bar{n}(\varepsilon)$ в состоянии с энергией ε основное соотношение статистики Максвелла–Больцмана имеет вид

$$\bar{n}(\varepsilon) = A e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}, \quad (1.21)$$

где A – постоянная, не зависящая от ε ; T – абсолютная температура.

Сравнивая (1.21) с (1.17) и (1.19), нетрудно видеть, что статистики Ферми–Дирака и Бозе–Эйнштейна переходят в статистику Максвелла–Больцмана при выполнении условия

$$e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} \gg 1. \quad (1.22)$$

Действительно, согласно (1.17) и (1.19)

$$\bar{n}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} \mp 1}, \quad (1.23)$$

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

Учитывая (1.22), из (1.23) получим

$$\bar{n}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}}} = e^{\frac{\mu}{kT}} \cdot e^{-\frac{\varepsilon}{kT}}. \quad (1.24)$$

Из сравнения (1.24) и (1.21) можно выразить постоянную A :

$$A = e^{\frac{\mu}{kT}}. \quad (1.25)$$

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

$$\bar{n}(\varepsilon) = e^{\frac{\mu-\varepsilon}{kT}}. \quad (1.26)$$

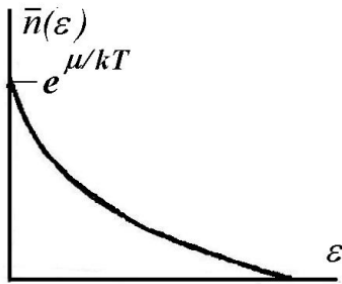


Рис. 6

График этой функции приведен на рис. 6.

Условие (1.22), определяющее переход от квантовой статистики к классической, может быть записано и в другом виде. Если вычислить μ для идеального газа молекул (это будет сделано в разд. 4) и подставить его в (1.22), то это условие примет вид

$$\left(\frac{V}{N}\right)^{1/3} \gg \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}}, \quad (1.27)$$

где V – объем, занимаемый системой; N – полное число частиц в системе; m – масса частицы; h – постоянная Планка.

Если условие (1.27) выполнено, то можно пользоваться классической статистикой. В противном случае следует пользоваться квантовой статистикой. Условие (1.27) носит название «критерий вырождения».

Условию (1.27) можно придать простой физической смысл. Величина V/N есть объем, приходящийся на одну частицу, а $(V/N)^{1/3}$ 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 $\varepsilon \sim kT$, h/p – есть длина волны де Бройля, соответствующая этому импульсу, или, как говорят, «тепловая длина волны де Бройля». Таким образом, условие (1.27) имеет следующий физический смысл: переход к классической статистике возможен, если среднее расстояние между частицами намного больше тепловой длины волны де Бройля частицы (т. е. система должна быть в достаточной мере разряжена).

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 неопределенностей Гейзенберга, из которого следует, что в общем случае частицы не имеют определенных координат и импульса и, следовательно не имеют траектории;
- 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 понять, что это можно сделать, если неопределенность в координатах 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. $e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}} \gg 1$, то $\bar{n}(\epsilon) \ll 1$, что 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 запрещает принцип 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, вы познакомились с основными положениями квантовой и классической статистик.

Приведем в заключение список важнейших соотношений:
квантовая статистика Ферми–Дирака

$$\bar{n}(\epsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{kT}} + 1}; \quad (1.28)$$

квантовая статистика Бозе–Эйнштейна

$$\bar{n}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} - 1}; \quad (1.29)$$

классическая статистика Максвелла–Больцмана

$$\bar{n}(\varepsilon) = e^{\frac{\mu - \varepsilon}{kT}}; \quad (1.30)$$

условие перехода к классической статистике («критерий вырождения»)

$$\left(\frac{V}{N}\right)^{1/3} \gg \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}}. \quad (1.31)$$

Далее перейдем к более подробному рассмотрению конкретных макроскопических систем, подчиняющихся статистике того или иного рода.

Контрольные вопросы

1. Что такое макроскопическое тело? В чем состоит предмет и метод статистической физики?
2. В чем заключается принцип тождественности частиц?
3. Какие волновые функции называются симметричными, а какие антисимметричными?
4. Какие два типа квантовых статистик вы знаете?
5. В чем заключается физический смысл функции распределения?
6. Каков физический смысл функции Ферми–Дирака?
7. Что такое уровень Ферми?
8. Каков физический смысл функции Бозе–Эйнштейна?
9. При каком условии обе квантовые статистики переходят в классическую?
10. В чем физический смысл критерия вырождения?

2. ЭЛЕКТРОНЫ В МЕТАЛЛЕ КАК ПРИМЕР КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКИ ФЕРМИ–ДИРАКА

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 при температуре T равна $\frac{3}{2}kT$.

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, связывающий электропроводность и теплопроводность металлов). Однако эта теория не смогла объяснить целый ряд других явлений и, прежде всего, предсказать правильную величину теплоемкости 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 должна быть применена для свободных электронов в металле. Согласно результатам, изложенным в разд. 1, квантовая статистика должна использоваться тогда, когда выполнено условие

$$\left(\frac{V}{N}\right)^{1/3} \ll \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}}. \quad (2.1)$$

Подставляя в (2.1) $N/V = n = 10^{28} \text{ м}^{-3}$, $h = 6,6 \cdot 10^{-34} \text{ Дж}\cdot\text{с}$, $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$, $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К}$, $T = 300 \text{ К}$, убеждаемся, что условие (2.1) выполнено. Таким образом, к свободным электронам в металле должна быть применена квантовая статистика.

2.1. Плотность состояний

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

$$g(\varepsilon) = \frac{dN(\varepsilon)}{d\varepsilon} \quad (2.2)$$

есть физическая величина, численно равная числу квантовых состояний, лежащих в единичном энергетическом интервале, взятом вблизи некоторой энергии ε . 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 $\varepsilon = p^2 / 2m$. 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. Для того 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 соотношение неопределенностей Гайзенберга:

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \cong h; \quad \Delta p_y \cdot \Delta y \cong h; \quad \Delta p_z \cdot \Delta z \cong h, \quad (2.3)$$

где $\Delta x, \Delta y, \Delta z$ – неопределенности в координатах x, y, z ;

$\Delta p_x, \Delta p_y, \Delta p_z$ – неопределенности в составляющих импульса.

Перемножим три соотношения неопределенностей:

$$\Delta x \Delta y \Delta z \cdot \Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z \sim h^3. \quad (2.4)$$

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 (2.4) следует

$$\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z \approx \frac{h^3}{\Delta x \Delta y \Delta z}. \quad (2.5)$$

Таким образом, если в классической механике состояние в импульсном пространстве изображается точкой, то в квантовой механике на каждое состояние приходится 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 область пространства, в которой находится электрон, равна L^3 , т. е. $\Delta x \Delta y \Delta z = L^3 = V$, где V – объем рассматриваемого куска металла. Отсюда $\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z = h^3 / V$, т. е. в квантовой механике на каждое состояние электрона приходится объем h^3 / V импульсного пространства.

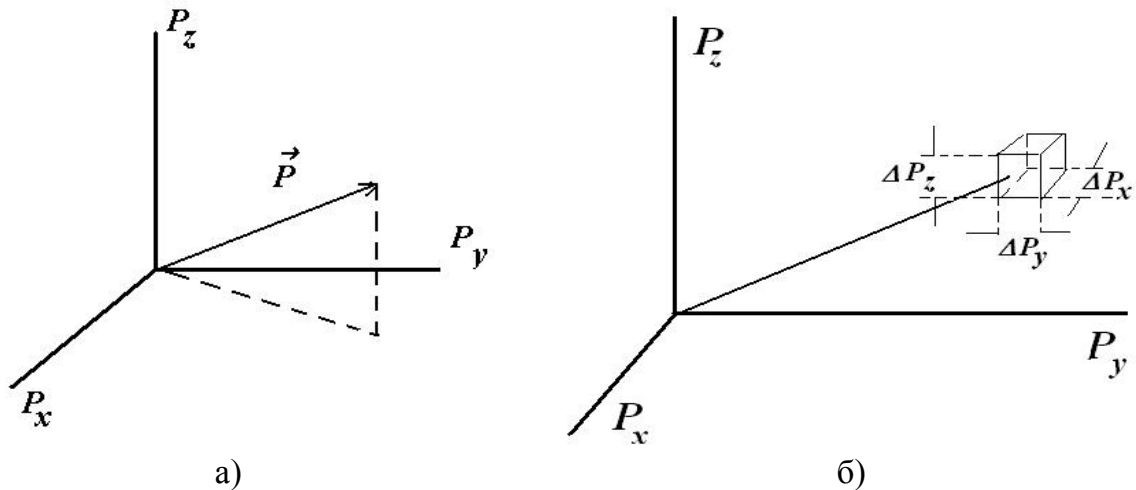


Рис. 7

Найдем число квантовых состояний в интервале импульсов от p до $p + dp$. Изобразим в пространстве импульсов поверхность, отвечающую состояниям с постоянной энергией ε (рис. 8).

Так как $\varepsilon = p^2 / 2m$, то условию $\varepsilon = \text{const}$ соответствует $p^2 = \text{const}$ или $p = \text{const}$ независимо от направления. Иными словами, подобная

поверхность представляет собой сферу радиусом $p = \sqrt{2m\varepsilon}$. Энергии $\varepsilon + d\varepsilon$ будет соответствовать сфера радиусом $p + dp$. Эти две сферы вырезают в импульсном пространстве сферический слой толщиной dp .

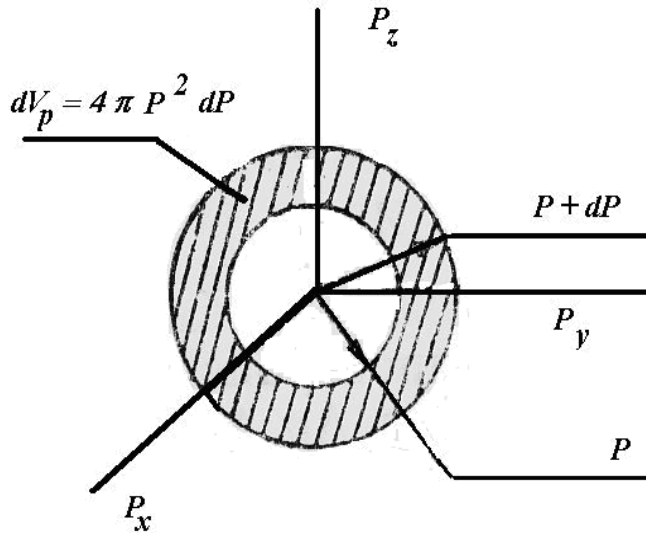


Рис. 8

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 h^3 / V , имеем

$$dN(p) = \frac{4\pi p^2 dp}{h^3} V. \quad (2.6)$$

В полученном уравнении (2.6) выразим p и dp через ε и $d\varepsilon$, воспользовавшись соотношением $\varepsilon = \frac{p^2}{2m}$. Поскольку $p^2 = 2m\varepsilon$, продифференцировав правую и левую части, найдем

$$p dp = m d\varepsilon; \quad dp = \frac{m d\varepsilon}{p}; \quad dp = \frac{m d\varepsilon}{\sqrt{2m\varepsilon}}. \quad (2.7)$$

Подставив (2.7) в $dN(p)$, получим число состояний, приходящихся на энергетический интервал от ε до $\varepsilon + d\varepsilon$:

$$dN(\varepsilon) = \frac{2\pi(2m)^{3/2} V \sqrt{\varepsilon}}{h^3} d\varepsilon. \quad (2.8)$$

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

$$g(\varepsilon) = \frac{2\pi(2m)^{3/2} V \sqrt{\varepsilon}}{h^3}. \quad (2.9)$$

Поскольку каждому квантовому состоянию с импульсом p и энергией ε соответствуют два возможных направления спина частицы, число

квантовых состояний следует удвоить, поэтому функция $g(\varepsilon)$ будет иметь вид

$$g(\varepsilon) = \frac{4\pi(2m)^{3/2}V}{h^3} \sqrt{\varepsilon}. \quad (2.10)$$

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

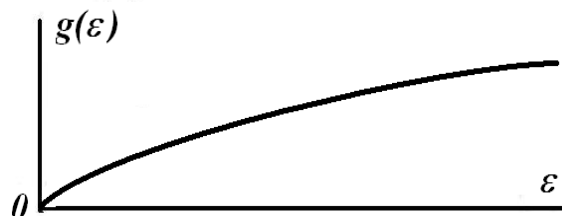


Рис. 9

2.2. Распределение электронов по энергиям в металле

Рассмотрим распределение электронов по энергиям в металле. Для простоты будем считать, что кусок металла имеет единичный объем, т. е. $V = 1$. Согласно подразд. 1.3

$$dn(\varepsilon) = g(\varepsilon)\bar{n}(\varepsilon)d\varepsilon. \quad (2.11)$$

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

$$dn(\varepsilon) = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \cdot \frac{\sqrt{\varepsilon}}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}} + 1} d\varepsilon. \quad (2.12)$$

Величина

$$f(\varepsilon) = \frac{dn(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \cdot \frac{\sqrt{\varepsilon}}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}} + 1} \quad (2.13)$$

называется *функцией распределения электронов по энергиям в металле*. Она равна среднему числу электронов в единичном интервале энергий, взятом около энергии ε . Построим график функции

$$f(\varepsilon) = \frac{dn(\varepsilon)}{d\varepsilon}.$$

При $T = 0$ К и $\varepsilon < \mu$ величина $\bar{n}(\varepsilon) = 1$, а $f(\varepsilon) = g(\varepsilon)$. При $T = 0$ К и $\varepsilon > \mu$ величина $\bar{n}(\varepsilon) = 0$, а $f(\varepsilon) = 0$. Таким образом, график функции $f(\varepsilon)$ имеет вид, приведенный на рис. 10.

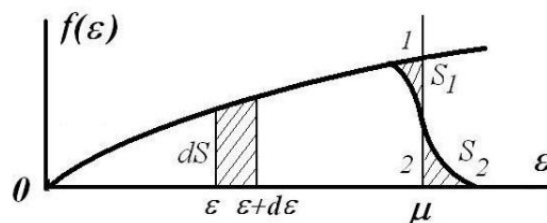


Рис. 10

Выберем на оси ε участок $d\varepsilon$ около какой-нибудь энергии ε и подсчитаем площадь заштрихованной полоски. Для бесконечно малого основания $d\varepsilon$ эту полоску можно считать прямоугольником с основанием $d\varepsilon$ и высотой $\frac{dn(\varepsilon)}{d\varepsilon}$. Тогда площадь этой полоски $\frac{dn(\varepsilon)}{d\varepsilon} \cdot d\varepsilon = dn(\varepsilon)$. Результат имеет простой физический смысл: площадь заштрихованной полоски равна числу электронов в единице объема, имеющих энергию от ε до $\varepsilon + d\varepsilon$. Нетрудно видеть, что площадь под всей кривой равна числу электронов в 1 м^3 , имеющих любые энергии от 0 до μ , т. е. равна концентрации электронов в металле. Если концентрацию обозначить через n , то

$$n = \int_0^{\mu} g(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^{\mu} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon. \quad (2.14)$$

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

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

Отсюда

$$\mu = \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{2/3}. \quad (2.15)$$

Полученный результат показывает, что при абсолютном нуле уровень Ферми, совпадающий с максимальной энергией электронов ε_{\max} , определяется только концентрацией электронов.

Теперь рассмотрим распределение электронов по энергиям при $T > 0 \text{ К}$ (рис. 10). Заметим, что качественно такую зависимость можно построить как произведение графика $g(\varepsilon)$ на график $\bar{n}(\varepsilon)$ при $T > 0 \text{ К}$ (рис. 10, кривая 2). Из графика видно, что имеется некоторое число электронов с энергиями большими, чем энергия уровня Ферми. Так как площадь под кривой по-прежнему есть концентрация n электронов в металле (которая считается независимой от температуры), очевидно, что за уровень Ферми перешли электроны, которые лежат 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 $T = 0 \text{ К}$.

Вычисленный в этом разделе уровень Ферми (2.15) соответствует $T = 0$. При температуре, отличной от нуля, более точный расчет дает для уровня Ферми в металле выражение

$$\mu = \mu_0 \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\mu_0} \right)^2 \right], \quad (2.16)$$

где μ_0 – уровень Ферми при $T = 0$. Добавочный член $(kT/\mu_0)^2 \ll 1$.

2.3. 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 $dn(\varepsilon)$ электронов, имеющих энергию от ε до $\varepsilon + d\varepsilon$. Тогда $\varepsilon \cdot dn(\varepsilon)$ – суммарная энергия этих dn электронов. Чтобы подсчитать энергию всех электронов в единице объема необходимо проинтегрировать $\varepsilon \cdot dn(\varepsilon)$ по энергии от 0 до μ . Разделив полную энергию электронов на их концентрацию, получим для средней энергии одного электрона

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{n} \frac{4\pi(2m)^{3/2}}{h^3} \int_0^{\mu} \varepsilon^{3/2} d\varepsilon = \frac{3}{5} \frac{h^2}{2m} \left(\frac{3n}{8\pi} \right)^{3/2} = \frac{3}{5} \mu. \quad (2.17)$$

Таким образом, квантовая теория дает среднюю энергию электрона в металле $\bar{\varepsilon} = \frac{3}{5} \mu$ при $T=0$ К, а классическая статистика в этом случае дала бы $\bar{\varepsilon} = 0$. Более точный расчет для температур, отличных от нуля, дает

$$\bar{\varepsilon} = \frac{3}{5} \mu_0 \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\mu_0} \right)^2 \right]. \quad (2.18)$$

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

Контрольные вопросы

1. В чем заключается классическая электронная теория металлов?
2. В чем состоит квантовая теория металлов («модель свободных электронов»)?
3. Что такое плотность состояний?
4. Какой объем импульсного пространства приходится в квантовой механике на одно квантовое состояние?

5. В чем заключается соотношение неопределенностей Гейзенберга?
6. Какой вид имеет распределение электронов по энергиям в металле?

3. ФОТОННЫЙ ГАЗ КАК ПРИМЕР КВАНТОВОЙ СТАТИСТИКИ БОЗЕ–ЭЙНШТЕЙНА. 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 достаточно сложен. В нем имеются составляющие всех частот от 0 до ∞ . Основная задача при изучении такой системы состоит в том, чтобы определить, как энергия этого излучения распределена по различным частотам или длинам волн. Для того чтобы применить к решению этой задачи статистику Бозе–Эйнштейна, будем рассматривать электромагнитное излучение в полости, как газ невзаимодействующих фононов, имеющих энергию $\varepsilon = h\nu$ и импульс $p = h\nu/c$, где h – постоянная Планка, ν – частота, c – скорость света в вакууме.

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

$$dE(\nu, T) = f(\nu, T) d\nu, \quad (3.1)$$

где $f(\nu, T)$ – некоторая функция, зависящая от частоты и температуры. Эта величина называется *функцией распределения энергии излучения по частоте*. Из (3.1) имеем

$$f(\nu, T) = \frac{dE(\nu, T)}{d\nu}. \quad (3.2)$$

Из (3.2) видно, что функция распределения численно равна энергии излучения, приходящейся на единичный интервал частот, взятый около некоторой частоты ν . Эту функцию называют *спектральной плотностью излучения*.

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

$$f(\nu, T) = g(\nu) \cdot \bar{n}(\varepsilon) \cdot h\nu, \quad (3.3)$$

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

$$\frac{4\pi p^2 dp}{h^3} V. \quad (3.4)$$

Учитывая, что в каждом состоянии с импульсом p фотон может иметь два различных направления поляризации, выражение (3.4) должно быть удвоено. Подставляя в (3.4) импульс фотона $p = h\nu/c$, получим

$$g(\nu) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} V. \quad (3.5)$$

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

$$\bar{n}(\varepsilon) = \frac{1}{\frac{\varepsilon - \mu}{e^{kT}} - 1}. \quad (3.6)$$

Учитывая, что для фононов $\mu = 0$, и подставляя в (3.6) энергию фотона $\varepsilon = h\nu$, получим

$$\bar{n} = \frac{1}{\frac{h\nu}{e^{kT}} - 1}. \quad (3.7)$$

Подставляя (3.5) и (3.7) в (3.3), получим выражение для функции распределения энергии излучения по частоте

$$f(\nu, T) = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \cdot \frac{1}{\frac{h\nu}{e^{kT}} - 1}. \quad (3.8)$$

Это и есть известная формула Планка для равновесного теплового излучения (для простоты в (3.8) положено $V = 1$).

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

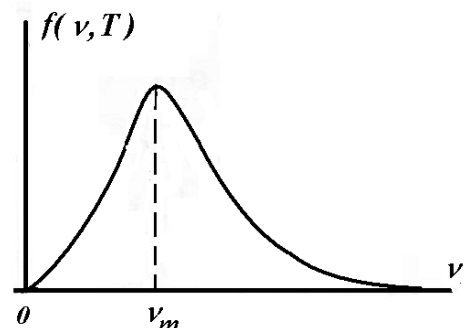


Рис. 11

3.1. Законы излучения абсолютно черного тела

Получим известные из раздела «Квантовая оптика» курса общей 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 считать электромагнитное излучение исходящим из полос-

ти, то это излучение можно рассматривать как излучение абсолютно черного тела. Формула Планка (3.8) дает распределение энергии по частотам при излучении абсолютно черного тела.

Определим внутреннюю энергию фотонного газа U , приходящуюся на единицу объема полости,

$$U = \int_0^{\infty} f(\nu, T) d\nu. \quad (3.9)$$

Подставляя (3.8) в (3.9) и вынося постоянные за знак интеграла, получим

$$U = \frac{8\pi h}{c^3} \cdot \int_0^{\infty} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} d\nu. \quad (3.10)$$

Для вычисления интеграла, стоящего в выражении (3.10), произведем замену переменных, введя новую переменную:

$$z = \frac{h\nu}{kT}, \Rightarrow \nu = \frac{kT}{h} z, \Rightarrow d\nu = \frac{kT}{h} dz. \quad (3.11)$$

Подставляя (3.11) в (3.10), получим

$$U = \frac{8\pi k^4 T^4}{c^3 h^3} \int_0^{\infty} \frac{z^3}{e^z - 1} dz. \quad (3.12)$$

Интеграл, стоящий в (3.12), является табличным и равен $\pi^4/15$. Подставляя его значение, получим

$$U = \frac{8\pi^5 k^4}{15c^3 h^3} T^4. \quad (3.13)$$

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

$$U = \sigma' T^4. \quad (3.14)$$

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» курса общей физики известно, что плотность потока энергии равна

$$R = 1/4 cU. \quad (3.15)$$

Множитель $1/4$ появляется вследствие того, что не все фотоны в полости движутся по направлению к отверстию.

Подставляя (3.14) в (3.15) и обозначив

$$\sigma = \frac{1}{4} \cdot \frac{8\pi^5 k^4}{15c^2 h^3} = 5,7 \cdot 10^{-8} \text{ Вт/м}^2 \text{К}^4,$$

получим $R = \sigma T^4$.

Это и есть известный закон Стефана–Больцмана.

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

$$\lambda = \frac{c}{\nu}; \quad f(\lambda, T) = f(\nu, T) \Big|_{\nu=c/\lambda} \cdot \left| \frac{d\nu}{d\lambda} \right|. \quad (3.16)$$

Учитывая это, получим после подстановки (3.16) в (3.8)

$$f(\lambda, T) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{e^{hc/\lambda kT} - 1}. \quad (3.17)$$

Для нахождения λ_{\max} необходимо исследовать функцию $f(\lambda, T)$ на максимум, т. е. взять производную по λ и приравнять ее нулю:

$$\frac{df(\lambda, T)}{d\lambda} = 8\pi hc \left\{ -\frac{5}{\lambda^6} \cdot \frac{1}{e^{hc/kT\lambda} - 1} + \frac{hce^{hc/kT\lambda}}{\lambda^7 kT \left(e^{hc/kT\lambda} - 1 \right)^2} \right\} = 0. \quad (3.18)$$

Введем новую переменную $x = hc/kT\lambda$, тогда из (3.18) получим трансцендентное уравнение $xe^x = 5e^x - 5$, решение которого дает $x = 4,9650$. Отсюда

$$\frac{hc}{kT\lambda_{\max}} = 4,9650. \quad (3.19)$$

Подставляя в (3.19) численные значения h , c и k , получим (λ_{\max} в метрах)

$$\lambda_{\max} = \frac{2,9 \cdot 10^{-3}}{T}. \quad (3.20)$$

Это и есть известный закон Вина. Из (3.20) следует, что длина волны λ_{\max} , на которую приходится максимум излучения, обратно пропорциональна температуре (рис. 12).

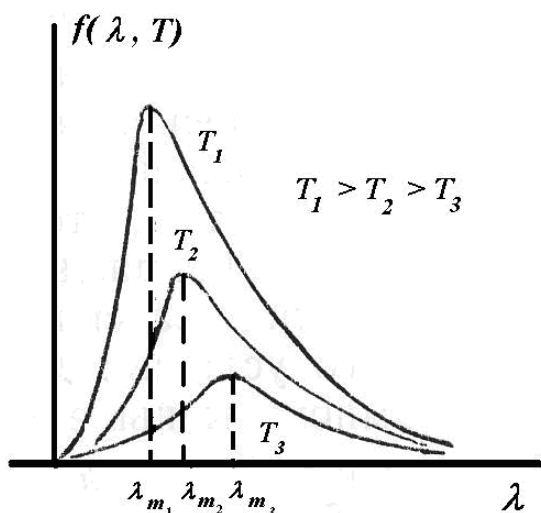


Рис. 12

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

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = \sigma'VT^3. \quad (3.21)$$

Полное число частиц фотонного газа может быть найдено из условия

$$N = \int_0^{\infty} \bar{n}(\varepsilon)g(\nu)d\nu. \quad (3.22)$$

Подставляя $g(\nu)$ из (3.5) и $\bar{n}(\varepsilon)$ из (3.7) в (3.22), получим

$$N = \frac{8\pi V}{c^3} \int_0^{\infty} \frac{\nu^2}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} d\nu. \quad (3.23)$$

Если число фотонов N остается постоянным, то, выполняя интегрирование в (3.23), получаем следующую связь между объемом и температурой для фотонного газа:

$$VT^3 = \text{const}. \quad (3.24)$$

Контрольные вопросы

1. Что такое функция распределения энергии излучения по частоте?
2. В чем состоит закон Стефана–Больцмана?
3. 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, рассмотрим 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 Бройля частицы должна быть намного меньше среднего расстояния между частицами:

$$\left(\frac{V}{N}\right)^{1/3} \gg \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}}; \quad \frac{n^{1/3}h}{\sqrt{2\pi mkT}} \ll 1, \quad \text{где } n = \frac{N}{V}. \quad (4.1)$$

Подставим в (4.1) 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 значения в (4.1), получим $\frac{n^{1/3}h}{\sqrt{2\pi mkT}} \approx 10^{-3} \ll 1$. 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 $dn(\varepsilon)$ среднее число молекул, энергия которых лежит в интервале от ε до $\varepsilon + d\varepsilon$. Для определения этой величины необходимо знать число квантовых состояний, приходящихся на этот интервал энергий и среднее число молекул в данном квантовом состоянии. Тогда

$$dn(\varepsilon) = \bar{n}(\varepsilon)g(\varepsilon)d\varepsilon. \quad (4.2a)$$

Число квантовых состояний в интервале $d\varepsilon$ может быть записано как $g(\varepsilon)d\varepsilon$, где $g(\varepsilon)$ – плотность состояний, вычисленная в разд. 2:

$$g(\varepsilon) = \frac{2\pi V}{h^3}(2m)^{3/2}\sqrt{\varepsilon}, \quad (4.3)$$

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

$$\bar{n}(\varepsilon) = e^{\frac{\mu-\varepsilon}{kT}}. \quad (4.4)$$

Подставляя (4.4) и (4.3) в (4.2а), получим

$$dn(\varepsilon) = \frac{2\pi V}{h^3}(2m)^{3/2}\sqrt{\varepsilon} e^{\frac{\mu-\varepsilon}{kT}} d\varepsilon. \quad (4.2б)$$

Для определения μ воспользуемся условием

$$N = \int_0^{\infty} dn(\varepsilon), \quad (4.5)$$

где N – полное число молекул газа. Подставляя (4.2б) в (4.5), получим

$$N = \frac{2\pi V}{h^3}(2m)^{3/2} e^{\frac{\mu}{kT}} \int_0^{\infty} \sqrt{\varepsilon} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} d\varepsilon. \quad (4.6)$$

Интеграл, стоящий в (4.6), является табличным

$$\int_0^{\infty} \sqrt{\varepsilon} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} d\varepsilon = \frac{\sqrt{\pi}}{2} (kT)^{3/2}. \quad (4.7)$$

Подставляя (4.7) в (4.6), получим

$$N = \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} V e^{\frac{\mu}{kT}}. \quad (4.8)$$

Обозначая $n = N/V$, из (4.8) получаем выражение для μ :

$$\mu = kT \ln \left[n \left(\frac{h^2}{2\pi mkT} \right)^{3/2} \right]. \quad (4.9)$$

Подставляя (4.9) в (4.2а), получим

$$dn(\varepsilon) = \frac{2N}{\sqrt{\pi}(kT^3)} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} \sqrt{\varepsilon} d\varepsilon. \quad (4.10)$$

Функция

$$f(\varepsilon) = \frac{dn(\varepsilon)}{N d\varepsilon} \quad (4.11)$$

называется *функцией распределения молекул газа по энергиям*. Из (4.11) видно, что $f(\varepsilon)$ определяет относительное число молекул газа, энергии которых лежат в единичном энергетическом интервале, взятом около некоторой энергии ε . Сравнивая (4.11) и (4.10), получаем

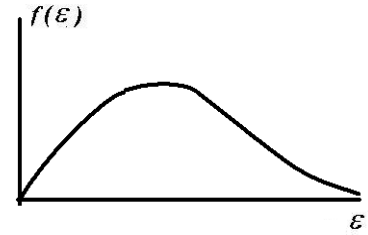


Рис. 13

$$f(\varepsilon) = \frac{2}{\sqrt{\pi}(kT)^{3/2}} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} \sqrt{\varepsilon}. \quad (4.12)$$

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

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

Условие

$$\int_0^{\infty} f(\varepsilon) d\varepsilon = 1 \quad (4.13)$$

называется *условием нормировки*.

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

$$e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} \gg 1. \quad (4.14)$$

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

$$e^{-\frac{\mu}{kT}} \gg 1. \quad (4.15)$$

Из (4.8) имеем

$$e^{\frac{\mu}{kT}} = n \left(\frac{h^2}{2\pi mkT} \right)^{3/2}. \quad (4.16)$$

Подставляя (4.16) в (4.15), получим

$$e^{-\frac{\mu}{kT}} \gg 1; \quad n \left(\frac{h^2}{2\pi mkT} \right)^{3/2} \ll 1 \Rightarrow \frac{n^{1/3} h}{\sqrt{2\pi mkT}} \ll 1.$$

Следовательно, условие (4.1) доказано.

4.2. Распределение молекул по скоростям

Зная распределение молекул по энергиям, легко получить распределение молекул по скоростям. Для этого в (4.10) следует выразить энергию через скорость, а именно

$$\varepsilon = \frac{mv^2}{2}; \quad v = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m}}; \quad d\varepsilon = mv \, dv. \quad (4.17)$$

Подставляя (4.17) в (4.10), получим $dn(v) = \frac{2N}{\sqrt{\pi}(kT)^{3/2}} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} \cdot v \sqrt{\frac{m}{2}} \cdot mv \, dv$,

или
$$dn(v) = 4\pi N \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} v^2 \, dv. \quad (4.18)$$

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

$$f(v) = \frac{dn(v)}{N \, dv}. \quad (4.19)$$

Из (4.19) видно, что $f(v)$ определяет относительное число молекул, скорости которых лежат в единичном интервале, взятом около некоторой скорости v . Сравнивая (4.19) и (4.18), получим

$$f(v) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} v^2. \quad (4.20)$$

График этой функции для различных температур приведен на рис. 14. На этом рисунке через v_B обозначена наиболее вероятная скорость, т. е. скорость, при которой функция распределения достигает максимума.

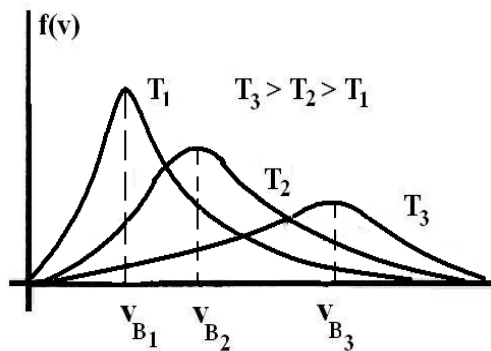


Рис. 14

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

$$\int_0^{\infty} f(v) \, dv = 1. \quad (4.21)$$

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, необходимо исследовать $f(v)$ на максимум, т. е. продифференцировать функцию $f(v)$ по v и приравнять производную нулю. Согласно (4.20) имеем

$$\frac{df(v)}{dv} = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \left(-\frac{m}{2kT} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} v^2 \cdot 2v + e^{-\frac{mv^2}{2kT}} \cdot 2v \right) = 0 \Rightarrow v_B = \sqrt{\frac{2kT}{m}}. \quad (4.22)$$

Среднеарифметическая скорость \bar{v}

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

$$\bar{v} = \frac{n_1 v_1 + n_2 v_2 + \dots + n_k v_k}{n_1 + n_2 + \dots + n_k} = \frac{n_1 v_1 + n_2 v_2 + \dots + n_k v_k}{N}, \quad (4.23)$$

где k – число групп молекул, а N – полное число молекул газа. Из (4.23) имеем

$$\bar{v} = \sum_{i=1}^k v_i \frac{n_i}{N} = \sum_{i=1}^k v_i f_i, \quad (4.24)$$

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 (4.24) 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

$$\bar{v} = \int_0^{\infty} v f(v) dv. \quad (4.25)$$

Подставляя (4.20) в (4.25), получим

$$\bar{v} = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} v^3 e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv. \quad (4.26)$$

Интеграл, стоящий в выражении (4.26) относится к интегралам Пуассона

вида $\int_0^{\infty} e^{-\alpha x^2} x^{2n+1} dx = \frac{n!}{2\alpha^{n+1}}$. В нашем случае $n = 1$, $\alpha = \frac{m}{2kT}$. Отсюда

$$\int_0^{\infty} v^3 e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv = \frac{1}{2 \left(\frac{m}{2kT} \right)^2}. \quad (4.27)$$

Подставляя (4.27) в (4.26), получим

$$\bar{v} = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}. \quad (4.28)$$

Среднеквадратичная скорость $v_{\text{СК}}$

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

$$v_{\text{СК}} = \sqrt{\overline{v^2}}, \quad (4.29)$$

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

$$\overline{v^2} = \int_0^{\infty} v^2 f(v) dv. \quad (4.30)$$

После подстановки (4.20) в (4.30) имеем

$$\overline{v^2} = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} v^4 e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv. \quad (4.31)$$

Интеграл в (4.31) относится к табличным интегралам Пуассона:

$$\int_0^{\infty} e^{-\alpha x^2} x^{2n} dx = \frac{(2n-1)}{2^{n+1}} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^{2n+1}}}.$$

В нашем случае $\alpha = \frac{m}{2kT}$, $n = 2$. Тогда

$$\int_0^{\infty} v^4 e^{-\frac{mv^2}{2kT}} dv = \frac{3}{8} \sqrt{\frac{\pi}{\left(\frac{m}{2kT}\right)^5}}; \quad (4.32)$$

$$\overline{v^2} = \frac{3kT}{m}. \quad (4.33)$$

Подставляя (4.33) в (4.29), получим

$$v_{\text{ск}} = \sqrt{\frac{3kT}{m}}. \quad (4.34)$$

В дальнейшем при изучении столкновений молекул друг с другом нам понадобится еще одна средняя скорость. Это средняя относительная скорость молекул $\overline{v}_{\text{отн}}$. Рассмотрим две молекулы, движущиеся в идеальном газе со скоростями v_1 и v_2 . Очевидно, что для столкновения 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 $\overline{v}_{\text{отн}}$. Не будем здесь приводить подробный расчет для $\overline{v}_{\text{отн}}$, а укажем лишь результат. Расчет показывает, что

$$\overline{v}_{\text{отн}} = \sqrt{2} \overline{v}. \quad (4.35)$$

4.4. Средняя энергия, приходящаяся на одну степень свободы молекулы

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

$$\overline{\varepsilon}_{\text{пост}} = \int_0^{\infty} \varepsilon f(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (4.36)$$

Подставляя (4.12) в (4.36) и вынося постоянные за знак интеграла, получим

$$\overline{\varepsilon}_{\text{пост}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}(kT)^{3/2}} \int_0^{\infty} \varepsilon^{3/2} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} d\varepsilon. \quad (4.37)$$

Введем новую переменную $x = \frac{\varepsilon}{kT}$. Тогда

$$\varepsilon^{3/2} = (kT)^{3/2} x^{3/2}; \quad d\varepsilon = kT dx. \quad (4.38)$$

Подставляя (4.38) в (4.37), получим

$$\bar{\varepsilon}_{\text{пост}} = \frac{2}{\sqrt{\pi}(kT)^3} (kT)^{3/2} \int_0^{\infty} x^{3/2} e^{-x} dx. \quad (4.39)$$

Интеграл, стоящий в (4.39), является табличным:

$$\int_0^{\infty} x^{3/2} e^{-x} dx = \frac{3}{4} \sqrt{\pi}. \quad (4.40)$$

Подставляя (4.40) в (4.39), получим

$$\bar{\varepsilon}_{\text{пост}} = \frac{3}{2} kT. \quad (4.41)$$

Как видно из (4.41), средняя кинетическая энергия поступательного движения молекул идеального газа не зависит от его природы и определяется только абсолютной температурой T . Используя (4.41), 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, так как ее положение полностью определяется тремя координатами. При этом 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 $\bar{\varepsilon}_{\text{пост}}/3$.

Используя (4.41), получим, что на каждую степень свободы молекулы в среднем приходится энергия $kT/2$.

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

$$\bar{\varepsilon} = \frac{i}{2} kT. \quad (4.42)$$

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 не-

взаимодействующих молекул, энергия каждой из которых равна ε , внутренняя энергия

$$U = N\bar{\varepsilon}, \quad (4.43)$$

где N – полное число молекул газа. Учитывая, что

$$N = \frac{M}{\mu} N_a \quad (4.44)$$

(M – масса газа, μ – масса киломоля, N_a – число Авогадро), и подставляя (4.44) в (4.43), получим

$$U = \frac{M}{\mu} N_a \cdot \frac{i}{2} kT = \frac{i}{2} \frac{M}{\mu} RT.$$

Здесь использовано соотношение $kN_a = R$, 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 стенки сосуда, передавая им импульс. Импульс, переданный стенке за 1 с, численно равен силе, действующей на стенку, а сила, отнесенная к единице площади стенки, и есть давление.

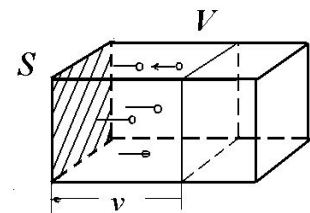


Рис. 15

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

$$f(v) = f(-v). \quad (4.45)$$

Поскольку функция распределения определяет относительное число частиц, имеющих скорость вблизи v , то (4.45) означает, что среднее число частиц, двигающихся вдоль некоторого направления и против него, одинаково.

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

$$\Delta p = \frac{1}{6} nvS \cdot 2mv = \frac{1}{3} nSmv^2. \quad (4.46)$$

Это выражение является неточным, так как при выводе его предполагалось, что все молекулы движутся с одинаковой скоростью v . Для того чтобы исправить (4.46), следует усреднить это выражение по всем возможным скоростям молекул. Будем изображать усреднение чертой сверху:

$$\overline{\Delta p} = \frac{1}{3} \overline{nSmv^2} = \frac{1}{3} nSm \overline{v^2}, \quad (4.47)$$

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

$$P = \frac{\overline{f}}{S}. \quad (4.48)$$

Подставляя (4.48) в (4.47), получим

$$P = \frac{1}{3} nm \overline{v^2}. \quad (4.49)$$

Умножив и разделив (4.49) на 2 и обозначив $\overline{\epsilon}_{\text{пос}} = \frac{m \overline{v^2}}{2}$, получим

$$P = \frac{2}{3} n \overline{\epsilon}_{\text{пос}}. \quad (4.50)$$

Это и есть основное уравнение кинетической теории газов. Оно связывает давление – микроскопическую величину, относящуюся ко всей системе в целом, – с концентрацией и средней кинетической энергией поступательного движения молекул газа, которые являются микроскопическими величинами.

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

$$\bar{\epsilon}_{\text{пос}} = \frac{3}{2}kT. \quad (4.51)$$

Подставим (4.51) в (4.50) и умножим равенство (4.50) на объем V :

$$PV = VnkT = NkT. \quad (4.52)$$

Поскольку

$$N = N_a \frac{M}{\mu}, \quad (4.53)$$

подставляя (4.53) в (4.52) и заменяя $N_a k = R$, получим уравнение состояния идеального газа

$$PV = \frac{M}{\mu}RT, \quad (4.54)$$

где R – универсальная газовая постоянная.

Основное уравнение кинетической теории газов иногда записывают в несколько ином виде. Учитывая, что $\bar{\epsilon}_{\text{пос}} = \frac{3}{2}kT$, и подставляя в (4.50), получим $P = nkT$.

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 \bar{v} среднюю скорость молекул, а через \bar{z} среднее число столкновений за 1 с, то

$$\bar{\lambda} = \frac{\bar{v}}{\bar{z}}. \quad (4.55)$$

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

Для расчета числа столкновений, которые испытывают молекулы за 1 с, представим молекулы в виде твердых сфер диаметра d . Две молекулы, следовательно, не могут приблизиться друг к другу на расстояние, меньшее d , если расстояние между молекулами отсчитывать от центров сфер. Будем следить за одной молекулой, считая остальные неподвижными. По отношению к ним данная молекула будет двигаться с

относительной скоростью $\bar{v}_{\text{отн}} = \sqrt{2}\bar{v}$. За 1 с данная молекула пройдет

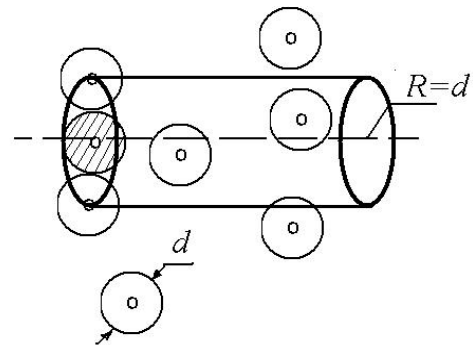


Рис. 16

путь, равный $\sqrt{2} \bar{v}$, и столкнется со всеми молекулами, центры которых лежат внутри цилиндра радиуса $R = d$ и длины $\sqrt{2} \bar{v}$ (рис. 16). Число таких молекул равно $n \pi d^2 \sqrt{2} \bar{v}$, где n – концентрация молекул газа, а $\pi d^2 \sqrt{2} \bar{v}$ – объем цилиндра. Таким образом, число столкновений за 1 с равно

$$\bar{z} = \sqrt{2} \bar{v} n \pi d^2. \quad (4.56)$$

Подставляя (4.56) в (4.55), получим

$$\bar{\lambda} = \frac{1}{\sqrt{2} n \pi d^2}. \quad (4.57)$$

Величина $\sigma_{eff} = \pi d^2$ называется *эффективным сечением молекулы*. Тогда

$$\bar{\lambda} = \frac{1}{\sqrt{2} n \sigma_{eff}}. \quad (4.58)$$

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 σ_{eff} и размеры молекул.

4.7. Явления переноса

До сих пор рассматривался 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 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 в равновесном состоянии не происходит.

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

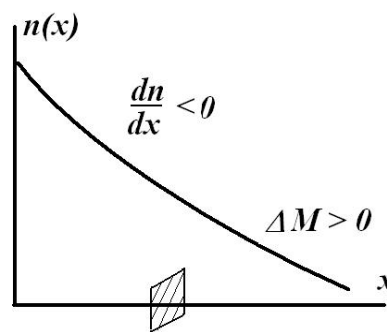


Рис. 17

Основной закон диффузии имеет следующий вид:

$$\delta M = -D \frac{dn}{dx}, \quad (4.59)$$

где δM – поток массы газа, проходящий за единицу времени через единичную площадку, расположенную перпендикулярно направлению x ;

D – коэффициент диффузии; $\frac{dn}{dx}$ – так называемый градиент концентраций молекул, показывающий, как быстро меняется концентрация молекул примеси на единицу длины вдоль направления x . Знак « $-$ » указывает на то, что поток массы δM направлен в сторону уменьшения концентрации: при $\frac{dn}{dx} < 0$ поток массы $\delta M > 0$, и наоборот. Окончательно

основной закон диффузии можно сформулировать следующим образом: поток массы газа примеси, проходящий за единицу времени через единичную площадку, прямо пропорционален градиенту примеси.

Теплопроводность

Пусть в некотором газе температура не одинакова 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:

$$Q = -\chi \frac{dT}{dx}, \quad (4.60)$$

где Q – поток тепла, т. е. количество тепла, протекающее за единицу времени через единичную площадку, расположенную перпендикулярно направлению x ; dT/dx – градиент температуры; χ – коэффициент теплопроводности. Знак « \rightarrow » указывает на то, что поток тепла идет в сторону убывания температуры: при $dT/dx < 0$ поток тепла $Q > 0$, и наоборот.

Соотношение (4.60) можно сформулировать следующим образом: количество теплоты, 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 тепла вдоль некоторого направления x . Пусть различные слои газа движутся с различными скоростями u . Обозначим через z направление, перпендикулярное 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 скорости слоев. Это явление получило название внутреннего трения, или вязкости. Сила внутреннего трения определяется следующим соотношением:

$$f = \eta \frac{du}{dz} S, \quad (4.61)$$

где η – коэффициент внутреннего трения (вязкости); S – площадь соприкосновения слоев; $\frac{du}{dz}$ – градиент скорости слоев, взятый в направлении, перпендикулярном к движению слоев. Соотношение (4.61) можно

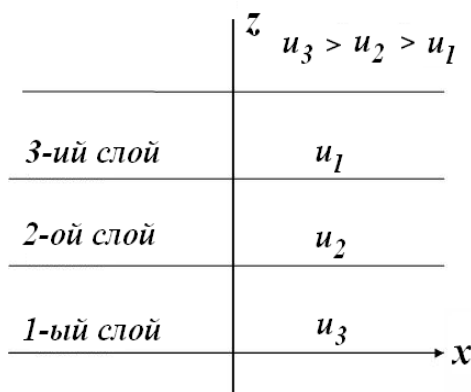


Рис. 18

сформулировать следующим образом: сила внутреннего трения пропорциональна градиенту скорости слоев и площади их соприкосновения.

Соотношения (4.59)–(4.61) 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 , χ , η , 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, 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 при движении 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 второй 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 $\Delta k_2 = \frac{1}{6} n \bar{v} S m u_2$.

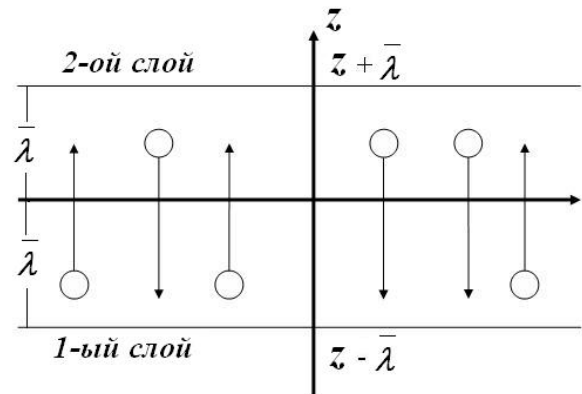
Изменения количества движения 1-го и 2-го слоев выражаются соответственно:

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

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

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

$$f_1 = \frac{\Delta k^{(1)}}{\Delta t} = \frac{1}{6} n m \bar{v} S (u_2 - u_1); \quad f_2 = \frac{\Delta k^{(2)}}{\Delta t} = \frac{1}{6} n m \bar{v} S (u_1 - u_2). \quad (4.62)$$



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

Рис. 19

Для вычисления разности $u_2 - u_1$ заметим, что скорость слоев в действительности изменяется в направлении z не скачком, а непрерывно. В этом случае в качестве скоростей u_1 и u_2 следует брать скорости, которые имели молекулы на расстоянии, не 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 направленного 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:

$$u_2 = u(z + \bar{\lambda}) = u_z + \frac{du}{dz} \cdot \bar{\lambda}; \quad u_1 = u(z - \bar{\lambda}) = u_z - \frac{du}{dz} \cdot \bar{\lambda}; \quad (4.63)$$

$$u_2 - u_1 = 2 \frac{du}{dz} \cdot \bar{\lambda}.$$

Подставляя (4.63) в (4.62), получим

$$f = \frac{1}{3} n \bar{v} m \bar{\lambda} \frac{du}{dz} S. \quad (4.64)$$

Сравнивая (4.64) с (4.61), получим

$$\eta = \frac{1}{3} n \bar{v} m \bar{\lambda} = \frac{1}{3} \rho \bar{v} \bar{\lambda}, \quad (4.65)$$

где ρ – плотность газа.

Аналогичный расчет позволяет получить и основные законы диффузии и теплопроводности и вычислить коэффициенты D и χ .

Контрольные вопросы

1. Что такое идеальный газ?
2. Какие характерные скорости движения молекул вы знаете?
3. Какова средняя энергия, приходящаяся на одну степень свободы молекулы?
4. Что такое внутренняя энергия газа?
5. В чем состоит основное уравнение кинетической теории газов?
6. Что такое средняя длина свободного пробега?

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

5. СТАТИСТИКА ЭЛЕКТРОНОВ И ДЫРОК В ПОЛУПРОВОДНИКАХ

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 ($\Delta E < 1$ 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 по величине заряду электрона. При рассмотрении процессов, происходящих в валентной зоне, удобно считать, что в ней имеются только дырки.

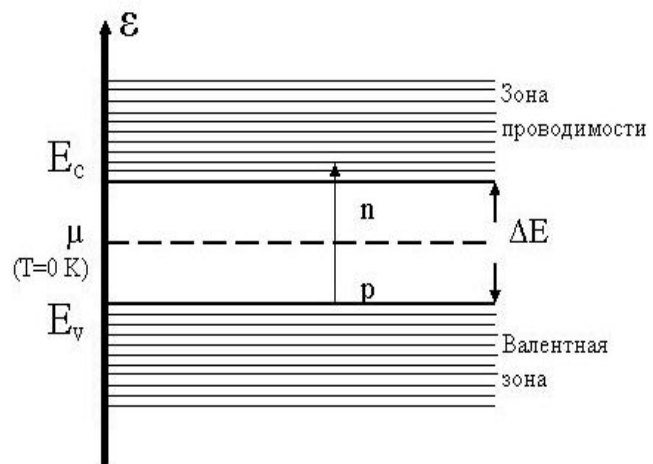


Рис. 20

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_n^* и концентрацией n находятся в зоне проводимости; дырки с эффективной массой m_p^* и концентрацией p – в валентной зоне; электроны в зоне проводимости и дырки в валентной зоне можно рассматривать как свободные частицы с энергиями:

для электронов

$$\varepsilon = E_c + \frac{p^2}{2m_n^*};$$

для дырок

$$\varepsilon = E_v - \frac{p^2}{2m_p^*},$$

где p – импульс электрона или дырки; E_c – энергия, соответствующая дну зоны проводимости; E_v – энергия, соответствующая верху валентной зоны (рис. 20).

5.1. Собственные полупроводники

Собственным называется полупроводник, в котором отсутствуют примеси, т. е. 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 перехода электронов из валентной зоны в зону проводимости. Ясно, что при этом число электронов n равно числу дырок p :

$$n = p. \quad (5.1)$$

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 $d\varepsilon$, взятый около некоторой энергии ε , и определим среднее число электронов $dn(\varepsilon)$, имеющих энергию в этом интервале, т. е. от ε до $\varepsilon + d\varepsilon$. Согласно (1.11), разд. 1,

$$dn(\varepsilon) = \bar{n}(\varepsilon)g(\varepsilon)d\varepsilon. \quad (5.2)$$

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

$$g(\varepsilon) = 4\pi \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon}; \quad \varepsilon = \frac{p^2}{2m}. \quad (5.3)$$

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:

$$\varepsilon = E_c + \frac{p^2}{2m_n^*}. \quad (5.4)$$

С учетом этого в выражении (5.3) следует m заменить на m_n^* , а ε – на $\varepsilon - E_c$. Тогда плотность состояний для электронов в зоне проводимости будет иметь вид

$$g(\varepsilon) = 4\pi \left(\frac{2m_n^*}{h^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon - E_c}. \quad (5.5)$$

Что касается $\bar{n}(\varepsilon)$, то оно зависит от того типа статистики, которому подчиняется поведение свободных электронов в полупроводнике. Для выяснения этого вопроса воспользуемся критерием вырождения (формула (1.27), разд. 1). Для перехода к классической статистике необходимо выполнение условия

$$\left(\frac{V}{N} \right)^{3/2} \gg \frac{h}{\sqrt{2\pi mkT}}. \quad (5.6)$$

Опыт показывает, что при температурах, близких к комнатной, $n = N/V \approx 10^{18} \text{ м}^{-3}$. Подставляя в (5.6) $m = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ кг}$, $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ Дж/К}$, $T = 300 \text{ К}$, получим, что условие невырожденности выполняется. Это означает, что при комнатных температурах к электронам в полупроводнике может быть применена классическая статистика Максвелла–Больцмана. В этом случае (формула (1.26), разд. 1)

$$\bar{n}(\varepsilon) = e^{\frac{\mu - \varepsilon}{kT}}. \quad (5.7)$$

Электронный газ, подчиняющийся классической статистике Максвелла–Больцмана, называется *невырожденным*, а полупроводники – *невырожденными* полупроводниками. Подставляя (5.7) и (5.5) в (5.2), имеем

$$dn(\varepsilon) = 4\pi \left(\frac{2m_n^*}{h^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon - E_c} \cdot e^{\frac{\mu - \varepsilon}{kT}} d\varepsilon. \quad (5.8)$$

Функция $\rho_n(\varepsilon) = dn(\varepsilon)/d\varepsilon$ называется *функцией распределения электронов в зоне проводимости по энергии*. Согласно (5.8)

$$\rho_n(\varepsilon) = 4\pi \left(\frac{2m_n^*}{h^2} \right)^{3/2} \sqrt{\varepsilon - E_c} \cdot e^{\frac{\mu - \varepsilon}{kT}}. \quad (5.9)$$

Функция распределения (5.9) определяет среднее число электронов, имеющих энергию в единичном энергетическом интервале, взятом около энергии ε в зоне проводимости.

Для вычисления концентрации электронов n в зоне проводимости следует выражение (5.8) проинтегрировать по энергии:

$$n = \int_{E_c}^{\infty} dn(\varepsilon) = \int_{E_c}^{\infty} \rho_n(\varepsilon) d\varepsilon = 4\pi \left(\frac{2m_n^*}{h^2} \right)^{3/2} e^{\frac{\mu}{kT}} \int_{E_c}^{\infty} \sqrt{\varepsilon - E_c} e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} d\varepsilon. \quad (5.10)$$

Интегрирование следовало бы проводить по всем энергиям, начиная от дна зоны проводимости E_c до верхнего края зоны проводимости $E_{c \max}$. Однако поскольку электроны находятся только вблизи дна зоны проводимости, расширение верхнего предела интегрирования до ∞ не меняет значения интеграла. Интеграл в (5.10) вычисляется следующим образом.

Введем новую переменную $E = \varepsilon - E_c$. Тогда

$$e^{-\frac{\varepsilon}{kT}} = e^{-\frac{E+E_c}{kT}} = e^{-\frac{E_c}{kT}} \cdot e^{-\frac{E}{kT}}; \quad dE = d\varepsilon. \quad (5.11)$$

Подставляя (5.11) в (5.10) и меняя пределы интегрирования, получим

$$n = 4\pi \left(\frac{2m_n^*}{h^2} \right)^{3/2} e^{\frac{\mu - E_c}{kT}} \int_0^{\infty} \sqrt{E} \cdot e^{-\frac{E}{kT}} dE. \quad (5.12)$$

Интеграл, стоящий в (5.12), является табличным:

$$\int_0^{\infty} \sqrt{E} e^{-\frac{E}{kT}} dE = \frac{\sqrt{\pi}}{2} (kT)^{3/2}. \quad (5.13)$$

Подставляя (5.13) в (5.12), получим

$$n = 2 \left(\frac{2\pi m_n^* kT}{h^2} \right)^{3/2} \cdot e^{-\frac{E_c - \mu}{kT}}, \quad (5.14)$$

или

$$n = N_c \cdot e^{-\frac{E_c - \mu}{kT}}; \quad N_c = 2 \left(\frac{2\pi m_n^* kT}{h^2} \right)^{3/2}. \quad (5.15)$$

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 ε . Среднее число дырок $dp(\varepsilon)$, имеющих энергию в интервале от ε до $\varepsilon + d\varepsilon$ равно

$$dp(\varepsilon) = \bar{p}(\varepsilon) g_p(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (5.16)$$

где $g_p(\varepsilon)$ – плотность дырочных состояний в валентной зоне; $\bar{p}(\varepsilon)$ – среднее число дырок в квантовом состоянии с энергией ε . Энергия дырки вблизи верха валентной зоны может быть записана в виде

$$\varepsilon = E_v - \frac{p^2}{2m_p^*}, \quad (5.17)$$

где E_v – энергия верха валентной зоны.

Для определения $g_p(\varepsilon)$ вспомним, что дырки вблизи верха валентной зоны 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 сде-

лано выше при вычислении $g(\varepsilon)$, получим

$$g_p(\varepsilon) = 4\pi \left(\frac{2m_p^*}{h^2} \right)^{3/2} \sqrt{E_v - \varepsilon}. \quad (5.18)$$

Согласно (1.18), разд. 1, $\bar{p}(\varepsilon)$ совпадает с вероятностью обнаружить дырку в состоянии с энергией ε . Вероятность того, что на уровне с энергией ε в валентной зоне находится дырка, равна вероятности того, что на этом уровне отсутствует электрон:

$$\bar{p}(\varepsilon) = 1 - \bar{n}(\varepsilon) = 1 - \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} + 1} = \frac{1}{1 + e^{-\frac{\varepsilon - \mu}{kT}}} \approx \frac{1}{e^{-\frac{\varepsilon - \mu}{kT}}} = e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}}. \quad (5.19)$$

Подставляя (5.19) и (5.18) в (5.16), получим

$$dp(\varepsilon) = 4\pi \left(\frac{2m_p^*}{h^2} \right)^{3/2} e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} \sqrt{E_v - \varepsilon} d\varepsilon. \quad (5.20)$$

Функция $\rho_p(\varepsilon) = dp(\varepsilon)/d\varepsilon$ называется *функцией распределения дырок по энергиям в валентной зоне*. Учитывая (5.20), получим

$$\rho_p(\varepsilon) = 4\pi \left(\frac{2m_p^*}{h^2} \right)^{3/2} e^{\frac{\varepsilon - \mu}{kT}} \sqrt{E_v - \varepsilon}. \quad (5.21)$$

Для определения концентрации дырок p в валентной зоне следует проинтегрировать (5.21) от дна валентной зоны $E_{v\min}$ до ее вершины E_v . Однако, учитывая, что дырки лежат вблизи E_v , можно нижний предел интегрирования распространить до $-\infty$ без изменения величины интеграла:

$$p = \int_{-\infty}^{E_v} dp(\varepsilon) = \int_{-\infty}^{E_v} \rho_p(\varepsilon) d\varepsilon = 4\pi \left(\frac{2m_p^*}{h^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{\mu - E_v}{kT}} \int_{-\infty}^{\varepsilon} \sqrt{E_v - \varepsilon} e^{\frac{\varepsilon}{kT}} d\varepsilon. \quad (5.22)$$

Для вычисления интеграла в (5.22) введем новую переменную $E = E_v - \varepsilon$. Тогда

$$dE = -d\varepsilon, \quad e^{\frac{\varepsilon}{kT}} = e^{\frac{E_v - E}{kT}}. \quad (5.23)$$

Подставляя (5.23) в (5.22), получим

$$p = -4\pi \left(\frac{2m_p^*}{h^2} \right)^{3/2} e^{\frac{E_v - \mu}{kT}} \int_0^{\infty} E^{1/2} e^{-\frac{E}{kT}} dE = \frac{\sqrt{\pi}}{2} (kT)^3. \quad (5.24)$$

Подставляя (5.24) в (5.22), получим

$$p = 2 \left(\frac{2\pi m_p^* kT}{h^2} \right)^{3/2} e^{\frac{E_v - \mu}{kT}}; \quad p = N_v e^{\frac{E_v - \mu}{kT}}, \quad (5.25)$$

где

$$N_v = 2 \left(\frac{2\pi m_p^* kT}{h^2} \right)^{3/2}. \quad (5.26)$$

5.2. Положение уровня Ферми в собственном полупроводнике

Выражения, полученные в подразд. 5.1, позволяют определить положение уровня Ферми в собственном полупроводнике. Для этого воспользуемся тем, что в таком полупроводнике число электронов в зоне проводимости равно числу дырок в валентной зоне. При этом, учитывая (5.15) и (5.25), имеем

$$N_c e^{\frac{\mu - E_c}{kT}} = N_v e^{-\frac{\mu - E_v}{kT}}. \quad (5.27)$$

Решая это уравнение относительно μ , получаем

$$\mu = \frac{E_c + E_v}{2} - \frac{kT}{2} \ln \frac{N_c}{N_v} = \frac{E_c + E_v}{2} - \frac{kT}{2} \ln \left(\frac{m_n^*}{m_v^*} \right)^{3/2}. \quad (5.28)$$

Это соотношение и определяет положение уровня Ферми в собственном полупроводнике. При $T = 0$ К уровень Ферми проходит посередине запрещенной зоны. При возрастании температуры уровень Ферми немного сдвигается, но этот сдвиг имеет величину $\sim kT$. Учитывая, что ширина запрещенной зоны $E_g \gg kT$, можно сделать вывод, что и при $T \neq 0$ К уровень Ферми находится вблизи середины запрещенной зоны.

Подставляя (5.28) в (5.14) и (5.25), получим

$$n = p = N_0 e^{-\frac{\Delta E}{2kT}}, \quad (5.29)$$

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

Проводимость собственного полупроводника

Полная проводимость σ полупроводника складывается из проводимости σ_n , создаваемой электронами, и проводимости σ_p , создаваемой дырками: $\sigma = \sigma_n + \sigma_p$. Так как $\sigma_n = e\mu_n n$, а $\sigma_p = e\mu_p p$, с учетом соотношения $n = p$ имеем

$$\sigma = en(\mu_n + \mu_p). \quad (5.30)$$

Здесь μ_n и μ_p – подвижности электронов и дырок соответственно.

Учитывая (5.29), из (5.31) получим

$$\sigma = \sigma_0 e^{-\frac{\Delta E}{kT}}, \quad (5.31)$$

где $\sigma_0 = eN_0(\mu_n + \mu_p)$. Из (5.31) следует, что проводимость собственного полупроводника определяется шириной запрещенной зоны ΔE и температурой. При увеличении температуры проводимость полупроводника увеличивается, а, следовательно, сопротивление падает. Эти полупроводники коренным образом отличаются от металлов, сопротивление которых растет с увеличением температуры.

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

5.3. Примесные уровни

Рассмотрим теперь, как на свойства полупроводника влияет 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 и 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. Как расчет, так и опыт показывают, что при этом 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 **большого** радиуса, которая может охватывать десятки и сотни атомов основного вещества. При этом все происходит так, как будто электрон в атоме примеси вокруг ядра не в вакууме, а в некоторой среде, состоящей из атомов основного вещества. То, что было сказано выше, можно проиллюстрировать на простом расчете, который основан на элементарной квантовой теории атома водорода, данной Бором.

Проведем расчет на примере германия (Ge), в который введена примесь мышьяка (As). Германий находится в четвертом столбце таблицы Менделеева и имеет четыре валентных электрона. В чистом Ge эти четыре

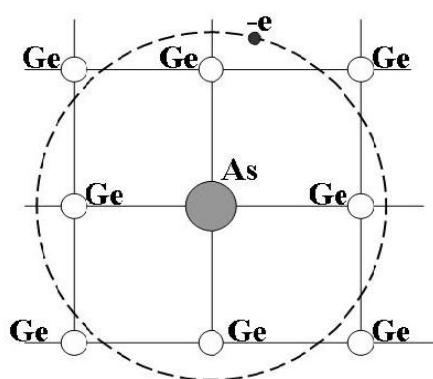


Рис. 21

электрона образуют ковалентные связи, которые и связывают атомы Ge в кристаллическую решетку (рис. 21). На этом рисунке светлыми кружками обозначены атомы Ge в узлах кристаллической решетки, а линиями – ковалентные связи, в образовании которых участвуют два электрона. Что произойдет, если в одном из узлов решетки заменить атом Ge атомом As, который находится в пятом столбце таблицы Менделеева

и, следовательно, имеет пять валентных электронов? При этом четыре электрона будут участвовать в образовании ковалентных связей, а пятый будет «лишним». Как уже говорилось, можно считать, что этот электрон движется в среде, составленной из атомов основного вещества.

Рассчитаем энергетические уровни примесного атома As. Пусть основное вещество (Ge) имеет диэлектрическую проницаемость ϵ_{oc} . Вследствие того что «лишний» валентный электрон движется в поле, создаваемом положительным ионом с зарядом Ze и остальными $Z-1$ электронами, потенциальная энергия этого электрона будет

$$V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_{oc}r},$$

т. е. в ϵ_{oc} раз меньше, чем для свободного атома. Знак «-» связан с тем, что потенциальная энергия электрона, удаленного на большое расстояние от примесного атома, принята за 0. Полная энергия лишнего электрона примесного атома будет складываться из его кинетической и потенциальной энергии

$$E = \frac{p^2}{2m_n^*} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_{oc}r}. \quad (5.32a)$$

Здесь учтено, что электрон, двигающийся в решетке, ведет себя как частица с эффективной массой m_n^* .

При движении электрона по круговой орбите в поле заряда $+e$ выполняется 2-й закон Ньютона:

$$\frac{m_n^*v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_{oc}r^2}, \quad (5.32б)$$

так как кулоновская сила, связывающая электрон и ядро, является в данном случае центростремительной силой. Учитывая (5.32б), запишем выражение для $\frac{p^2}{2m_n^*}$:

$$\frac{p^2}{2m_n^*} = \frac{m_n^*v^2}{2} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0\epsilon_{oc}r}.$$

Тогда из (5.32a) выразим полную энергию лишнего электрона примесного атома

$$E = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0\epsilon_{oc}r}. \quad (5.32в)$$

Полная энергия электрона E лишнего примесного атома равна половине потенциальной. Из постулатов Бора известно, что для электрона на стационарной орбите радиусом r должно быть выполнено условие $m_n^*vr_n = nh/2\pi$, где n – целое число. Комбинируя это условие с условием (5.32б), получаем значения радиусов стационарных орбит

$$r_n = \frac{\epsilon_0 \epsilon_{oc} n^2 h^2}{m_n^* e^2}. \quad (5.32г)$$

Видно, что радиус орбит электрона атома примеси, находящегося в полупроводнике, в ϵ_{oc} раз больше радиусов орбит изолированного атома (рис. 21). Кроме того, радиус орбиты электрона в примесном атоме зависит от эффективной массы электрона. Во многих материалах (Ge, Si) эффективная масса электрона достаточно мала, что также приводит к увеличению радиуса орбиты.

Из (5.32в) с учетом (5.32г) легко показать, что энергия ионизации атома примеси, находящегося в полупроводнике, в ϵ_{oc}^2 раз меньше, чем энергия ионизации этого же атома в свободном состоянии. Вследствие большого значения диэлектрической проницаемости полупроводниковых материалов ($\epsilon_{oc} = 16$ для Ge и $\epsilon_{oc} = 12$ для Si) и малости эффективной массы электрона в этих материалах энергия ионизации атома примеси составляет сотые доли вольта. Очевидно, что в рамках данной модели энергия ионизации практически не зависит от типа примесного атома, а определяется параметрами основного материала. Опыт показывает, что это действительно имеет место. Значения энергии ионизации (в эВ) различных донорных атомов в Ge и Si приведены в табл. 5.1.

	P	As	Sb
Si	0,044	0,049	0,039
Ge	0,0120	0,0127	0,0096

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 проводимости. На зонной диаграмме этот электрон находится в зоне проводимости. Таким образом, ионизация атома примеси есть не что иное, как перевод электрона с примесного уровня в зону проводимости. Поскольку на этот перевод нужно затратить

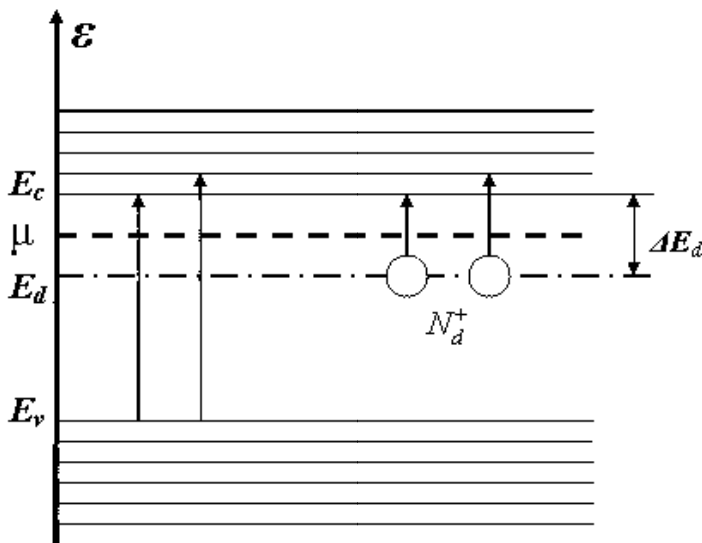


Рис. 22

уровня в зону проводимости. Поскольку на этот перевод нужно затратить

энергию, равную энергии ионизации, электрон в зоне проводимости имеет энергию **бóльшую**, чем на примесном уровне. 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 1 эВ, а энергия ионизации составляет сотые доли электронвольта, можно сделать вывод: примесный уровень лежит в запрещенной зоне вблизи дна зоны проводимости (рис. 22).

Обычно при комнатной температуре 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 *донорных примесей*.

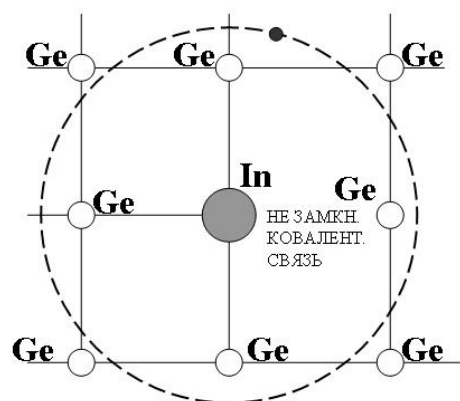
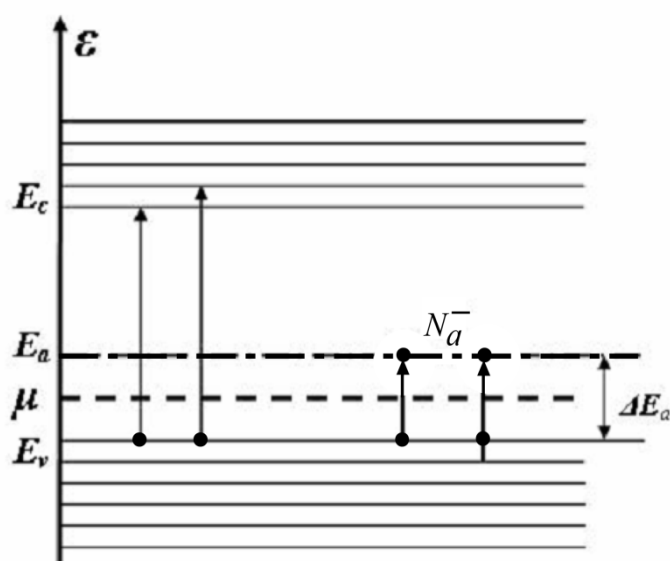


Рис. 23



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 происходит, если в кристаллической решетке германия один атом Ge заменить атомом In (рис. 23)? Атом In находится в третьем столбце таблицы Менделеева и, следовательно, имеет три валентных электрона.

Четвертая связь оказывается незавершенной из-за отсутствия четвертого электрона у индия. Но отсутствие электрона есть не что иное, как наличие 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).

5.4. 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:

$$n = N_c e^{-\frac{E_c - \mu}{kT}} ; \quad p = N_v e^{-\frac{\mu - E_v}{kT}} . \quad (5.33)$$

Эти соотношения позволяют найти n и p при условии, что положение уровня Ферми μ 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, которое 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 $-e(n + N_a^-)$. Положительный заряд создается дырками в валентной зоне p и ионизованными атомами донорной примеси N_d^+ . Суммарный положительный заряд равен $e(p + N_d^+)$. Приравнивая полный положительный и отрицательный заряды и сокращая на e , получим уравнение электронейтральности

$$n + N_a^- = p + N_d^+. \quad (5.34)$$

Для того чтобы из этого уравнения рассчитать положение уровня Ферми, следует выразить 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 μ . Для этого нужно прежде всего знать функцию распределения электронов по примесным состояниям. Не будем здесь приводить подробный расчет, в результате которого получается эта функция распределения. Отметим только, что используя известный в статистической физике метод Гиббса для систем с переменным числом частиц, можно получить следующее выражение для функции распределения электронов по примесным состояниям:

$$f = \frac{1}{\frac{1}{g_i} e^{\frac{E_i - \mu}{kT}} + 1}. \quad (5.35)$$

Здесь обозначено: E_i – энергия i -го примесного уровня; f – вероятность нахождения электрона 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 $g_i = 1/2$.

Таким образом, вероятность обнаружить электрон на донорном уровне определяется соотношением

$$f = \frac{1}{\frac{1}{2} e^{\frac{E_d - \mu}{kT}} + 1}, \quad (5.36)$$

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 определяется выражением

$$f_p = 1 - f = \frac{1}{2e^{\frac{\mu - E_d}{kT}} + 1}. \quad (5.37)$$

Если имеется N_d примесных донорных атомов, то число ионизованных донорных атомов N_d^+ выразим в виде

$$N_d^+ = N_d \cdot f_p = \frac{N_d}{2e^{\frac{\mu - E_d}{kT}} + 1}. \quad (5.38)$$

Аналогично вероятность обнаружения электрона на акцепторном уровне выразим так:

$$f = \frac{1}{2e^{\frac{E_a - \mu}{kT}} + 1}. \quad (5.39)$$

Вероятность обнаружить дырку на акцепторном уровне выразим в виде

$$f_p = 1 - f = \frac{1}{\frac{1}{2}e^{\frac{\mu - E_a}{kT}} + 1}. \quad (5.40)$$

Так как вероятность ионизации акцепторного уровня равна вероятности обнаружить электрон на акцепторном уровне, число нонизированных акцепторных атомов примеси выразим в виде

$$N_a^- = N_a \cdot f = \frac{1}{2e^{\frac{E_a - \mu}{kT}} + 1}. \quad (5.41)$$

Итак, все величины, входящие в уравнение электронейтральности (5.34), выражены через уровень Ферми.

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

$$n = p + N_d^+. \quad (5.42)$$

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 p электронов, перешедших с донорных уровней. В результате этого образовалось N_d^+ 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 ΔE , тогда как для перевода электрона с примесного уровня в зону проводимости нужна энергия E_d , которая значительно меньше ΔE , поэтому при низкой температуре основную роль будут играть переходы «примесь – зона», а следовательно, можно положить $p \ll N_d^+$. В этом случае уравнение электронейтральности (5.42) будет иметь простой вид

$$n = N_d^+. \quad (5.43)$$

Это равенство означает, что все электроны в зоне проводимости созданы только за счет переходов «примесь–зона». Подставим в уравнение (5.43) n и N_d^+ , выраженные через уровень Ферми μ , получим

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

Рассмотрим случай таких низких температур, что выполнено условие

$$\mu - E_d \gg kT \Rightarrow e^{\frac{\mu - E_d}{kT}} \gg 1.$$

В этом случае уравнение электронейтральности принимает вид

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

Решая это уравнение относительно μ , получим

$$\mu = \frac{E_c + E_d}{2} + \frac{kT}{2} \ln \left(\frac{N_d}{2N_c} \right). \quad (5.44)$$

Если $T = 0$ К, то $\mu = \frac{E_c + E_d}{2}$. Следовательно, при абсолютном нуле температуры уровень Ферми лежит посередине между дном зоны проводимости и примесным уровнем.

Рассмотрим 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 закону

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

При низких температурах $N_c < N_d$ и уровень Ферми с ростом температуры растет, так как $\ln(N_d/2N_c) > 0$. При дальнейшем повышении температуры, когда N_c возрастает настолько, что N_d становится меньше $2N_c$, логарифм в выражении для μ меняет знак и уровень Ферми начинает падать с увеличением температуры. При $N_d = 2N_c$ уровень Ферми проходит опять посередине между E_c и E_d . При более высоких температурах, как нетрудно видеть, уровень Ферми будет стремиться к тому положению, которое он должен занимать в собственном полупроводнике. Действительно, при высоких температурах, когда донорные примеси полностью ионизованы, начинают существенную роль играть переходы «зона–зона». При достаточно высокой температуре p станет больше N_d^+ , уравнение электронейтральности будет иметь вид $n = p$.

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

$$n = N_c e^{-\frac{E_c - \mu}{kT}}; \quad (5.45)$$

$$\mu = \frac{E_c + E_d}{2} + \frac{kT}{2} \ln \left(\frac{N_d}{2N_c} \right). \quad (5.46)$$

Подставив (5.46) в (5.45), получим

$$n = \sqrt{\frac{N_c N_d}{2}} e^{-\frac{\Delta E_d}{2kT}}, \quad (5.47)$$

где $\Delta E_d = E_c - E_d$.

Прологарифмировав выражение (5.47), получим

$$\ln n = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{N_c N_d}{2} \right) - \frac{\Delta E_d}{2kT}. \quad (5.48)$$

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

Перейдем теперь к рассмотрению полупроводника с акцепторной примесью. Не будем полностью проводить подробный расчет, так как решение задачи нахождения уровня Ферми в данном случае 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

$$p = n + N_a^- \quad (5.49)$$

Если температуры настолько низки, что $E_a - \mu \gg kT$, т. е. $e^{\frac{E_a - \mu}{kT}} \gg 1$, то уравнение электронейтральности приобретает вид

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

Решая это уравнение относительно μ , получим

$$\mu = \frac{E_v + E_a}{2} - \frac{kT}{2} \ln\left(\frac{N_a}{2N_v}\right). \quad (5.50)$$

Если $T = 0$ К, то $\mu = \frac{E_v + E_a}{2}$. Следовательно, 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 анализу донорных примесей, показывает, что при увеличении температуры уровень Ферми сначала падает, т. е. приближается к вершине валентной зоны, затем опять растет и при $N_a = 2N_v$ опять проходит посередине между E_v и E_a , а затем при дальнейшем увеличении температуры стремится к положению, которое занимает уровень Ферми в собственном полупроводнике. Это происходит при таких температурах, когда основную роль начинают играть переходы «зона – зона». При этом в уравнении электронейтральности можно пренебречь N_a^- по сравнению с n . Тогда $N_a^- \ll n$ и $n = p$.

Наконец, коротко рассмотрим случай, когда в полупроводнике имеются примеси обоих типов с концентрациями N_d и N_a . Если $N_d = N_a$ (такой полупроводник называется *скомпенсированным*), то уровень Ферми лежит почти посредине запрещенной зоны, т. е. там же, где и в собственном полупроводнике. Если же преобладает примесь одного вида, например N_d , то величина $N'_d \equiv N_d - N_a$ играет такую же роль, как и примесь одного вида. При этом уровень Ферми будет при $T = 0$ совпадать с уровнем той примеси, которой больше (в данном случае донорной примеси). Если N_d и N_a отличаются очень сильно (например, $N_d \gg N_a$), то полупроводник ведет себя как полупроводник с одним типом примеси.

Контрольные вопросы

1. Какова рассматриваемая модель полупроводника?
2. Что такое «дырка»?
3. Какие полупроводники называются собственными?
4. Где лежит уровень Ферми на энергетической схеме собственного полупроводника при $T = 0$?
5. Что такое донорные и акцепторные примеси?
6. Где лежат примесные уровни и уровень Ферми на энергетической схеме примесного полупроводника?

Список литературы

1. *Ландау, Л. Д.* Статистическая физика. Ч. 1 / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – 3-е изд. – М., 1976.
2. *Лифшиц, Е. М.* Статистическая физика. Ч. 2 / Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. – М., 1978.
3. Физический энциклопедический словарь. – М. : Сов. энциклопедия, 1983.
4. Физика микромира. Маленькая энциклопедия. – М. : Сов. энциклопедия, 1980.
5. *Савельев, И. В.* Курс общей физики : учебник. – М. : Наука; Главная редакция физико-математической литературы издательства, 1977. – Т. 1; 1979. – Т. 3.

Содержание

Предисловие.....	3
1. Основные положения статистической физики.....	4
1.1. Предмет и метод статистической физики.....	–
1.2. Тожественность частиц. Два типа квантовых статистик.....	5
1.3. Функция распределения.....	6
1.4. Квантовая статистика Ферми–Дирака.....	11
1.5. Квантовая статистика Бозе–Эйнштейна.....	12
1.6. Классическая статистика Максвелла–Больцмана.....	13
Контрольные вопросы.....	16
2. Электроны в металле как пример квантовой статистики Ферми–Дирака.....	17
2.1. Плотность состояний.....	18
2.2. Распределение электронов по энергиям в металле.....	21
2.3. Средняя энергия электронов в металле.....	23
Контрольные вопросы.....	–
3. Фотонный газ как пример квантовой статистики Бозе–Эйнштейна. Формула Планка.....	24
3.1. Законы излучения абсолютно черного тела.....	25
Контрольные вопросы.....	28
4. Идеальный газ молекул как пример классической статистики Максвелла–Больцмана.....	29
4.1. Распределение молекул газа по энергиям.....	–
4.2. Распределение молекул по скоростям.....	32
4.3. Характерные скорости молекул газа.....	–
4.4. Средняя энергия, приходящаяся на одну степень свободы молекулы.....	35
4.5. Основное уравнение кинетической теории газов.....	37
4.6. Средняя длина свободного пробега молекул.....	39
4.7. Явления переноса.....	40
Контрольные вопросы.....	44
5. Статистика электронов и дырок в полупроводниках.....	45
5.1. Собственные полупроводники.....	46
5.2. Положение уровня Ферми в собственном полупроводнике.....	50
5.3. Примесные уровни.....	51
5.4. Положение уровня Ферми в примесном полупроводнике.....	56
Контрольные вопросы.....	61
Список литературы.....	62

**Ковнацкий Александр Менделевич
Матюшичев Юрий Федорович**

**ЭЛЕМЕНТЫ
СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ**

Учебное пособие

Редактор И. И. Щенсяк

План 2010 г., п. 92

Подписано к печати 30.12.2010
Объем 4,0 усл.-печ. л. Тираж 500 экз. Зак. 104

Издательство «Теледом» ГОУВПО СПбГУТ. 191186 СПб., наб. р. Мойки, 61
Отпечатано в ГОУВПО СПбГУТ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО СВЯЗИ
ГОСУДАРСТВЕННОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВЫСШЕГО ПРОФЕССИОНАЛЬНОГО ОБРАЗОВАНИЯ
«САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ТЕЛЕКОММУНИКАЦИЙ
им. проф. М. А. БОНЧ-БРУЕВИЧА»

А. М. Ковнацкий, Ю. Ф. Матюшичев

ЭЛЕМЕНТЫ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Учебное пособие

Санкт-Петербург
2010

