

Ֆերմի-Դիրակի վիճակագրությունը և լիցքակիրների բաշխումը պինդ մարմիններում

Քոչարյան Վիլեն

Հանգուցային բառեր. էլեկտրոնների համակարգ, բաշխման ֆունկցիա, էներոպիա, էլեկտրաքիմիական պոտենցիալ, Ֆերմիի մակարդակ, մետաղ, կիսահաղորդիչ

Քվանտային ֆիզիկայում էլեկտրոնների և այլ միկրոմասնիկների դիրքը և վարքը ներկայացվում է Շրեդինգերի հավասարումով, որը միկրոմասնիկի վարքը և էներգիան նկարագրում է միայն հավանականության մեթոդներով: Հետևաբար, համակարգում ըստ էներգետիկ վիճակների էլեկտրոնների բաշխումը նույնպես պետք է նկարագրվի վիճակագրական մեթոդներով [1, 85]:

Քվանտային տեսությունում կիրառվում է Ֆերմի-Դիրակի վիճակագրությունը, որտեղ հաշվի են առնվում էլեկտրոնային համակարգերի քվանտային հատկությունները, ինչով էլ այն տարբերվում է դասական վիճակագրությունից: Ֆերմի-Դիրակի վիճակագրության մեջ ենթադրվում է, որ դիտարկվող համակարգը կազմող էլեկտրոնները անհատականություն չունեն (նույնական մասնիկներ են), այսինքն ցանկացած i -երորդ և k -երորդ էլեկտրոնների դիրքերով փոխանակումը որևէ փոփոխություն չի առաջացնում համակարգում: Բացի այդ, հաշվի է առնվում, որ էլեկտրոնները ենթարկվում են Պաուլիի սկզբունքին [1, 153]:

Ենթադրենք, էլեկտրոնների համակարգում էներգիայի ($E; E + dE$) միջակայքում գոյություն ունեն dZ էլեկտրոնային վիճակներ, որոնցից էլեկտրոններով զբաղված են dn վիճակները (յուրաքանչյուր վիճակում մեկ էլեկտրոն): Էներգետիկ վիճակներում էլեկտրոնների բաշխման ֆունկցիան ցույց է տալիս էներգիայի ($E; E + dE$) միջակայքում ընդհանուր վիճակներից էլեկտրոններով զբաղված վիճակների մասը, և ըստ սահմանման

$$f(E, T) = \frac{dn}{dZ} \quad (1)$$

Պարզ է, որ բաշխման ֆունկցիան կախված է E էներգիայից ու T ջերմաստիճանից և ցույց է տալիս տվյալ ջերմաստիճանում էներգիայի ($E; E + dE$) միջակայքի որևից էներգետիկ վիճակում էլեկտրոնի գտնվելու հավանականությունը:

Ֆերմի-Դիրակի բաշխման $f(E, T)$ ֆունկցիան կարելի է ստանալ էլեկտրոնների պարզագույն համակարգի համար ենթադրելով, որ Z_1 և Z_2 վիճակների թվով E_1 և E_2 էներգետիկ մակարդակներում գտնվում են n_1 և n_2 թվով էլեկտրոններ [3, 45]: Ստացված արդյունքները պահպանում են ընդհանրությունը և կիրառելի են էլեկտրոնների ցանկացած համակարգի դեպքում:

Քանի որ համակարգի էլեկտրոնները նույնական մասնիկներ են, ապա Z_1 և Z_2 վիճակներում n_1 և n_2 թվով էլեկտրոնների բաշխման հնարավոր ձևերի ω_1 և ω_2 թվերը (յուրաքանչյուր վիճակում մեկ էլեկտրոն) հավասար կլինեն Z_1 և Z_2 տարրերից զուգորդություններին՝ համապատասխանաբար ըստ n_1 և n_2 -ի [3, 46]՝

$$\omega_1 = \frac{Z_1!}{n_1!(Z_1 - n_1)!} \quad (2)$$

$$\omega_2 = \frac{Z_2!}{n_2!(Z_2 - n_2)!} \quad (2a)$$

Քանի որ էլեկտրոնների բաշխման հնարավոր ձևերի ω_1 և ω_2 թվերը միմյանցից անկախ են, ապա էներգետիկ այդ մակարդակներում n_1 և n_2 թվով էլեկտրոնների միաժամանակյա գտնվելու հնարավոր ձևերի ω թիվը (բաշխման թերմոդինամիկական հավանականության մեծությունը) հավասար կլինի ω_1 և ω_2 թվերի արտադրյալին՝

$$\omega = \omega_1 \cdot \omega_2 = \frac{Z_1!Z_2!}{n_1!p_1!n_2!p_2!} \quad (3)$$

որտեղ $p_1 = Z_1 - n_1$ և $p_2 = Z_2 - n_2$:

Ենթադրենք, որնիցե գրգռման հետևանքով տեղի է ունենում E_1 մակարդակից E_2 մակարդակ dn_1 թվով էլեկտրոնների հակադարձելի անցում ($dn_2 = -dn_1$), ինչի շնորհիվ համակարգի էներգիայի փոփոխությունը կլինի՝

$$dE = E_2 dn_2 + E_1 dn_1 = (E_1 - E_2) dn_1 \quad (4)$$

Այսպիսի անցման արդյունքում փոխվում է նաև բաշխման թերմոդինամիկական հավանականության ω մեծությունը: Հաշվենք ω -ի լոգարիթմի $d \ln \omega$ փոփոխությունը:

(3)-ից ունենք՝

$$\ln \omega = \ln Z_1! + \ln Z_2! - \ln n_1! - \ln p_1! - \ln n_2! - \ln p_2! \quad (5)$$

Նկատի ունենալով, որ n_1, n_2, p_1 և p_2 մեծությունները ընդունում են միայն ամբողջ արժեքներ և նրանց ամենափոքր փոփոխությունը՝ $dx = 1$, որոշենք $\ln x!$ ֆունկցիայի տարրական աճի հարաբերությունը արգումենտի $dx = 1$ աճին ($x \gg 1$ դեպքում):

$$\frac{d \ln x!}{dx} = \frac{\ln(x+dx)! - \ln x!}{dx} = \frac{1}{dx} \ln \frac{(x+dx)!}{x!} = \ln \frac{(x+1)!}{x!} = \ln(x+1) \approx \ln x$$

Այստեղից՝ $d \ln x! = \ln x dx$ և (5)-ից կունենանք՝

$$\ln \omega = \ln Z_1 dZ_1 + \ln Z_2 dZ_2 - \ln n_1 dn_1 - \ln p_1 dp_1 - \ln n_2 dn_2 - \ln p_2 dp_2 \quad (6)$$

Քանի որ

$$Z_1 = const; Z_2 = const;$$

$$dZ_1 = dZ_2 = 0; dn_2 = -dn_1; dp_1 = -dn_1; dp_2 = dn_1,$$

(6)-ից կստանանք՝

$$d \ln \omega = \ln n_2 dn_1 - \ln n_1 dn_1 + \ln p_1 dn_1 - \ln p_2 dn_1 = \ln \frac{p_1 n_2}{p_2 n_1} dn_1 \quad (7)$$

Ըստ (4)-ի՝ $dE = (E_1 - E_2) dn_1$, հետևաբար

$$\frac{d \ln \omega}{dE} = \frac{1}{E_1 - E_2} \ln \frac{p_1 n_2}{p_2 n_1} = \beta \quad (8)$$

որտեղ β -ն առայժմ անհայտ ինչ-որ մեծություն է:

$$(8)\text{-ից կարող ենք գրել } \beta E_1 - \beta E_2 = \ln \frac{n_2}{p_2} - \ln \frac{n_1}{p_1} \text{ կամ՝}$$

$$\beta E_1 + \ln \frac{n_1}{p_1} = \beta E_2 + \ln \frac{n_2}{p_2} = \beta \varepsilon = const \quad (9)$$

(9)-ից հետևում է, որ $\beta E + \ln \frac{n}{p} = \beta \varepsilon$ մեծությունը հաստատուն է և պահպանվում է [3,48]:

Բաշխման ֆունկցիայի (1) սահմանումից հետևում է, որ

$$n_1 = fZ_1; p_1 = Z_1 - n_1 = (1 - f)Z_1;$$

$$n_2 = fZ_2; p_2 = Z_2 - n_2 = (1 - f)Z_2;$$

Հաշվի առնելով այս առնչությունները և (9)-ում բաց թողնելով ինդեքսները, կստանանք.

$$\beta\varepsilon = \beta E + \ln \frac{fZ}{(1-f)Z}; \text{ կամ } \frac{1}{f} - 1 = e^{\beta(E-\varepsilon)}$$

Այստեղից Ֆերմի-Դիրակի բաշխման $f(E, T)$ ֆունկցիայի համար կստանանք՝

$$f(E, T) = \frac{1}{e^{\beta(E-\varepsilon)} + 1} \quad (10)$$

Որոշենք (10) արտահայտության մեջ մտնող β մեծությունը: Ենթադրենք էլեկտրոնների անցման դիտարկվող պրոցեսը հավասարակշիռ է և ընթանում է հաստատուն T ջերմաստիճանում: Համաձայն թերմոդինամիկայի առաջին սկզբունքի, համակարգի ստացած ջերմության dQ քանակը հավասար է համակարգի ներքին էներգիայի dE փոփոխության և համակարգի կողմից կատարված dA աշխատանքի գումարին [2,44]՝ $dQ = dE + dA$: Այստեղից որոշենք կատարված dA աշխատանքը՝ հաշվի առնելով էնտրոպիայի $dS = \frac{dQ}{T}$ սահմանումը [2, 117] և համարելով $T = const$:

$$dA = TdS - dE = -d(E - TS) = -dF \quad (11)$$

$F = E - TS$ մեծությունը համակարգի ազատ էներգիան է, որը $T = const$ դեպքում հավասարակշռության վիճակում պետք է ունենա մինիմալ արժեք [2,159], այսինքն՝

$$dF = dE - TdS = 0:$$

Այստեղից, հաշվի առնելով (4)-ը, կստանանք

$$dE = (E_1 - E_2)dn_1 = TdS \quad (12)$$

Ինչպես գիտենք [2,130], էնտրոպիան որոշվում է հավանականությունով ($S = k \ln \omega$) և

$$TdS = kTd \ln \omega \quad (13)$$

(13)-ը տեղադրելով (12)-ում և հաշվի առնելով β -ի (8) նշանակումը՝ կստանանք՝

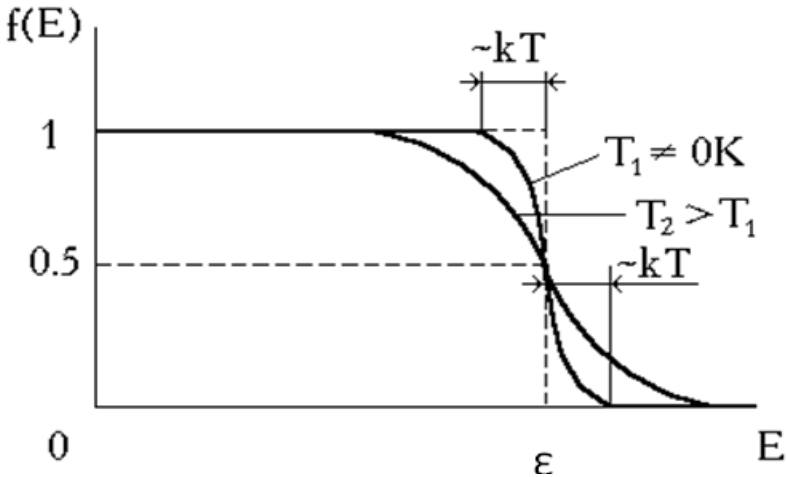
$$\frac{d \ln \omega}{dE} = \beta = \frac{1}{kT} \quad (14)$$

Այսպիսով՝ ստացանք, որ ըստ էներգիաների էլեկտրոնների հավասարակշիռ բաշխման դեպքում Ֆերմի-Դիրակի բաշխման ֆունկցիան ունի հետևյալ տեսքը՝

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\varepsilon}{kT}} + 1} \quad (15)$$

Ֆերմի-Դիրակի բաշխման ֆունկցիայի մեջ մտնող ε մեծությունը ցույց է տալիս այն էներգետիկ մակարդակը, որտեղ էլեկտրոնի գտնվելու հավանականությունը միշտ հավասար է $\frac{1}{2}$ -ի: ε մեծությունը թերմոդինամիկայից հայտնի էլեկտրաքիմիական պոտենցիալն է [2, 156]: ε -ին համապատասխանող էներգետիկ մակարդակը կոչվում է Ֆերմիի մակարդակ:

(15)-ից հետևում է, որ Ֆերմի-Դիրակի բաշխման ֆունկցիան $T = 0$ (ինչպես նաև $T \rightarrow 0$) դեպքում, երբ $E < \varepsilon$ ($e^{\frac{E-\varepsilon}{kT}} \rightarrow e^{-\infty} = 0$)՝ $f(E) = 1$, իսկ $E > \varepsilon$ արժեքների համար՝ ($e^{\frac{E-\varepsilon}{kT}} \rightarrow e^{+\infty} \rightarrow \infty$) $f(E) = 0$, ընդ որում, $T \neq 0$ դեպքում Ֆերմի-Դիրակի ֆունկցիան $f(\varepsilon) = \frac{1}{2}$ արժեքի շուրջն էապես փոփոխվում է մասնիկների էներգիայի հետևյալ միջակայքում $\varepsilon - 2kT < E < \varepsilon + 2kT$: Այս միջակայքից դուրս էներգիայի արժեքների համար, երբ $|E - \varepsilon| > (2 \div 3)kT$, միշտ կարելի է ընդունել $f(E) = 1$ կամ $f(E) = 0$ (նկար1):



Նկար 1. Ֆերմի-Դիրակի բաշխման ֆունկցիան տարբեր ջերմաստիճաններում

Սենյակային ջերմաստիճանում էլեկտրոնների ջերմային շարժման միջին էներգիան՝ $\varepsilon_T \approx kT \approx 0,03$ էՎ: Մետաղներում էլեկտրոնների էներգիայի միջին արժեքը հավասար է $\bar{E} = \frac{3}{5}\varepsilon$ և 5-6 էՎ կարգի մեծությունն է [3, 54], ընդ որում մինչև Ֆերմիի $\varepsilon = 8 \div 9$ էՎ մակարդակը բոլոր էներգետիկ մակարդակներն զբաղված են էլեկտրոններով: Հետևաբար ջերմային շարժման արդյունքում ավելի բարձր՝ էլեկտրոններով չզբաղված էներգետիկ մակարդակներ կարող են անցնել միայն $E \geq \varepsilon - \varepsilon_T$ էներգիայով էլեկտրոնները, որոնք գտնվում են լրացված էներգետիկ մակարդակների վերին՝ $\approx 0,03$ էՎ լայնությամբ շերտում: Այդպիսի էլեկտրոնների քանակը մետաղներում էլեկտրոնների ընդհանուր թվի $(2 \div 3)\%$ -ն է, և միայն այդ էլեկտրոններն են մասնակցում ջերմահաղորդման, էլեկտրահաղորդման և այլ պրոցեսներին, իսկ մնացած $(97 \div 98)\%$ էլեկտրոնները էներգետիկ մակարդակներում մնում են դասավորված՝ ինչպես $T = 0$ դեպքում: Հետևաբար, մետաղներում էլեկտրոնային զազը սենյակային և ավելի բարձր ջերմաստիճաններում մնում է այլասերված, համակարգի էներգիան էապես կախված չէ ջերմաստիճանից, և

ուրեմն, տարբեր կինետիկական պրոցեսներ նկարագրելու համար պետք է կիրառել Ֆերմի-Դիրակի բաշխման ֆունկցիան:

Էլեկտրոնային զագում այլասերումը կվերանա, երբ Ֆերմիի մակարդակը նկատելիորեն ցածր լինի էլեկտրոնի էներգիայի զրոյական մակարդակից (պարզ է, որ այս դեպքում $\varepsilon < 0$), ինչը նշանակում է, որ $-\varepsilon \gg kT; e^{\frac{E-\varepsilon}{kT}} \gg 1$ և

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-\varepsilon}{kT}} + 1} \approx e^{-\frac{E-\varepsilon}{kT}} = e^{\frac{\varepsilon}{kT}} e^{-\frac{E}{kT}} \quad (16)$$

ε մեծության արժեքը այս դեպքում կարելի է որոշել՝ ընդունելով, որ V ծավալուն համակարգի բոլոր էլեկտրոնների թիվը հայտնի է՝

$$N = 2 \int_0^{\infty} f(E) dZ = 2 \int_0^{\infty} f(E) z(E) dE \quad (17)$$

(2 արտադրիչը պայմանավորված է նրանով, որ յուրաքանչյուր մակարդակում կարող են լինել հակառակ ուղղված սպիններով երկու էլեկտրոններ), որտեղ [3,40]

$$dZ = z(E) dE = 2\pi \frac{V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{E} dE \quad (18)$$

Տեղադրելով (16) և (18)-ը (17)-ում, կստանանք $N = 2 \frac{V}{h^3} (2\pi mkT)^{3/2} e^{\frac{\varepsilon}{kT}}$: Այստեղից՝

$$e^{\frac{\varepsilon}{kT}} = \frac{Nh^3}{2V(2\pi mkT)^{3/2}} = \frac{nh^3}{2(2\pi mkT)^{3/2}}$$

($n = \frac{N}{V}$ էլեկտրոնների կոնցենտրացիան է), և հետևաբար՝

$$\varepsilon = kT \cdot \ln \frac{nh^3}{2(2\pi mkT)^{3/2}} \quad (19)$$

$e^{\frac{\varepsilon}{kT}}$ արտահայտությունը տեղադրենք (16)-ում և որոշենք ($E; E + dE$) էներգետիկ միջակայքում էլեկտրոնների dn թիվը՝ հաշվի առնելով (18)-ը:

$$f(E) = e^{\frac{\varepsilon}{kT}} \cdot e^{-\frac{E}{kT}} = \frac{nh^3}{2(2\pi mkT)^{3/2}} e^{-\frac{E}{kT}};$$

$$dn = 2f(E)dZ(E) = \frac{Nh^3}{2V(2\pi mkT)^{3/2}} \cdot e^{-\frac{E}{kT}} \cdot 4\pi \frac{V}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{E} dE$$

Վերջնականապես՝

$$dn = N \frac{2}{\sqrt{\pi}(kT)^{3/2}} e^{-\frac{E}{kT}} \sqrt{E} dE \quad (20)$$

Ստացված (20) բանաձևը մասնիկների՝ ըստ էներգիաների՝ Մաքսվելի դասական բաշխման ֆունկցիան է: Հետևաբար, եթե համակարգը այլասերված չէ, Ֆերմի-Դիրակի քվանտային և Մաքսվելի դասական վիճակագրությունները համընկնում են, և չայլասերված էլեկտրոնային զագի համար կարելի է կիրառել Մաքսվելի դասական վիճակագրությունը:

Այլասերման $-\varepsilon \gg kT$ (կամ $-\frac{\varepsilon}{kT} \gg 1$) պայմանում տեղադրելով \mathcal{E} -ի (19) արժեքը, կստանանք

$$\frac{2(2\pi mkT)^{3/2}}{nh^3} \gg e, \text{ կամ } \frac{2(2\pi mkT)^{3/2}}{nh^3} \gg 1 \quad (21)$$

Այստեղից հետևում է, որ մասնիկների համակարգը կլինի չայլասերված, եթե նրանց m զանգվածը մեծ է, կամ T ջերմաստիճանը շատ բարձր է, իսկ համակարգում մասնիկների n կոնցենտրացիան բավականաչափ փոքր է:

Սովորական մոլեկուլային գազերը նորմալ պայմաններում լիովին բավարարում են վերոհիշյալ պայմաններին, քանի որ նրանց մոլեկուլների զանգվածը համեմատաբար մեծ է, իսկ միավոր ծավալում մասնիկների թիվը (n կոնցենտրացիան) բավականաչափ փոքր է, ուստի այդ գազերի համար կիրառվում է դասական վիճակագրությունը:

Քանի որ էլեկտրոնների զանգվածը շատ փոքր է, իսկ նրանց կոնցենտրացիան մետաղներում մեծ է, ապա մետաղներում էլեկտրոնային գազը այլասերված է և նրա համար կիրառելի է Ֆերմի-Դիրակի քվանտային վիճակագրությունը: Միայն մի քանի տասնյակ հազար ատոմի ծանցում և ավելի բարձր ջերմաստիճաններում է մետաղում էլեկտրոնային գազը դառնում չայլասերված, սակայն այդպիսի ջերմաստիճաններում մետաղներն արդեն հալված են և պինդ վիճակում չեն:

Կիսահաղորդիչների հաղորդականության էլեկտրոնների և խոռոչների համար, չնայած զանգվածների փոքրությանը, սենյակային ջերմաստիճանում արդեն կարելի է կիրառել դասական վիճակագրությունը, քանի որ նրանց կոնցենտրացիան մի քանի կարգով փոքր է մետաղներում էլեկտրոնների կոնցենտրացիայից:

Ընդհանրապես, որպեսզի որոշենք, թե որ վիճակագրությունը պետք է կիրառել սովյալ կոնկրետ դեպքում, անհրաժեշտ է սկզբում որոշել Ֆերմիի \mathcal{E} մակար-

դակը և գնահատել $e^{\frac{E-\mathcal{E}}{kT}}$ մեծությունը: Եթե $e^{\frac{E-\mathcal{E}}{kT}} \gg 1$, ապա այդ համակարգի համար կիրառելի է Մաքսվելլի (կամ Բոլցմանի) դասական վիճակագրությունը,

իսկ հակառակ դեպքում, երբ $e^{\frac{E-\mathcal{E}}{kT}} \leq 1$, անհրաժեշտ է կիրառել Ֆերմի-Դիրակի քվանտային վիճակագրությունը:

ԳՐԱԿԱՆՈՒԹՅՈՒՆ

1. Иродов И. Е. -Квантовая физика, основные законы, Физматлит, М.-С./П., 2001.
2. Ноздрев В. Ф. -Курс термодинамики, изд. «Просвещение», М., 1967.
3. Петровский И. И. -Электронная теория полупроводников, изд. БГУ, Минск, 1973.

Статистика Ферми-Дирака и распределение носителей заряда в твердых телах

Кочарян Вилен

Резюме

Ключевые слова: система электронов, функция распределения, энтропия, электрохимический потенциал, уровень Ферми, металл, полупроводник

В методической работе представлено получение функции распределения Ферми-Дирака, одного из основных распределений квантовой статистики, для простейшей системы электронов, состоящей из двух уровней. Указано, что полученные результаты сохраняют общность и в случае электронов любой системы. Рассмотрены условия перехода из квантовой статистики к классической и получение распределения Максвелла по энергиям из функции Ферми-Дирака. Получены условия, при которых система частиц будет невырожденным: если масса частиц сравнительно велика или температура системы очень высокая, а концентрация частиц в системе мала. Показано, что для молекулярных газов, где массы частиц сравнительно велики и малы концентрации при нормальных условиях применяется классическая статистика. Так как масса электронов очень мала, а их концентрация в металлах высокая, то электронный газ в металлах вырождена и для него применяется квантовая статистика Ферми-Дирака. Для электронов и дырок проводимости полупроводников, несмотря на малость их масс, уже при комнатной температуре нужно применять классическую статистику, так как их концентрация на несколько порядков меньше, чем в металлах.

Fermi-Dirac Statistics and Distribution of Charge Carriers in Solids

Kocharyan Vilen

Summary

Keywords: system of electrons, distribution function, entropy, electrochemical potential, Fermi level, metal, semiconductor

The methodical work presents the derivation of the distribution function of Fermi-Dirac, one of the basic distributions of quantum statistics, for the simplest system of electrons, consisting of two levels. It is indicated that the obtained results remain common in the case of electrons of any system. The conditions for the transition from quantum to classical statistics and obtaining the Maxwell energy distribution from the Fermi-Dirac function are considered. The conditions under which the system of particles will be non-degenerate are obtained: if the mass of particles is relatively high, or the temperature of the system is very high, and the concentration of particles in the system is small. It is shown that for molecular gases, where the masses of particles are relatively large and small concentrations, under normal conditions, classical statistics are used. Since the mass of electrons is very small, and their concentration in metals is high, the electron gas in metals is degenerated, and the Fermi-Dirac quantum statistics are used for it. Despite the smallness of their masses, it is necessary to apply classical statistics at room temperature, for the conductivity of semiconductors in electrons and holes, since their concentration has been several orders of magnitude lower than the concentration of electrons in metals.