

§ 2. Распределение квантовых состояний в зонах

Как показано в гл. III, стационарные состояния электрона в идеальном кристалле характеризуются квазиимпульсом $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ и номером зоны l . При этом объем в зоне Бриллюэна, приходящийся на каждое значение \mathbf{p} , равен $(2\pi\hbar)^3/V$, где V — объем кристалла. Поэтому число квантовых состояний, соответствующее элементу объема в зоне Бриллюэна $d\mathbf{p}$ и рассчитанное на единицу объема кристалла, есть

$$2 \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3/V} \frac{1}{V} = 2 \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3}. \quad (2.1)$$

Здесь множитель 2 учитывает две возможные ориентации спина.

В термодинамическом равновесии вероятность заполнения квантовых состояний зависит только от их энергии E и температуры, поэтому в (2.1) в качестве $d\mathbf{p}$ часто удобно выбирать элемент объема, заключенный между двумя бесконечно близкими изоэнергетическими поверхностями (рис. 5.1). Число квантовых состояний, соответствующих заданному интервалу энергий E , $E + dE$ и по-прежнему рассчитанное на единицу объема кристалла, можно представить в виде $N(E) dE$, где $N(E)$ есть плотность состояний.

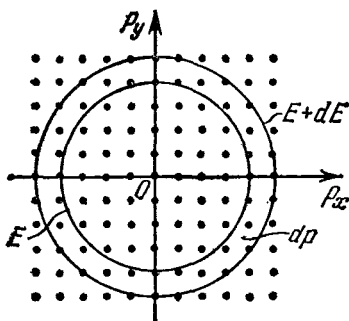


Рис. 5.1. К определению плотности квантовых состояний в зоне.

Точное вычисление функции $N(E)$ в общем случае не просто, так как поверхности постоянной энергии имеют сложную форму. Однако во многих случаях оказывается достаточным точно знать функцию $N(E)$ только вблизи краёв зон, отчего задача существенно упрощается.

Рассмотрим сначала простейший случай изотропного параболического закона дисперсии (обобщение результатов на случай анизотропного закона дисперсии будет дано в § 7). Тогда для полной энергии электрона можно написать

$$E = E_c + \frac{p^2}{2m_n}, \quad (2.2)$$

при этом квазиимпульс \mathbf{p} отсчитывается от его значения, соответствующего E_c . Далее $d\mathbf{p}$ есть объем сферического слоя $4\pi p^2 dp$. Из (2.2) имеем

$$p = (2m_n)^{1/2} (E - E_c)^{1/2}, \quad dp = \frac{1}{2} (2m_n)^{1/2} (E - E_c)^{-1/2} dE.$$

Поэтому

$$N_c(E) = \frac{1}{2\pi^2 \hbar^3} (2m_n)^{3/2} (E - E_c)^{1/2}. \quad (2.3)$$

Распределение квантовых состояний в валентной (дырочной) зоне получается с помощью аналогичных рассуждений. Рассматривая по-прежнему случай изотропного параболического закона дисперсии, мы имеем

$$E = E_v - \frac{1}{2m_p} p'^2. \quad (2.4)$$

Поэтому для плотности состояний вблизи края валентной зоны вместо (2.3) получается

$$N_v(E) = \frac{1}{2\pi^2 \hbar^3} (2m_p)^{3/2} (E_v - E)^{1/2}. \quad (2.5)$$

Более общие выражения для плотности состояний приводятся в § 7.

§ 3. Распределение Ферми — Дирака

Электроны, как частицы, обладающие полуцелым спином, подчиняются, как известно, статистике Ферми — Дирака. Вероятность того, что электрон будет находиться в квантовом состоянии с энергией E , выражается функцией Ферми — Дирака

$$f(E, T) = \left(1 + \exp \frac{E - F}{kT}\right)^{-1}. \quad (3.1)$$

Здесь F — электрoхимический потенциал, или уровень Ферми, который, в общем случае, тоже зависит от температуры.

Уровень Ферми тесно связан с термодинамическими характеристиками системы. Так, например, его можно определить как приращение свободной энергии системы при добавлении к ней одного электрона при условии постоянства объема и температуры (см. § 11). Однако мы не будем пока входить подробнее в обсуждение термодинамического смысла F , а будем рассматривать ее как некоторую характерную энергию, зависящую от типа полупроводника, его состава и состояния (температуры, давления и др.), значение которой подлежит дальнейшему определению. Из выражения (3.1) видно, что уровень Ферми можно также определить как энергию такого квантового состояния, вероятность заполнения которого при данных условиях равна $1/2$.

Вид функции Ферми — Дирака схематически показан на рис. 5.2. При $T = 0$ она имеет вид разрывной функции. Для $E < F$ она равна 1, а, значит, все квантовые состояния с такими энергиями заполнены электронами. Для $E > F$ функция $f = 0$ и соответствующие

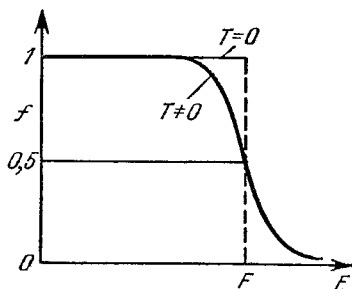


Рис. 5.2. Функция Ферми — Дирака.