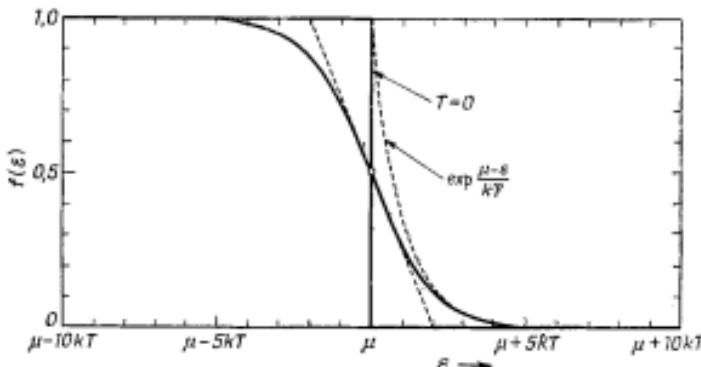


§ 2. Функция распределения Ферми

Функция $f(\varepsilon)$, определенная выражением (4.5), называется функцией распределения Ферми. На фиг. 74 представлена зависимость этой функции от ε . В пределе $T \rightarrow 0$ она имеет вид резкой ступеньки, однако при конечных температурах ступенька



Фиг. 74. Функция распределения Ферми

размыта в области порядка kT с обеих сторон от $\varepsilon = \mu$. На фиг. 75 приведены характерные кривые $D(\varepsilon) f(\varepsilon)$ при различных температурах. Наименьшая допустимая энергия одночастичных состояний есть $\varepsilon_0 (= 0)$.

а. $T = 0^{\circ}$ К. Значение μ при 0° К (μ_0) определяется из условия

$$N = \int_{\varepsilon_0}^{\mu_0} D(\varepsilon) d\varepsilon;$$

здесь μ_0 — уровень Ферми (потенциал Ферми, энергия Ферми) при 0° К, а интегралу соответствует заштрихованная площадь под кривой на фиг. 75, а. Наименьшая полная энергия системы равна

$$E_0 = \int_{\varepsilon_0}^{\mu_0} \varepsilon D(\varepsilon) d\varepsilon.$$

б. $T \neq 0$, $T \ll T_0$, $T_0 = (\mu_0 - \varepsilon_0)/k$ (низкие температуры). Значение μ определяется условием

$$N = \int D(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon$$

(интегралу соответствует заштрихованная область на фиг. 75, б). Таким образом, μ является функцией от температуры и называется уровнем Ферми при температуре T° К. При низких температурах $\mu > \varepsilon_0$, как показано на фиг. 75, б.

в. $T \neq 0, T \gg T_0$ (высокие температуры). При достаточно высоких температурах μ становится меньше, чем ε_0 (см. фиг. 75, в). В этом случае распределение Ферми может быть заменено распределением Больцмана (классический предел).

Формулы для случая вырождения. Пусть функция $g(\varepsilon)$, непрерывная и повторно дифференцируемая в точке $\varepsilon = \mu$, достаточно медленно меняется в интервале $|\varepsilon - \mu| \ll kT$. Тогда

$$\int_{\varepsilon_0}^{\infty} g(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon = \int_{\varepsilon_0}^{\mu} g(\varepsilon) d\varepsilon + \\ + \frac{\pi^2 (kT)^2}{6} g'(\mu) + \\ + \frac{7\pi^4}{360} (kT)^4 g''(\mu) + \dots, \quad (4.6a)$$

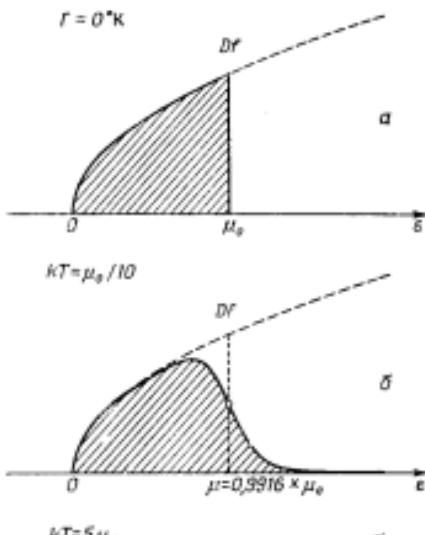
или

$$-\int_{\varepsilon_0}^{\infty} \varphi(\varepsilon) \frac{df}{d\varepsilon} d\varepsilon = \varphi(\mu) + \frac{\pi^2}{6} (kT)^2 \varphi''(\mu) + \frac{7\pi^4}{360} (kT)^4 \varphi^{(IV)}(\mu) + \dots,$$

где $\varphi' = g$, $\varphi(\varepsilon_0) = 0$.

Доказательство. Рассмотрим интеграл

$$I = \int_{\varepsilon_0}^{\infty} f(\varepsilon) \frac{d\varphi}{d\varepsilon} d\varepsilon = f(\varepsilon) \varphi(\varepsilon) \Big|_{\varepsilon_0}^{\infty} - \int_{\varepsilon_0}^{\infty} \varphi(\varepsilon) \frac{df}{d\varepsilon} d\varepsilon = - \int_{\varepsilon_0}^{\infty} \varphi(\varepsilon) \frac{df}{d\varepsilon} d\varepsilon, \quad (4.7)$$



Фиг. 75. График функции $f(\varepsilon) D(\varepsilon)$ при $T = 0^{\circ}$ К (а), при низких температурах (б) и при высоких температурах (в); $\varepsilon_0 = 0$

причем в соответствии с нашим предположением $\varphi(\varepsilon_0) = 0$. Учтем далее, что функция

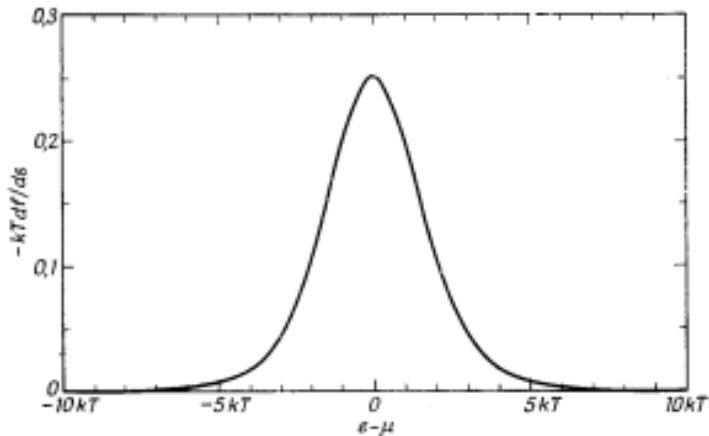
$$\frac{df}{d\varepsilon} = -\frac{\beta}{\{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1\}\{e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}+1\}}$$

принимает очень малые значения вне интервала $|\varepsilon - \mu| \ll kT$ (фиг. 76). Теперь мы можем разложить функцию $\varphi(\varepsilon)$ в ряд

$$\varphi(\varepsilon) = \varphi(\mu) + (\varepsilon - \mu)\varphi'(\mu) + \frac{1}{2}(\varepsilon - \mu)^2\varphi''(\mu) + \dots,$$

подставить его в (4.7) и проинтегрировать почленно.

При интегрировании мы можем заменить нижний предел ε_0 на $-\infty$ без какого-либо существенного изменения результата



Фиг. 76. График функции $-kT df/d\varepsilon$

(сильное вырождение). Приведем необходимые для интегрирования формулы:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{df}{d\varepsilon} d\varepsilon = -1,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} (\varepsilon - \mu)^n \frac{df}{d\varepsilon} d\varepsilon = 0 \quad (n - \text{нечетное}),$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} (e - \mu)^n \frac{df}{de} de = -\frac{1}{kT} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{(e - \mu)^n e^{\beta(e - \mu)}}{(e^{\beta(e - \mu)} + 1)^2} de = -(kT)^n \int_{-\infty}^{\infty} \frac{x^n e^x dx}{(e^x + 1)^2} = -2(kT)^n n! (1 - 2^{-n+1}) \zeta(n) \quad (n - \text{четное}),$$

где

$$\zeta(n) = \sum_{l=1}^{\infty} l^{-n}, \quad \zeta(2) = \frac{\pi^2}{6}, \quad \zeta(4) = \frac{\pi^4}{90}$$

— ζ -функции Римана. Подставляя эти выражения в (4.7), получаем

$$I = \varphi(\mu) + \sum_{r=1}^{\infty} 2(1 - 2^{1-2r}) \zeta(2r) (kT)^{2r} \varphi^{(2r)}(\mu).$$

Полагая $g = \varphi'(e)$, приходим к (4.6а).

Энергия Ферми $\mu(T)$ при низких температурах. Формулы (4.6) применяются в очень многих случаях; рассмотрение их отнесено к задачам. Одним из весьма существенных результатов, получаемых с их помощью, является разложение

$$\mu = \mu_0 \left\{ 1 - \frac{\pi^2}{6} \frac{d \ln D(\mu_0)}{d \ln \mu_0} \left(\frac{kT}{\mu_0} \right)^2 + \dots \right\}. \quad (4.8)$$

§ 3. Энергетические зоны в кристаллах

В случае свободных электронов выражение для плотности состояний имеет очень простой вид

$$D(e) = 2 \frac{4\pi V}{h^3} p^2 \frac{dp}{de} = \frac{8\pi V}{h^3} (2m^3 e)^{1/2} \quad \left(e = \frac{p^2}{2m} \right); \quad (4.9)$$

множитель 2 появляется из-за вырождения по спину. На фиг. 77 приведен график функции $D(e)$.

1) Интеграл вычисляется следующим образом:

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} \frac{x^n e^x dx}{(e^x + 1)^2} &= - \int_0^{\infty} x^n \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{e^x + 1} \right) dx = n \int_0^{\infty} \frac{x^{n-1}}{e^x + 1} dx = \\ &= n \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \int_0^{\infty} x^{n-1} e^{-(k+1)x} dx = n! \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(k+1)^n} = \\ &= n! \left\{ \sum_{l \text{ нечетн}} \frac{1}{l^n} - \sum_{l \text{ четн}} \frac{1}{l^n} \right\} = n! \left\{ \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^n} - 2 \sum_{l \text{ четн}} \frac{1}{l^n} \right\} = \\ &= n! \left(1 - \frac{2}{2^n} \right) \sum_{l=1}^{\infty} \frac{1}{l^n} = n! (1 - 2^{1-n}) \zeta(n). \end{aligned}$$