

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

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

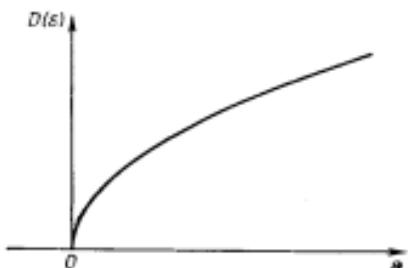
$$D(e) = 2 \frac{4\pi V}{h^3} p^2 \frac{dp}{de} = \frac{8\pi V}{h^3} (2m^3 e)^{1/2} \quad \left(e = \frac{p^2}{2m} \right); \quad (4.9)$$

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

1) Интеграл вычисляется следующим образом:

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

Плотность состояний электронов в кристаллическом твердом теле описывается более сложной функцией, так как на нее влияет периодичность структуры кристалла. В результате кривая плотности состояний распадается на большое число различных участков, как схематически показано на фиг. 78. Такой тип структуры плотности состояний называется зонной структурой спектра



Ф и г. 77. Кривая плотности состояний для свободных электронов



Ф и г. 78

электронов в кристалле. Вид зонной структуры определяется конкретными свойствами данного твердого тела.

Подробное объяснение причин возникновения зонной структуры выходит за рамки данной книги, так что мы добавим к сказанному лишь несколько слов. Как известно, электроны в изолированном атоме имеют дискретные энергетические уровни. Когда атомы сближаются друг с другом, образуя кристаллы, определенный электрон перестает принадлежать отдельному атому, а распределяется, так сказать, между всеми атомами кристалла. Это и обуславливает двоякую природу электронов кристалла: они одновременно являются как атомными, так и свободными. В результате дискретные атомные энергетические уровни размываются. Таким образом можно качественно объяснить возникновение зон, имеющих некоторую конечную ширину. Вообще говоря, установить соответствие между определенным атомным уровнем и зоной можно лишь для низколежащих энергетических зон. Напротив, более высокие зоны часто перекрываются, так что установить такое соответствие не всегда просто.

§ 4. Дырки

Величина

$$\bar{n}_\tau = 1 - \bar{n}_\tau = \frac{1}{e^{-(E_\tau - \mu)/kT} + 1} \quad (4.10)$$