حساب الفجوة الطاقية للسليكون باستخدام تكامل فيرمي- ديراك

الدكتور برهان دالاتي*

(تاريخ الإيداع 16 / 1 / 2020. قُبِل للنشر في 1 / 7 /2020)

□ ملخّص □

باستخدام الاحصاء الكوانتي وتابع توزع فيرمي – ديراك تمّ حساب علاقة عرض الفجوة الطاقية للسليكون بتابعية درجة الحرارة وكثافة حاملات الشحنة في قطاع الناقلية. كما تمّ حساب الكثافة في حالة التوازن وتأثير عرض الفجوة الطاقية عليها. رسمنا المنحنيات بأخذ قيم المجال الطاقي لعتبة الكمون الخاصة بمعدن السليكون واستنتجنا القيم التجريبية المعروفة، ثمّ تمّت مقارنة النتائج النظرية التي حصلنا عليها مع النتائج التجريبية المتوفرة في هذا المجال.

الكلمات المفتاحية: توزع فيرمي – ديراك، عرض الفجوة الطاقية، قطاع الناقلية، كثافة حاملات الشحنة.

* استاذ مساعد ، قسم الفيزياء، كلية العلوم، جامعة تشرين **Email: burhanosmandalati@tishreen.edu.sy**

Calculate the silicon energy gap using Fermi Dirac integration

Dr. Burhan Dalati*

(Received 16 / 1 / 2020. Accepted 1 / 7 /2020)

□ ABSTRACT □

using quantum statistics and Fermi-Dirac distribution was calculated the silicon energy gap width by temperature and density of charge carriers in the conductivity band. The density in the equilibrium state and the effect of the energy gap width were calculated. We drew the curves by taking the energy field value of the silicon specific threshold and derived the known experimental values. and the theoretical results obtained were compared with the available experimental results in this field.

Keyword: Fermi-Dirac distribution, energy gap width, conductivity band, density of charge carriers.

* **Associate Professor, Tishreen University, Email: burhanosmandalati@tishreen.edu.sy**

مقدمة:

يعتبر السليكون أحادي التبلور نصف الناقل ذو الفجوة الطاقية (1,12 eV) غير المباشرة، في الوقت الحاضر، هو المادة الأكثر استخداماً في انتاج الخلايا الشمسية. إن المردود النظري للخلية الشمسية السليكونية هو بحدود 25%، ومخبرياً، أعلى مردود قد وصل إلى قيمة 24,7%. أيضاً يستخدم السليكون في العديد من الصناعات التقنية والالكترونية وفي صناعة الجسيمات النانوية والبنى النانوية والمجال الطبي والصناعي وغيرها. وبسبب تطبيقات السليكون الواسعة زاد اهتمام الباحثين بدراسة خواص هذه المادة الالكترونية منها والحرارية. تطورت الدراسة التجريبية على هذه المادة للكشف عن خواصها بالتوازي مع الدراسات النظرية التي تبحث في البنى البلورية والالكترونية مؤخراً بشكل كبير [1-6]. وبالرغم من اتساع معرفتنا النظرية والتجريبية عن هذه المادة يبقى أثر الفجوة الطاقية على عمليات التحول الطوري في درجات الحرارة العالية غير معروف بشكل تام نظرياً أو تجريبياً.

ان أهم خواص المعادن وأنصاف النواقل هي الناقلية الكهربائية ومميزاتها وكثافة حاملات الشحنة. بمعرفة كثافة حاملات الشحنة نستطيع وصف جميع خواص أنصاف النواقل مثل عرض السويات والفجوة الطاقية E_g وهي بالغة الأهمية في تحديد شكل سطح فيرمي وبالتالي الخواص الفيزيائية للجسم الصلب. ويمكن أن نكتب هذه الفجوة وفق نظرية الفيزياء الإحصائية والترموديناميك كتابع لدرجة الحرارة $E_g(T)$ أو للضغط $E_g(p)$ داخل الغاز الالكتروني نفسه.

بالاتفاق مع نظرية ميكانيك الكم فإن تشكل الكريستال من الذرات يؤدي الى تناقص البعد بينها وبسبب مبدأ الاستبعاد لباولي فإن السويات لايمكنها أن تمتلك عدداً غير محدود من الالكترونات وهذا مايؤثر على الكثافة الالكترونية نفسها.

إن الالكترونات العميقة في الذرة لا تساهم في الخواص الفيزيائية للمادة وجميع المواد تتشابه في البنى هذه بالنسبة للإلكترونات العميقة ويبقى تحديد دور وخواص المادة كامنة في الالكترونات الخارجية أي الكترونات السطح ومن هنا تكمن أهمية هذه الدراسة للسويات السطحية ودراسة الفجوة الطاقية بين تلك السويات ولا سيما الكترونات التكافؤ وطاقتها E_V في أنصاف النواقل حيث تلعب دوراً محورياً في دراسة خصائص هذه المواد.

عند درجة الصفر المطلق تكون السويات العليا ممتلئة بالنسبة لأنصاف النواقل $(T=0\,K)$ أما السوية التي تليها لا تكون ممتلئة عند نفس درجة الحرارة أي سوية الناقلية E_c هذه السويات المسموحة تكون مفصولة عن بعضها بواسطة فجوات. سوف نستخدم مفهوم سوية فيرمي E_F لتحديد خواص امتلاء السويات الطاقية وتلك التي تكون فارغة عند درجة الصفر المطلق. وحسب موضع سوية فيرمي بالنسبة لحدود هاتين المنطقتين يتحدد أي الالكترونات تساهم في الناقلية وأيهما لاتساهم كما تتحدد الخواص الفيزيائية للمادة حسب موضع وشكل سوية فيرمي نفسها.

عندما يكون قطاع الناقلية مفصولاً عن قطاع التكافؤ تماماً نحصل على أنصاف النواقل وذلك عند $(T=0\,K)$ وقد تكون عوازل في حال الفجوة الطاقية كبيرة وتكون الفجوة الطاقية لأنصاف النواقل من مرتبة $(E_g \sim eV)$.

لقد بيّنت التجارب [4-8] أن عرض الفجوة الطاقية لا يتبع فقط درجة الحرارة، بل يتبع أيضاً الكثافة الالكترونية أو كثافة حاملات الشحنة.

أهمية البحث وأهدافه

أهمية البحث:

تكمن أهمية البحث في مجال الالكترونيات والنانو تكنولوجي في تطوير دراسة أثر الحرارة وكثافة حاملات الشحنة على الفجوة الطاقية والعكس أيضاً صحيح وخاصة في مجال التحول الطوري في منطقة الانصهار الخاصة في مادة السليكون.

هدف البحث:

حساب عرض الفجوة الطاقية لمادة السليكون بتابعية درجة الحرارة وكثافة حاملات الشحنة وأثر هذا على الخواص الترموديناميكية والبنيوية للسليكون.

طرائق البحث ومواده:

استخدمنا في هذه الدراسة الطريقة الاحصائية المتبعة على الغاز الالكتروني الذي يشكل جملة فيرميونات سبينها $\pm\frac{1}{2}$ تخضع لإحصاء فيرمي ديراك الذي يصف توزع حاملات الشحنة على سويات الطاقة تحت تأثير مبدأ الاستبعاد لباولي. وسوف نستخدم تكامل فيرمي وهو تعميم لتوزع فيرمي – ديراك في الإحصاء الكوانتي [16-9].

تختلف أنصاف النواقل عن المعادن في أن عدد حاملات الشحنة وحركيتها في أنصاف النواقل تتبع درجة الحرارة بشدة، كما تتبع توزع الشوائب أيضاً. عند درجة حرارة $T = T_{lat} = T_{el}$ حيث T_{lat} درجة حرارة الشبكة البلورية و T_{el} الحرارة الالكترونية يكون احتمال امتلاء السوية ذات الطاقة E محدداً بتابع توزع فيرمي ديراك التالي:

$$f(E,T) = \frac{1}{1+e^{\varepsilon-\mu/K_B T}} \qquad (1)$$

حيث E_F طاقة فيرمي و k_B ثابت بولتزمان.

يكون قطاع التكافؤ ممتلئاً في أنصاف النواقل عند درجات الحرارة المنخفضة وبسبب مبدأ الاستبعاد لباولي فإن الالكترونات تكون شبه عديمة الحركة في قطاع التكافؤ وبالتالي تحت هذا الشرط تكون الكثافة الالكترونية منخفضة في قطاع الناقلية وبالتالي تتصرف الالكترونات في هذه الحالة كغاز حر (غير متفاعل). في هذه الحالة تختصر العلاقة (1) وتأخذ شكل توزع ماكسويل بولتزمان

$$f(E,T) = e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} \qquad (2)$$

ولكي تتجاوز الالكترونات الفجوة الطاقية للسليكون وهي عند $T = 0\,K$ و $E_g = 1.12\,eV$، يجب أن تضخ طاقة الى قطاع التكافؤ أكبر من عرض الفجوة. يتحكم تابع التوزع (1) في هذه الآلية تحكماً شديداً بالقرب من سوية فيرمي أي عند $(E \approx E_F)$ حيث يعاني هذا التابع من الناحية الرياضية انقطاعاً عند عبور سوية فيرمي حيث تتطابق خواص توزع فيرمي –ديراك مع خواص تابع دلتا ديراك الدرجي بجوار سطح فيرمي (Step Function).

لحساب الكثافة التي تتبع درجة الحرارة من خلال تابع التوزع، سوف نستخدم تكامل فيرمي الذي سوف نأخذه من [7] وفق الصيغة الرياضية العامة على الشكل التالي:

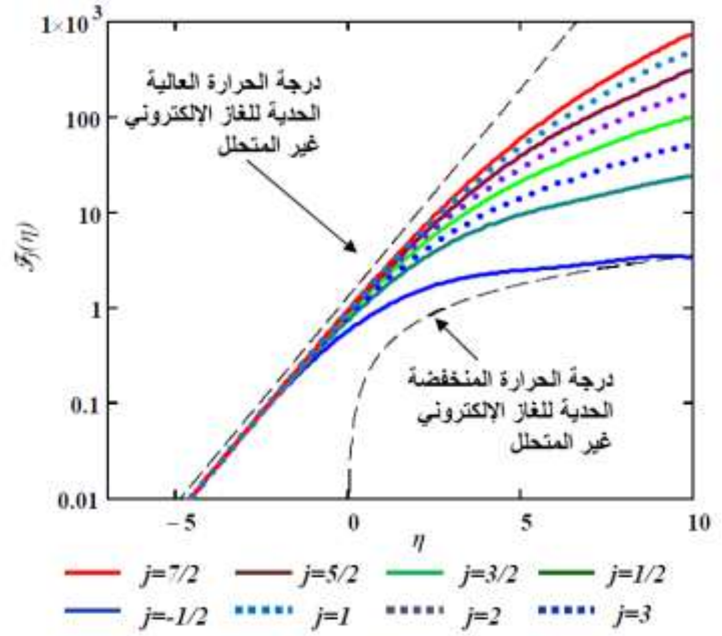
$$\Im_j(\eta_c) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^j}{1+\exp(\varepsilon - \eta_c)} d\varepsilon \qquad (3)$$

حيث $\Gamma(x)$ تابع غاما والدليل j خاص بتابع توزع فيرمي ديراك و $\eta_c = \eta_e$ للإلكترونات و $\eta_c = \eta_h$ للثقوب و ε طاقة الالكترون (الثقب) ويكون:

$$n_e = \frac{E_F - E_C}{k_B T} \quad \text{للإلكترونات} \qquad (4)$$

$$n_h = \frac{E_V - E_F}{k_B T} \quad \text{للثقوب} \qquad (5)$$

يتصرف التابع (3) رياضياً حسب العامل n مأخوذاً لبعض القيم كما في الشكل (1) التالي:



الشكل (1): تقريب تكامل فيرمي ديراك من أجل بعض قيم الدليل (j)

أخذنا القيم التجريبية لرسم تكامل التوزع في الشكل (1) من [7,15-19] وسوف نقارن تحولات التابع للكثافة الإلكترونية باستخدام القيم النظرية لاحقاً في هذا البحث.

لتحديد كثافة حاملات الشحنة وعرض الفجوة الطاقية لأنصاف النواقل $(n = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2})$ سنأخذ هنا الدليل $x = \frac{1}{2}$ (الكترون – ثقب) حيث يمكن رسم تحولات التابع بعد إدخال تابع غاما إلى تابع التوزع نفسه.

في هذه الحالة التكامل (3) يصبح قابلاً للحل تحليلياً [8-10] حيث توجد عدة طرق رياضية لحل هذا التكامل منها طريقة النشر بسلسلة تايلور[9-13] وبالطرائق العددية المعروفة مثل (الاستيفاء الداخلي والخارجي) [10-12].

ويمكننا رسم هذا التابع تحليلياً من أجل قيم x كما في الشكل (1) وهو تابع مستمر عند هذه القيم وثم حسابه حيث نجعل $x=\frac{1}{2}$ حالة الغاز الالكتروني المتحلل. لكي نستطيع حساب الكثافة الإلكترونية بتابعية درجة الحرارة وعرض الفجوة الطاقية سوف نجري بعض التحويلات على تكامل فيرمي- ديراك ليصبح ملائماً لنا .

نكتب تكامل فيرمي ديراك كما يلي:

$$I=\int_0^\infty \frac{f(\varepsilon)}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}\,dx \qquad (7)$$

سوف نجري التحويل التالي لتسهيل المكاملة

$\frac{\varepsilon-\mu}{k_BT}=Z \quad , \quad \varepsilon=k_BTZ+\mu \quad , \quad \frac{d\varepsilon}{dZ}=k_BT \quad , \quad d\varepsilon=k_BTdZ$ ليصبح التكامل بالشكل:

$$I=k_BT\int_{-\mu/(k_BT)}^{0}\frac{f(k_BTZ+\mu)}{e^Z+1}\,dZ+k_BT\int_0^\infty\frac{f(k_BTZ+\mu)}{e^Z+1}\,dZ$$

$$=k_BT\int_0^{\mu/(k_BT)}\frac{f(\mu-k_BTZ)}{e^{-Z}+1}\,dZ+k_BT\int_0^\infty\frac{f(k_BTZ+\mu)}{e^Z+1}\,dZ$$

وبما أن $\frac{1}{e^{-Z}+1}=\frac{e^Z}{e^Z+1}=1-\frac{1}{e^Z+1}$ يمكن تجزئة التكامل الأول بالشكل

$$I=k_BT\int_0^{\mu/(k_BT)}f(\mu-k_BTZ)\,dZ-k_BT\int_0^{\mu/(k_BT)}f(\mu-k_BTZ)\,\frac{dZ}{e^Z+1}$$

$$+k_BT\int_0^\infty\frac{f(k_BTZ+\mu)}{e^Z+1}\,dZ$$

وباجراء التحويل مرة ثانية $dZ=\frac{d\varepsilon}{k_BT} \quad , \quad \frac{d\varepsilon}{dZ}=-k_BT \quad , \quad \varepsilon=\mu-k_BTZ$ يصبح الحد الأول من التكامل والتكامل الكلي بالشكل:

$$I=\int_0^\mu f(\varepsilon)\,d\varepsilon-k_BT\int_0^{\mu/(k_BT)}\frac{f(\mu-k_BTZ)}{e^Z+1}dZ$$

$$+k_BT\int_0^\infty\frac{f(k_BTZ+\mu)}{e^Z+1}\,dZ \qquad (8)$$

في التكامل الثاني نستبدل $\frac{\mu}{k_BT}$ باللانهاية وهذا ممكن لأن:

$$\frac{\mu}{k_BT}=\frac{E_F}{k_BT} \quad ; \quad E_F>>k_BT\Rightarrow\frac{E_F}{k_BT}>>1$$

والتكامل يتقارب بسرعة عند سوية فيرمي محققاً خواص التابع الدرجي (دلتا).

$$I\approx\int_0^\mu f(\varepsilon)\,d\varepsilon+k_BT\int_0^\infty\frac{f(\mu+k_BTZ)-f(\mu-k_BTZ)}{e^Z+1}dZ$$

وبنشر هذا التابع (التوابع داخل التكامل) بسلسلة تايلور حول القيمة μ وهي E_F أي على سوية فيرمي نجد:

$$I \approx \int_0^{\mu} f(\varepsilon)\, d\varepsilon + k_B T \int_0^{\infty} \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(\mu)}{n!}(k_B T Z)^n - \frac{f^{(n)}(\mu)}{n!}(-k_B T Z)^n \right\} \frac{1}{e^Z+1} dZ$$

$$= \int_0^{\mu} f(\varepsilon)\, d\varepsilon + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{f^{(2n-1)}(\mu)}{(2n-1)!} 2(k_B T)^{2n}.I_{2n}$$

التكامل I_{2n} يمكن حسابه باستخدام تابع زيتا–ريمان $\xi(x)$ وتابع غاما $\Gamma(x)$، وبالتالي نستطيع كتابة العلاقة النهائية لهذا التكامل على الشكل:

$$f_n(y) = \frac{1}{\Gamma(x)} \int_0^{\infty} \frac{x^{n-1}}{e^{x-y}+1} dx$$

وهو ما يسمى تكامل فيرمي–ديراك حيث وضعنا في هذه العلاقة $y = \dfrac{\mu}{k_B T}$.

نلاحظ هنا تابعية التكامل لتابع غاما وهذا التابع يتعلق بشكل أساسي بالعاملي حيث يشكل تعميماً للعاملي وبالتالي فهو يتبع مباشرة لتابع غاما ويمكن اشتقاق جميع توابع التوزع من هذه الصيغة الرياضية [11-14] .

من أجل $n = \dfrac{1}{2}$ يأخذ هذا التكامل الشكل:

$$F_p(x) = \int_0^{\infty} \frac{t^p}{e^{t-x}+1} dt$$

$$F_{1/2}(x) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \sum_{\upsilon=1}^{\infty} (-1)^{p-1} \frac{e^{\upsilon x}}{y^{3/2}}$$

$$\Gamma(x) = \int_0^{\infty} Z^{x-1} e^{-Z} dZ$$

$$\xi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^n}$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} Z^k = \frac{Z}{1-Z} \quad ; |Z| \le 1$$

بأخذ القيم التجريبية لبعض أنصاف النواقل من [12] كما في الجدول (1) التالي:

الجدول (1): القيم التجريبية لبعض أنصاف النواقل، [12].

أنصاف النواقل	N_c [cm^{-3}]	N_v [cm^{-3}]
Ge	1.03×10^{19}	5.35×10^{18}
Si	3.22×10^{19}	1.83×10^{19}
GaAs	4.21×10^{17}	9.52×10^{18}

باعتبار الكثافة الالكترونية وكثافة الثقوب تحققان العلاقات التالية:

$$N_e(T) = N_c.F_{\frac{1}{2}}(\eta)$$
$$N_h(T) = N_v.F_{\frac{1}{2}}(\eta_h) \qquad (*)$$

حيث $N_c = 2(\frac{m_e k_B T}{2\pi\hbar^2})^{3/2}$ و $N_v = 2(\frac{m_h k_B T}{2\pi\hbar^2})^{3/2}$

عدد الحالات الطاقية للإلكترونات والثقوب على التوالي.

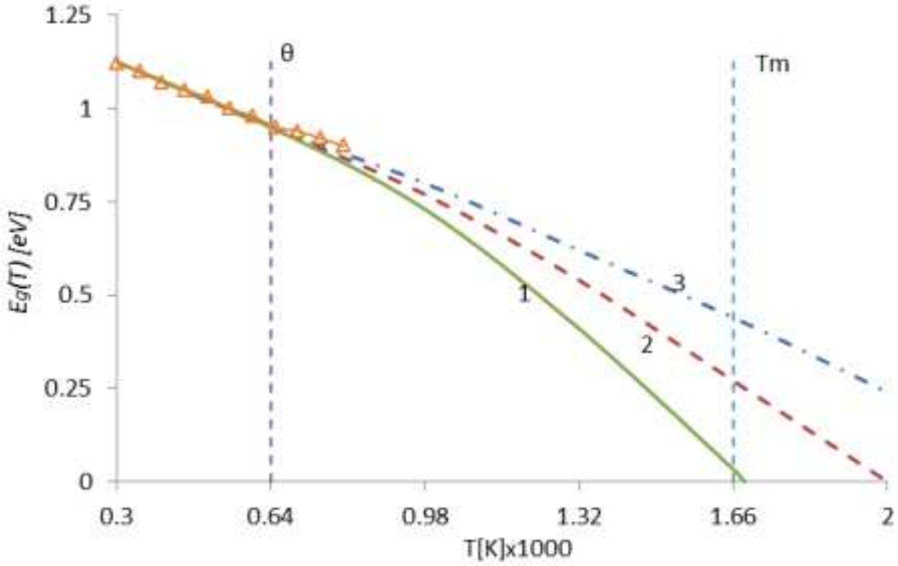
وبأخذ العلاقتين (*) فان شرط تساوي عدد الالكترونات مع عدد الثقوب (electron neutrality condition) يأخذ الشكل التالي:

$$N_c F_{1/2}(\eta_e) = N_v F_{1/2}(\eta_h) \qquad (**)$$

وهذه العلاقة من يمكن تطبيقها في حالتنا هنا اذا أخذنا بعين الاعتبار تكامل فيرمي– ديراك الذي توصلنا اليه اعلاه.

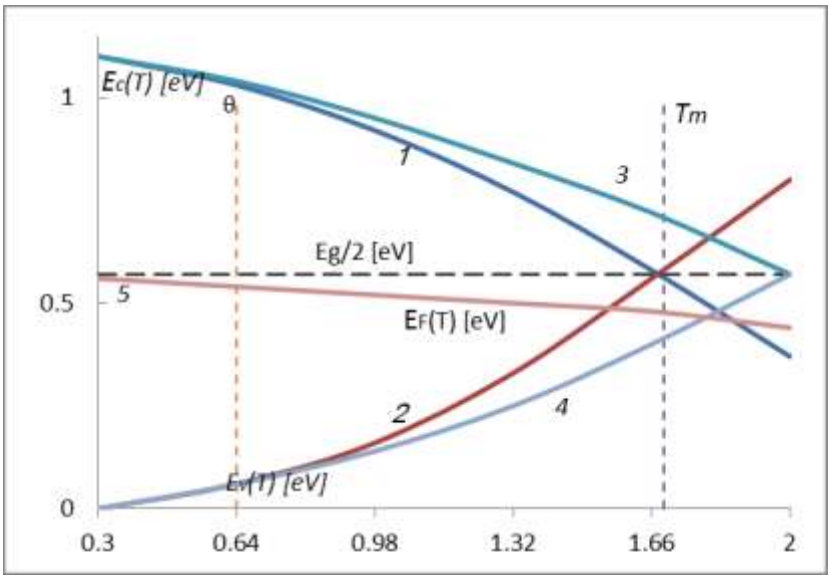
العلاقات (*) و (**) تحتوي ضمنياً على كلٍ من التوابع $E_F(T)$ و $N(T)$ و $E_g(T)$ التي تتبع مباشرة درجة الحرارة. وسوف نقوم برسم هذه التوابع وفق برنامج Excel باستخدام تكامل فيرمي–ديراك وذلك من أجل قيم تتفق مع تابع العتبة لنصف الناقل (سليكون).

في الشكل (2) قمنا برسم تحولات تكامل فيرمي– ديراك لعرض الفجوة الطاقية بتابعية درجة الحرارة على مجال يتفق مع القيم التجريبية المأخوذة من [12,19-22].



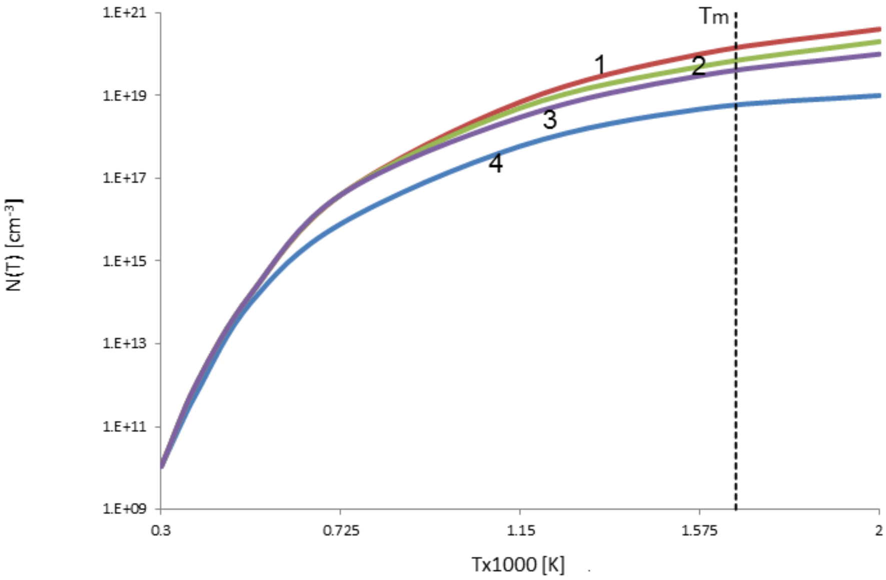
الشكل (2) يمثل تابعية الفجوة الطاقية للسليكون بتابعية درجة الحرارة

أما الشكل (3) فيمثل تحولات الكثافة الإلكترونية في قطاع الناقلية وقطاع التكافؤ على التوالي:

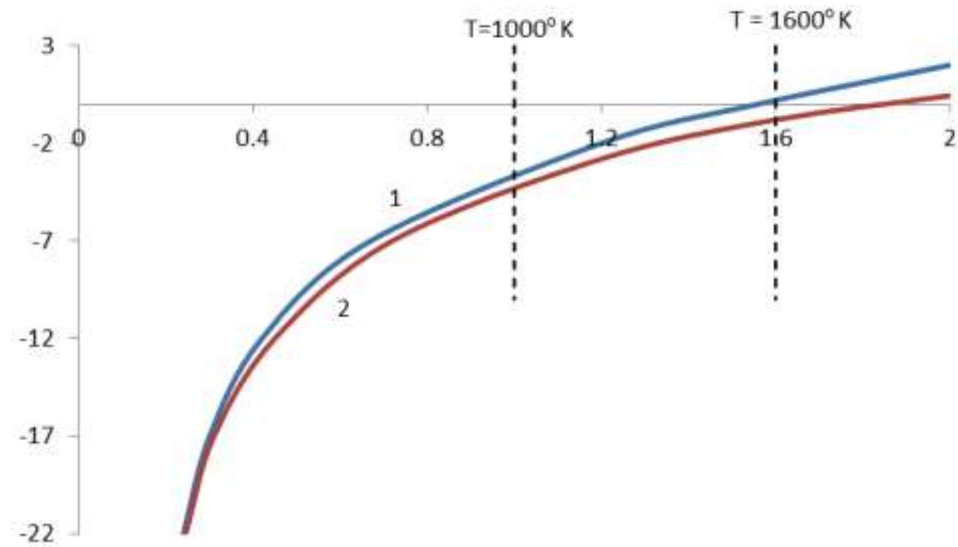


الشكل (3) يمثل تحولات $E_c(T)$ بتابعية درجة الحرارة و $E_v(T)$ أيضاً.

يمثل الكثافة بتابعية درجة الحرارة وقد حسبناها استناداً الى توزع فيرمي–ديراك المنحني (1) أما المنحني (4) فيمثل الكثافة وفق توزع ماكسويل–بولتزمان.



الشكل (4):



الشكل (5): يمثل (1) تابعية طاقة فيرمي لدرجة الحرارة للإلكترونات و (2) تابعية طاقة فيرمي لدرجة الحرارة للثقوب.

يمثل الشكل (5) العلاقة المعروفة لكثافة الحالات الطاقية في أنصاف النواقل وهي علاقة عامة من الشكل :

$$D(\varepsilon)=\frac{dN}{d\varepsilon}=\frac{V}{2\pi^2}.(\frac{2m}{\hbar^2})^{\frac{3}{2}}.\varepsilon^{\frac{1}{2}}.$$

الاستنتاجات والتوصيات

الاستنتاجات: نجد من المنحنيات التي تم رسمها لتحولات تابع التوزع لفيرمي –ديراك أن:

1- النتائج النظرية تتطابق بشكل كبير مع النتائج التجريبية وهذا يعود الى الطبيعة الإحصائية لتابع غاما التي تتفق مع الطبيعة الإحصائية لتوزع الإلكترونات والثقوب في الجسم الصلب.

2- تحت الشروط الرياضية للتوازن فإن تحلل حاملات الشحنة مع الناقلية الذاتية تبدأ عند درجة حرارة أصغر بكثير من درجة حرارة الانصهار. يتطلب هذا استخدام الاحصاء الكوانتي واستخدام تكامل فيرمي ديراك، لتحديد خواص السليكون والخواص الفيزيائية للجسم الصلب بشكل عام.

ان عرض الفجوة الطاقية وتغيراتها [11-18] من أهم المميزات الأساسية للسليكون التي تعتمد بشكل مباشر على كثافة الالكترونات والثقوب وبالتالي الخواص والمميزات لأنصاف النواقل.

3- تظهر الكثافات للإلكترونات والثقوب تحلل شديد في درجات حرارة على المجال (T=1600–2500K) وبأخذ الآثار الكوانتية بعين الاعتبار تسمح لنا بتقليص عرض القطاع المحظور عند نقطة الانصهار في حالة التوازن (at the point of equilibrium melting point) أو في جوارها.

من جهة ثانية تكون الكثافة بحدود ($N(T) = 4.2 \times 10^{20} – 10^{21}\ cm^{-3}$) والتي هي مقبولة لأشباه المعادن التي لها فجوة طاقية سالبة [18,23-26]. ولكن هذه القيمة لجميع أشباه المعادن وأنصاف النواقل لاتتعدى المرتبة ($10^{22} – 10^{23}\ cm^{-3}$).

4- إن الانصهار الترموديناميكي عند التوازن للكريستال النقي يظهر عند حالتين: الأولى يتطلب الانصهار خواص محددة لأشباه المعادن بحيث تزداد الكثافة الإلكترونية بازدياد درجة الحرارة والثانية، عند الوصول لدرجة حرارة 3000 K يتطلب السليكون المنصهر أن تكون الكثافة الإلكترونية للإلكترونات والثقوب ثابتة كما تدل المنحنيات أعلاه.

التحليل أعلاه مهم جداً من أجل فهم أعمق للظواهر اللاتوازنية للتسخين والانصهار للكريستال النقي على سبيل المثال الليزر القصير جداً للنبضات الليزرية القصيرة من مرتبة الفمتوثانية [12-18] تحت الشرط $h\omega_L > E_g(T)$، حيث $h\omega_L$ الطاقة الكوانتية للإشعاع الليزري في السليكون بسبب ظاهرة الفعل الكهرضوئي (Photoelectric effect). يمكن لكثافة الالكترونات والثقوب ان تبلغ القيمة [$N(T) \sim 10^{22}$ cm^{-3}] قبل أن تصل حرارة الشبكة الى درجة الانصهار. تسمى هذه الظاهرة في الفيزياء (Premelting or softening of the lattice up to the melting)

5- استناداً الى مناقشة لانداو [13] في الفيزياء الإحصائية التي تعتمد توزع فيرمي – ديراك فإنه وبسبب مبدأ باولي فان حركة هذه الحاملات ضمن قطاع التكافؤ تكون معدومة. اذن عند درجات الحرارة المنخفضة وللأسباب أعلاه لإثارة هذه الحاملات وجعلها تنتقل إلى قطاع الناقلية يتطلب اعطائها طاقة كافية لتجتاز الفجوة الطاقية أي: $\left(E_g < 2-3eV\right)$ في أنصاف النواقل، حيث يصبح بالإمكان تطبيق إحصاء فيرمي ديراك لحساب الكثافة الإلكترونية بتابعية درجات الحرارة.

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{1+e^{\varepsilon-\eta}}$$

حيث: $\varepsilon = \dfrac{E-E_c}{k_B T}$ و $\eta = \dfrac{E_F - E_c}{k_B T}$

هذا الاخلال في التوازن الترموديناميكي بسبب زيادة درجة الحرارة يسبب انقسام سوية فيرمي الى الكترونات E_{Fe} و وتصبح E_{Fh}

$$\eta_e = \frac{E_{Fe} - E_c}{k_B T} \quad \text{و} \quad \eta_h = \frac{E_{Fh} - E_c}{k_B T}$$

يعرف تابع التوزع لفيرمي – ديراك بتكامل من الشكل:

$$F_j(\eta) = \int_0^\infty \frac{\varepsilon^j}{1+e^{\varepsilon-\eta}} dx$$ حيث j هي مرتبة التكامل

يرتبط هذا التابع بتابع غاما بعلاقة رياضية من الشكل:

$$\Im_j(\eta) = \frac{E_j(\eta)}{\Gamma(j+1)}$$

حيث $\Gamma(j+1)$ تابع غاما وهو من الشكل $\Gamma(\alpha) = \int_0^\infty x^{\alpha-1} e^{-x} dx$

وهو معروف جيداً في كتب التوابع الخاصة في الرياضيات ودرست خواصه بإسهاب في هذا المجال [7,21-30].

للتكامل (2) عدة فوائد مختلفة عن التكامل (1) حيث يعرف التكامل (1) على الأعداد الحقيقية ماعدا الصحيحة السالبة، في حين ان التكامل (2) يأخذ بعين الاعتبار الأعداد الصحيحة السالبة.

كما أننا نستطيع حساب التكامل (2) من أجل الأعداد الصحيحة الكسرية للمرتبة j أيضا، والخاصية الثالثة المهمة هي أن مشتق التابع (2) يمكن حسابه ويساوي

$$\Im_j'(\eta) = \frac{d}{d\eta} F_j(\eta) = F_{j-1}(\eta)$$

6- تستخدم عائلة التكاملات $F_j(\eta)$ والمعممة بتابعية غاما $\Im_j(\eta)$ بشكل واسع في نمذجة الخواص الفيزيوحرارية لأنصاف النواقل والمعادن. وهي مهمة جداً من أجل القيم المنخفضة (الصغيرة) للدليل j حيث قمنا بنمذجة بعض الخواص هذه في حساباتنا هنا ومن ثم مقارنة هذه النتائج مع المتوفرة لدينا من بحوث في هذا المجال [2,7,12,14] وذلك ضمن مجال تغيير العامل η من الكلاسيكي أي توزع ماكسويل – بولتزمان حيث $\eta << 0$ إلى مجال فيرمي – ديراك حيث $\eta > 0$. تنزيل فقرة نهائية للمزيد من التوسع في دراسة تكامل فيرمي – ديراك يمكن العودة إلى المراجع [4,5,8,9] حيث تمت دراسته نظرياً بشكل مسهب وحسبت قيمة هذا التكامل في جداول منظمة يمكن استخدامها لنمذجة العديد من الظواهر وأخذ مجالات أخرى لدرجة الحرارة وقيمة العتبة لمعادن مختلفة.

REFERENCES

[1] O.C. Zienkiewicz and R.L. Taylor, *The finite element method*, McGraw Hill, Vol. I., (1989), Vol. II, (1991).

[2] B. Dalati, A. Darwisho, Interface Recombination of The Heterojunction Solar Cells, Tishreen University Journal for Research and Scientific Studies - Basic Sciences Series Vol. (14) No. (2) 2019.

[3] D. Helbing, “Traffic and related self-driven many particle systems”, Reviews of modern physics, **73** (4), 1067-1141 (2001).

[4] O. Madelung, Introduction to Solid-State Theory, Springer; Series in Solid-State Sciences, (1978).

[5] J.C. Slater, Quantum Theory of Molecules and Solids, Vol. 3: Insulators, Semiconductors, and Metals. New York: McGraw-Hill, (1963).

[6] Jerry A. Selvaggi and Jerry P. Selvaggi. “The Analytical Evaluation of the Half-Order Fermi-Dirac Integrals”, The Open Mathematics Journal, **5**, 1-7 (2012).

[7] Valentin V. Karasiev, Debajit Chakraborty, S.B. Trickey, Improved analytical representation of combinations of Fermi-Dirac integrals for finite-temperature density functional calculations. Elsevier, FL 32611-8435, United States pag (114-123). (2015)

[8] Charles Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8 edition, Wiley, (2004).

[9] A. Sommerfeld, “Zur Elektronentheorie der Metalle auf Grund der Fermischen Statistik”, Zeitschrift für Physik, **47**, 1–3 (1928).

[10] A. Sommerfeld and N. H. Frank, “Statistical theory of thermoelectric, galvano- and thermomagnetic phenomena in metals”, Reviews of Modern Physics, **3** (1), 1-42 (1931).

[11] W. Pauli, “Uber Gasentartung und Paramagnetismus”, Zeitschrift für Physik, **41**, 81-102 (1927).

[12] J.S. Blakemore, Solid State Physics, 2nd ed, New York: Cambridge University Press, (1985).

[13] E. Fred Schubert, Physical Foundations of Solid-State Devices, E. Fred Schubert, (2006).

[14] R. B. Dingle. “The Fermi-Dirac integrals $\Im_p(\eta) = (p!)^{-1}\int_0^\infty \varepsilon^p (e^{\varepsilon-\eta}+1)^{-1} d\varepsilon$ ", Applied Scientific Research, **6**, 225-239 (1957).

[15] R. B. Dingle, Asymptotic Expansions: Their Derivation and Interpretation, London: Academic Press, (1973).
[16] Frank G. Lether, “Analytical Expansion and Numerical Approximation of the Fermi-Dirac Integrals ℑj(x) of Order j= – 1/2 and j=1/2”, Journal of Scientific Computing, **15** (4), 479-497 (2000)
[17] T. M. Garoni, N. E. Frankel, and M. L. Glasser, “Complete asymptotic expansions of the Fermi—Dirac integrals J. Math. Phys., **42** (4), 1860-1868, (2001).
[18] Toshio Fukushima, “Analytical computation of generalized Fermi–Dirac integrals by truncated Sommerfeld expansions”, Applied Mathematics and Computation, **234**, 417–433 (2014).
[19] J. S. Blakemore, Semiconductor Statistics, New York: Dover, (1982).
[20] J.S. Blakemore, “Approximations for Fermi-Dirac integrals, especially the function ℑ1/2(η), used to describe electron density in a semiconductor”, Solid-State Electronics, **25** (11), 1067-1076 (1982).
[21] – L. Landau , E. Lifshitz , statistical physics part 1,13rd edition page 169/170 (2005).
[22] Zaharah Johari, Mohammad Taghi Ahmadi, Desmond Chang Yih Chek, N. Aziziah Amin, and Razali Ismail, “Modelling of Graphene Nanoribbon Fermi Energy,” Journal of Nanomaterials, vol. 2010, Article ID 909347, 6 pages, 2010, Hindawi publishing corporation (Malaysia) (2010).
[23] R. K. Pathria, Statistical Mechanics, second edition, chapter (8–12), Butterworth-Heinemann, Oxford, OX2 , 8DP (1996).
[24] Henry van Driel, “Kinetics of high-density plasmas generated in Si by 1.06-and 0.53-m picosecond laser pulses”, Phys. Rev. B, **35**, 8166 (1987).
[25] P. Rhodes, “Fermi-Dirac Functions of Integral Order”, Proc. R. Soc. Lond. A, **204**, 396-405 (1950).
[26] R. B. Dingle, D. Arndt, and S. K. Roy. “The integrals $e_p(x) = (p!)^{-1}\int_0^\infty \varepsilon^p (1 + x\varepsilon^3)^{-1} e^{-\varepsilon} d\varepsilon$ and $\Im_p(x) = (p!)^{-1}\int_0^\infty \varepsilon^p (1 + x\varepsilon^3)^{-2} e^{-\varepsilon} d\varepsilon$ and their tabulation”, Appl. Sci. Res. Section B, **6** (1), 245-252 (1957).
[27] P. Van Halen and D. L. Pulfrey, “Accurate, short series approximations to Fermi-Dirac integrals of order -1/2, 1/2, 1, 3/2, 2, 5/2, 3, and 7/2”, Journal of Applied Physics, **57**, 5271 5274, (1985).
[28] N. Kablan, M. Ahmad, Regenerating Particale and Magnetic Density Equations from Kinetic Equation General Landau - Silin. Tishreen University Journal for Research and Scientific Studies - Basic Sciences Series Vol. (32) No. (3) 2010.
N. Kablan, M. Ahmad, Solving Lndau-Silin Kinetic Equation of Liquid Fermi With Rashba's Term Orbit Spin coupling for higher Landau Parameters. Tishreen University Journal for Research and Scientific Studies - Basic Sciences Series Vol. (34) No. (2) 2012.
[29] M. Goano, “Series expansion of the Fermi-Dirac integral Fj(x) over the entire domain of real j and x”, *Solid State Electron,* **56**, 217–221 (1993).
[30] F.G. Lether, “Variable precision algorithm for the numerical computation of the Fermi-Dirac function Fj(x) of order j = −3/2”, *J. Sci. Comput,* **16**, 69–79 (2001).