Classification
Physics Abstracts
05.30

SUR UNE APPROXIMATION DE L'INTÉGRALE $F_{1/2}$ DE FERMİ DIRAC PAR UN DÉVELOPPEMENT POLYNOMIAL

L. SOONCKINDT et L. LASSABATERE

Centre d'Etudes d'Electronique des Solides (LA 21), U.S.T.L.,
place E. Bataillon, 34060 Montpellier Cedex, France

(Reçu le 7 mars 1978, révisé le 26 juillet 1978, accepté le 26 juillet 1978)

Résumé. — On donne une approximation de l'intégrale $F_{1/2}$ de Fermi-Dirac par un développement polynomial d'ordre 12.

Abstract. — An approximation of the Fermi-Dirac integral $F_{1/2}$ by a polynomial of the 12th order is given.

On est souvent conduit dans l'étude des semiconducteurs, à utiliser l'intégrale de Fermi F_j (j : ordre de l'intégrale) lorsqu'on s'intéresse à la conductivité, à l'effet Hall, à la magnétorésistance ou tout simplement à la densité d'électrons n ou de trous p .

Dans ce cas n et p s'expriment en fonction de l'intégrale $F_{1/2}(\eta_f)$ par les relations :

$$n = \frac{2}{\sqrt{\Pi}} N_c F_{1/2}(\eta_f) \quad (1)$$

$$p = \frac{2}{\sqrt{\Pi}} N_v F_{1/2}(\eta_f) \quad (1')$$

N_c et N_v : densité effective d'états dans la bande de conduction et dans la bande de valence.

$$F_{1/2}(\eta_f) = \int_0^\infty \frac{\eta^{1/2} d\eta}{1 + e^{\eta - \eta_f}}$$

est l'intégrale de Fermi Dirac (2)

$$\eta = \frac{E - E_c}{kT} \quad (3)$$

$$\eta_f = \frac{E_f - E_c}{kT} \quad (4)$$

$$\eta = \frac{E_v - E}{kT} \quad (3')$$

$$\eta_f = \frac{E_v - E_f}{kT} \quad (4')$$

Pour déterminer n et p on peut se servir des valeurs tabulées de $F_{1/2}(\eta_f)$ ou utiliser des expressions analy-

tiques approchées (1), (2) valables dans les domaines de variations de η ci-dessous :

— Pour $-\infty < \eta_f < -1$

$$F_{1/2}(\eta_f) = \frac{\sqrt{\Pi}}{2} e^{\eta_f}. \quad (5)$$

C'est là l'approximation classique ou totalement non dégénérée, correcte lorsque η_f est assez important mais mauvaise à faible η_f .

— Pour $5 < \eta_f < \infty$, ce qui correspond au semiconducteur totalement dégénéré :

$$F_{1/2}(\eta_f) \text{ peut être approximé par } \frac{2}{3} \eta_f^{3/2}. \quad (6)$$

— Pour $-1 < \eta_f < 5$,

$$F_{1/2}(\eta_f) = \frac{\sqrt{\Pi}}{2} \frac{1}{0,25 + e^{-\eta_f}}. \quad (7)$$

Si les conditions expérimentales ou la qualité des échantillons utilisés sont telles que le domaine de variation de η_f recouvre deux ou trois zones d'approximation, on est conduit à utiliser successivement plusieurs des expressions précédentes. C'est le cas par exemple quand :

— on travaille en température si le semiconducteur passe de l'état non dégénéré à l'état dégénéré,

— on s'intéresse aux populations au voisinage d'une surface en présence d'une barrière de surface : $E_c - E_F$ varie alors, à température constante, quand on se déplace de la surface vers l'intérieur du semiconducteur. On peut donner comme autre exemple le cas de certains semiconducteurs amorphes caractérisés par des fluctuations de potentiel dues au désordre : ces variations locales de potentiel se tra-

duisent par des variations de $(E_c - E_F)/kT$ dans l'échantillon (3), (4).

Il est alors très intéressant de disposer d'une expression analytique de $F_{1/2}(\eta_f)$. Ceci explique que différents développements en fonction de η_f aient été proposés dans le domaine $-5 \leq \eta_f \leq 5$ (3), (5). Ces développements ne sont cependant pas satisfaisants car, quand on se situe au voisinage des limites de zone, l'erreur devient très vite supérieure à 3 %.

C'est pourquoi nous avons recherché une expression simple sous forme polynomiale, approximant $F_{1/2}(\eta_f)$ dans une région importante de variations de η_f à mieux que 1/100e.

Pour cela on décompose $F_{1/2}(\eta_f)$ sous la forme :

$$F_{1/2}(\eta_f) = \sum_{i=0}^m a_i \eta_f^i . \tag{8}$$

Pour obtenir a_i on se fixe m valeurs de η_f , par exemple $\eta_f = -4, -3, \dots, +11, +12$. Connaissant à partir des tables les valeurs de $F_{1/2}$ correspondant à chaque η_f , déterminer a_i revient donc à résoudre un système de m équations à m inconnues. Le calcul a été effectué ici pour la fonction

$$\mathcal{F}_{1/2}(\eta_f) = \frac{2}{\sqrt{\Pi}} F_{1/2}(\eta_f) ,$$

plus habituellement utilisée.

On obtient un résultat satisfaisant dans la gamme $-4 \leq \eta_f \leq 8$ avec un polynôme d'ordre 12. Les coefficients a_i sont donnés dans le tableau I. Sur le tableau II sont reportées les précisions $\Delta\mathcal{F}/\mathcal{F}$.

$$\frac{\Delta\mathcal{F}}{\mathcal{F}} = \frac{\text{Valeur vraie de } \mathcal{F}_{1/2}(\eta_f) - \text{Valeur calculée de } \mathcal{F}_{1/2}(\eta_f)}{\text{Valeur vraie de } \mathcal{F}_{1/2}(\eta_f)}$$

La précision est toujours meilleure que 10^{-2} dans le domaine $-4 \leq \eta_f \leq 7$. Il est à noter toutefois que si on ne conserve que les termes d'ordre inférieur à 5 par exemple, l'approximation avec une précision de 1 % n'est valable que dans le domaine $0 \leq \eta_f \leq 2$ (Fig. 1). Si on souhaite approximer $\mathcal{F}_{1/2}(\eta_f)$ par un polynôme d'ordre inférieur à 12, cela est possible à condition de calculer les coefficients du nouveau polynôme mais la plage pour laquelle la précision

TABLEAU I

Valeur des coefficients a_i de l'équation (8)

a_0	a_1	a_2	a_3
0,765 150	0,604 935	0,190 053	$0,196\ 508 \times 10^{-1}$
a_4	a_5	a_6	a_7
$-0,368\ 691 \times 10^{-2}$	$-0,706\ 886 \times 10^{-3}$	$0,192\ 257 \times 10^{-3}$	$0,210\ 848 \times 10^{-4}$
a_8	a_9	a_{10}	a_{11}
$-0,933\ 254 \times 10^{-5}$	$0,220\ 643 \times 10^{-6}$	$0,200\ 364 \times 10^{-6}$	$-0,261\ 627 \times 10^{-7}$
			a_{12}
			$0,102\ 029 \times 10^{-8}$

TABLEAU II

Précision obtenue sur le calcul de : $\frac{\Delta\mathcal{F}}{\mathcal{F}}$

(Pour les précisions supérieures à 10^{-5} on a reporté la valeur zéro)

η_f	- 4	- 3	- 2	- 1
$\frac{\Delta\mathcal{F}}{\mathcal{F}}$	4×10^{-3}	$1,5 \times 10^{-3}$	$1,6 \times 10^{-4}$	0
η_f	0	1	2	3
$\frac{\Delta\mathcal{F}}{\mathcal{F}}$	0	0	0	$-2,2 \times 10^{-5}$
η_f	4	5	6	7
$\frac{\Delta\mathcal{F}}{\mathcal{F}}$	$-1,2 \times 10^{-4}$	$-5,5 \times 10^{-4}$	$-2,1 \times 10^{-3}$	$-7,3 \times 10^{-3}$
				$-2,2 \times 10^{-2}$

FIG. 1. — Variation de $\frac{\Delta \mathcal{F}}{\mathcal{F}}$ pour différentes approximations polynomiales. Les chiffres correspondent aux courbes d'erreur obtenues en ne conservant que les termes d'ordre inférieur ou égal à 2, 3, 5, 7, 12 du développement donné dans le texte.

[Variation of $\frac{\Delta \mathcal{F}}{\mathcal{F}}$ for different polynomials. The subscript correspond to the error curves obtained by keeping the terms of order $\leq 2, 3, 5, 7, 12$ of the polynomial given in the text.]

est satisfaisante ($< 1\%$ par exemple) est beaucoup plus réduite. Pour un polynôme d'ordre 5 par exemple la précision est meilleure que 1% dans la gamme

$0 \leq \eta_f \leq 6$. Pour un polynôme d'ordre 7 la précision est meilleure que 1% dans la gamme $0 \leq \eta_f \leq 8$. La plage satisfaisante décroît avec l'ordre du polynôme, ce qui explique que pour obtenir une approximation valable on soit conduit à utiliser un polynôme d'ordre assez élevé.

Le développement que nous avons présenté, outre son intérêt dans des expressions analytiques, permet une évaluation précise de la fonction $\mathcal{F}_{1/2}(\eta_f)$ à l'aide d'un simple calculateur de poche et ce dans une plage de variation de η_f très supérieure à celle couverte par les plus récentes expressions publiées ces dernières années. Pour mieux situer ce point nous avons calculé les valeurs de $\frac{\Delta \mathcal{F}}{\mathcal{F}}$ pour l'expression approchée de Joyce et Dixon [5]. Pour $+4 = \eta_f$ l'erreur atteint déjà 5% ce qui est très supérieur à nos résultats.

L'expression polynomiale avec 12 termes devrait donc être susceptible d'intéresser les chercheurs travaillant sur les semiconducteurs tant amorphes que monocristallins.

Remerciements. — Nous remercions MM. N. Giambiasi du LAM, Montpellier, et J. Chevrier du CEES, Montpellier, pour l'aide qu'ils nous ont apportée dans la mise au point des programmes de calcul.

Bibliographie

- [1] BLAKEMORE, J. S., *Semiconductor Statistics* (Pergamon Press, London) 1962.
- [2] KIREEV, P., *La Physique des Semiconducteurs* (Editions Mir, Moscou) 1975.
- [3] MELL, H., *Amorphous and Liquid semiconductors*, J. Stuke and W. Brening Ed. (Taylor and Francis LTD, London) 1974.
- [4] PISTOULET, B., ROBERT, J. L., DUSSEAU, J. M., ENSUQUE, L., *J. Non-Cryst. Solids*, à paraître en 1978.
- [5] JOYCE, W. B., DIXON, R. W., *Appl. Phys. Lett.* **31** (1977).