

# DOS(density of state)

為求得能量變化的允許能量量子狀態密度，我們需要想一個合適的數學模型。在半導體中電子固然可以自由移動，終究還是被限制在晶體中。首先，假設我們想像其如同自由電子被侷限在一個三維的無限位能中的自由電子，其位能表示如：

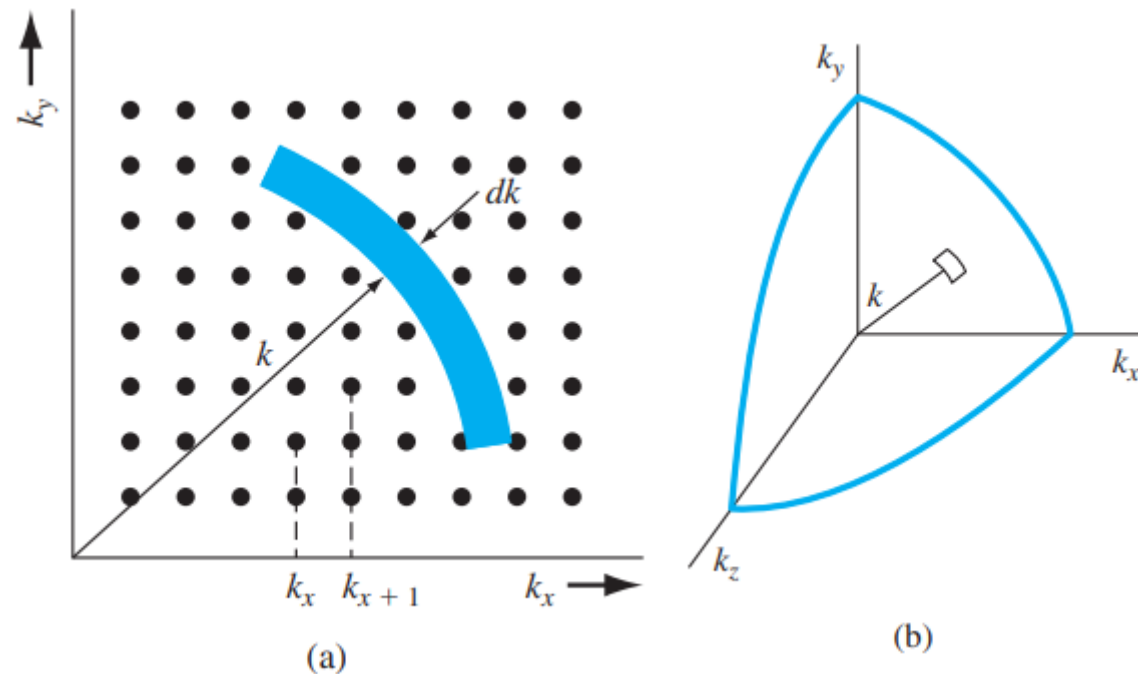
$$V(x,y,z) = 0 \text{ for } 0 < x < a \\ \text{for } 0 < y < a \\ \text{for } 0 < z < a$$

$$V(x,y,z) = \infty \text{ elsewhere}$$

其中我們假設晶體是一個為 $a$ 的立方體。我們可以使用分離變數法來求三維薛丁格波動方程式的解。延伸一為無限位能井，可以推出

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \left( \frac{\pi}{a} \right)^2$$

$n$ 為正整數，負會得到一樣波函數故不能表示為不同量子態



k空間二維允許的量子態

正八分之一的球形k空間

只需要考慮正 $k$ 的部分，在 $k_x$ 方向，可知一個量子狀態距離為  $k_{x+1} - k_x = (n_{x+1}) \frac{\pi}{a} - (n_x) \frac{\pi}{a} = \frac{\pi}{a}$ ，可知一個量子狀態體積 $V_k$ 為

$$V_k = \left( \frac{\pi}{a} \right)^3$$

# DOS(density of state)

現在我們可以決定k空間量子狀態密度。圖b中顯示k空間中的一個微量體積為 $4\pi k^2 dk$ ，因此在k空間量子狀態密度可以表示為

$$g_T(k)dk = 2 \left( \frac{1}{8} \right) \frac{4\pi k^2 dk}{\left( \frac{\pi}{a} \right)^3} \quad (1)$$

第一個係數2乃是將每一個量子狀態允許有兩個自旋狀態考慮；第二個1/8乃是因只需要將正的kx,ky,kz狀態考慮。 $4\pi k^2 dk$ 是考慮微量體積，而 $\left( \frac{\pi}{a} \right)^3$ 是一個量子狀態體積。  
(1)式以參數k將量子狀態密度表示成動量一個函數。現在，我們可以來決定依能量E變化的量子狀態密度函數。對一個自由電子而言，參數E與k之間關係為

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

微分量dk為

$$dk = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}} dE$$

將 $k^2$ 與dk表示帶回(1)則能量介於E與E+dE之間的能量狀態數為

$$g_T(E)dE = \frac{\pi a^3}{\pi^3} \left( \frac{2mE}{\hbar^2} \right) \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}} dE = \frac{4\pi a^3}{h^3} (2m)^{3/2} \sqrt{E} dE \quad (2)$$

(2)式表示在 $a^3$ 的晶格空間體積裡，能量介於E與E+dE之間的能量狀態之總數。如果將上式除以 $a^3$ ，則可以獲得單位體積量子狀態密度。

$$g(E) = \frac{4\pi (2m)^{3/2}}{h^3} \sqrt{E}$$

量子狀態密度是能量E的函數。當自由電子的能量變小，可用量子狀態數也會降低。狀態密度函數具有雙重密度涵義，代表單位體積單位能量的狀態數目。