文章编号： 1672-8785(2008)08-0034-03

用 MATLAB 和数值逼近方法实现费米函数的简捷计算

王忆锋 毛京湘

(昆明物理研究所，云南昆明 650223)

摘 要：介绍了一种利用 MATLAB 和数值逼近理论计算费米函数的简捷方法。计算结果的误差在 10^{-6} 数量级，甚至可以更高。与其他方法相比，该方法具有精度高、使用便捷和速度快等优点。

关键词：费米积分；数值逼近； MATLAB

中图分类号： 0471 **文献标识码**： A

A Simple Method for Calculating Fermi Function with MATLAB and Numerical Approximation

WANG Yi-feng, MAO Jing-xiang

(Kunming Institute of Physics, Kunming 650223, China)

Abstract: In this paper, a simple method for calculating Fermi integral with MATLAB and numerical approximation is presented. The calculation error is in the order of 10^{-6} and even smaller. Compared with other methods, this method has the advantages of high accuracy, simple and fast.

Key words: Fermi integral; numerical approximation; MATLAB

1 引言

在半导体物理、凝聚态物理、天体物理等理论中都要用到费米函数。经典形式的费米函数的定义为

$$F_k(\eta) = \int_0^\infty \frac{\xi^k}{\exp(\xi-\eta)+1} d\xi \tag{1}$$

上式称为 k 次费米—狄拉克积分，简称为费米积分，或称为费米函数。其一般形式可以写为

$$F_k(\eta,\theta) = \int_0^\infty \frac{\xi^k\sqrt{1+(\theta\xi/2)}}{\exp(\xi-\eta)+1} d\xi \tag{2}$$

式中， θ 为变量，当 $\theta=0$ 时，上式即化为经典形式。

以往的费米函数求值方法通常是从图表 [1 ～ 2] 中查出费米积分的值，或者利用近似公式 [3 ～ 5] 进行计算的。这些方法在覆盖范围、计算精度和使用简捷性等方面均有局限性。本文介绍一种利用 MATLAB 和数值逼近理论计算费米函数的简捷方法。

2 半导体理论中出现的费米函数

费米积分在半导体理论中多次出现。例如，以 N 型半导体为例，热平衡态下的扩散系数可以写为 [1]

$$D_n = \frac{2k_B T}{q}\mu_n \frac{F_{1/2}(\eta)}{F_{-1/2}(\eta)} \tag{3}$$

收稿日期：2008–04–03

作者简介：王忆锋 (1963 ——)，男，湖南零陵人，高级工程师，目前主要从事器件仿真研究工作。

式中，k_B 为玻耳兹曼常数，T 为温度，q 为电子电荷，μ_n 为电子迁移率。

载流子浓度的计算公式可以写为 [6]

$$n=\frac{2N_c}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\infty}\frac{\varepsilon^{1/2}\sqrt{1+\theta\xi}(1+2\theta\xi)}{\exp(\xi-\eta)+1}d\xi \qquad (4)$$

注意，上式可以分解为一个 1/2 次费米函数和一个 3/2 次费米函数之和。特别是当 $\theta=0$ 时，上式可以写为

$$n=\frac{2N_c}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\infty}\frac{\xi^{1/2}}{\exp(\xi-\eta)+1}d\xi=\frac{2N_c}{\sqrt{\pi}}F_{1/2}(\eta) \qquad (5)$$

另外，对于 $Hg_{1-x}Cd_xTe$ 半导体，本征载流子浓度可按下式计算 [3]。

$$n_i=1.29\times10^{14}(E_gT)^{3/2}\left[F_{1/2}(\eta)+\frac{15}{4}\left(\frac{k_BT}{E_g}\right)F_{3/2}(\eta)+\frac{105}{32}\left(\frac{k_BT}{E_g}\right)^2F_{5/2}(\eta)\right] \qquad (6)$$

上述计算公式中出现的指数 k 分别为 $-1/2$、$1/2$、$3/2$ 和 $5/2$ 的费米积分。从已发表的文献资料来看，关于 $F_{1/2}(\eta)$ 的研究较多。最简单的情况是，当 $\eta\geq0$ 时，取 [6]

$$\frac{1}{\exp(\xi-\eta)+1}\approx\exp[-(\xi-\eta)] \qquad (7)$$

做了这样的简化后，$F_{1/2}(\eta)$ 便可以用 MATLAB 的 int( ) 命令直接做符号积分计算。$F_{1/2}(\eta)$ 的其他近似计算公式有 [2,3]

$$F_{1/2}(\eta)=\begin{cases}\dfrac{4}{3\sqrt{\pi}}(\eta^2+1.7)^{3/4} & \eta>1.3\\ [0.27+\exp(-\eta)]^{-1} & \eta\leq1.3\end{cases} \qquad (8)$$

$$F_{1/2}(\eta)=\frac{4\eta^{3/2}}{3\sqrt{\pi}}+\frac{\pi^{3/2}}{6\sqrt{x}},\quad \eta>1.25 \qquad (9)$$

$$F_{1/2}(\eta)=\begin{cases}\dfrac{\sqrt{\pi}}{2}\exp[\eta(1-2^{-3/2}\exp(\eta))+\cdots] & \eta\ll-1\\ \dfrac{2}{3}\eta^{3/2}(1+0.125\pi^2\eta^{-2}+0.267\eta^{-4}+\cdots) & \eta\gg1\end{cases} \qquad (10)$$

以及

$$F_{1/2}(\eta)\approx\frac{2\sqrt{\pi}}{3\sqrt{\pi}a^{-3/8}+4\exp(-\eta)},\quad -\infty<\eta<\infty \qquad (11)$$

式中

$$a=\eta^4+33.6\eta\{1-0.68\exp[-0.17(\eta+1)^2]\}+50 \qquad (12)$$

除了 $F_{1/2}(\eta)$ 外，文献中很少见到有关 $F_{-1/2}(\eta)$、$F_{3/2}(\eta)$ 和 $F_{5/2}(\eta)$ 的近似计算公式，更不用说任意指数 k 的费米积分计算公式。另外，给出费米函数积分数值表的数学工具书较少，故要通过查表得到费米函数值不是很方便。

3 用 MATLAB 和数值逼近理论计算费米函数

相比参考文献 [1 ~ 8] 中提到的各种计算方法，最简捷的途径也许是用 3 ~ 5 条语句编写一个 MATLAB 函数程序来进行计算。

根据数值逼近理论 [9]，无穷积分可以按极限过程来计算。令 $0<r_1<r_2<\cdots$ 是一个趋于无穷的序列，根据积分性质可以写出

$$I=\int_0^{\infty}f(x)dx=\int_0^{r_1}f(x)dx+\int_{r_1}^{r_2}f(x)dx+\cdots+\int_{r_m}^{r_{m+1}}f(x)dx+\cdots \qquad (13)$$

式中，右端的每一项积分都是正常积分。在实践中常做如下判断：当 $\int_0^{r_{m-1}}f(x)dx\approx\int_0^{r_m}f(x)dx$ 时就停止计算，并且认为

$$I=\int_0^{\infty}f(x)dx\approx I_m=\int_0^{r_m}f(x)dx \qquad (14)$$

r_m 可以取为 2^m 或 Cm (C 为正常数)。

例如，对于 k 次费米函数，可以在 MATLAB 中编写如下函数：

```
% MATLAB Program Name: fermi.m
function f=fermi(a,b,k,eta)
xi=a:(b-a)/10000000:b; % 10000000 为步距，其取值大小决定积分计算精度；
fermi=(xi).^(k)./(exp(xi–eta)+1);
f=trapz(xi,fermi);
```

然后作为命令直接调用即可以得到数值逼近结果。作为一个例子，设 $\eta=10$，取 $r_m=2^m$，则有

$$F_{1/2}(10)=\int_0^{\infty}\frac{\sqrt{\xi}}{\exp(\xi-10)+1}d\xi\approx\int_0^{r_m}\frac{\sqrt{\xi}}{\exp(\xi-10)+1}d\xi \qquad (15)$$

依次取不同的 r_m 值，上述正常积分的计算结果如表 1 所示。从表中可以看出，当 $m=5$ 即 $r_m=2^5=32$ 以后，计算结果的小数点后七位已经稳定下来，因此可以认为 $F_{1/2}(10)\approx 21.344471$，其精度为 10^{-6}。

表 1 费米函数 $F_{1/2}(10)$ 的数值逼近值

m	$F_{1/2}(10)$
0	0.66660945886658
⋮	⋮
4	21.33426798854211
5	21.34447148959663
6	21.34447148879293

MATLAB 提供了一个高精度数值积分命令 quadl( )，该命令使用 Lobbato 算法，其缺省精度为 10^{-6} [10]。在 MATLAB 命令窗口中输入下列语句

```
≫ format long
≫ f=inline('sqrt(xi)./(exp(xi–10)+1)','xi');
≫ fermi=quadl(f,0,32)
结果为
fermi =
21.34447130587095
```

可见，上述两种计算结果的小数点后六位是相同的，换言之，它们具有相同的精度。但是 quadl( ) 不宜编写为可以计算任意指数和参数的费米函数程序。

对于负指数的费米积分，例如 $F_{-1/2}(\eta)$，可以采用上述类似方法，首先选定一个 r_m，然后做变量代换，令 $\xi=r_m t^2$，则有 $d\xi=2tdt$，相应地

$$\begin{aligned}F_{-1/2}(\eta)&=\int_0^\infty\frac{\xi^{-1/2}}{\exp(\xi-\eta)+1}d\xi\\&\approx\int_0^{r_m}\frac{\xi^{-1/2}}{\exp(\xi-\eta)+1}d\xi\\&=2\sqrt{r_m}\int_0^1\frac{1}{\exp(r_m t^2-\eta)+1}dt\end{aligned}\tag{16}$$

通过这样的处理，原函数的奇性被去掉而成为一个正常积分，因而就容易用 MATLAB 的数值积分命令 trapz( )、 quad( ) 或 quadl( ) 等进行计算了。

4 结论

如上所述，利用 MATLAB 提供的积分命令和数值逼近方法计算费米函数，容易得到精度为 10^{-6}、甚至更高精度的计算结果。这种方法在计算精度、速度、便捷性等方面均优于各种文献中所列结果或方法。

参考文献

[1] Helmut Wolf. Semiconductors [M]. John Wiley & Sons, Inc., 1971.

[2] 陈治明，王建农．半导体器件的材料物理学基础 [M]. 北京：科学出版社， 2003.

[3] 褚君浩．窄禁带半导体物理学 [M]. 北京：科学出版社， 2005.

[4] 孟庆巨，刘海波，孟庆辉．半导体器件物理 [M]. 北京：科学出版社， 2005.

[5] Robert F Pierret, 黄如，王漪，等. 半导体器件基础 [M]. 北京：电子工业出版社， 2004.

[6] Z J Quan, G B Chen, L Z Sun, et al. Effects of carrier degeneracy and conduction band non-parabolicity on the simulation of HgCdTe photovoltaic devices [J]. Infrared Physics & Technology, 2007, 50(1): 1–8.

[7] 傅英，陆卫．半导体量子器件物理 [M]. 北京：科学出版社， 2006.

[8] D Bednarczyk, J Bednarczyk. The approximation of the Fermi-Dirac integral [J]. Physics Letters, 1978, 64A: 409.

[9] 李岳生，黄友谦．数值逼近 [M]. 北京：人民教育出版社， 1978.

[10] E B Magrab, S Azarm, B Balachandran, et al. MATLAB 原理与工程应用 [M]. 北京：电子工业出版社， 2002.