ΤΜΗΜΑ ΗΛΕΚΤΡΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΚΑΙ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ ΥΠΟΛΟΓΙΣΤΩΝ
ΔΗΜΟΚΡΙΤΕΙΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΘΡΑΚΗΣ
Επίκ. Καθ. Δήμητρα Γκιργκινούδη

ΕΡΓΑΣΤΗΡΙΟ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΗΛΕΚΤΡΟΤΕΧΝΙΚΩΝ ΚΑΙ ΗΛΕΚΤΡΟΝΙΚΩΝ ΥΛΙΚΩΝ
Φύλλο ασκήσεων 7
Θεωρία ενεργειακών ζωνών

Άσκηση 1. Να υπολογίσετε την πιθανότητα κατάληψης, από ένα ηλεκτρόνιο, μιας ενεργειακής στάθμης με ενέργεια 0,11eV κάτω από τη στάθμη Fermi (E_F), στους 300K και 1200K. Για τις ίδιες θερμοκρασίες ποιά είναι η πιθανότητα κατάληψης μιας ενεργειακής στάθμης που βρίσκεται 0,11eV πάνω από την E_F;

Λύση

Η πιθανότητα κατάληψης μιας ενεργειακής στάθμης με ενέργεια E από ένα ηλεκτρόνιο είναι:

$$f(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1} \qquad \text{(Fermi-Dirac)} \qquad (1)$$

α) θέτοντας στην παραπάνω εξίσωση όπου $E=E_F$-0,11eV οπότε $E-E_F$=-0,11eV, έχουμε ότι f(E)=0,986 ή 98,6% για T=300K και f(E)=0,744 ή 74,4% για T=1200K.

β) Θέτοντας $E=E_F$+0,11eV οπότε E-EF=0,11eV, έχουμε:

για T=300K, f(E)=0,014, και για T=1200K, f(E)=0,256

Άσκηση 2. Να υπολογίσετε τη θερμοκρασία στην οποία υπάρχει πιθανότητα 1% μία ενεργειακή στάθμη 0,30eV κάτω από τη στάθμη Fermi να είναι κενή (δηλ. να μην περιέχει ένα ηλεκτρόνιο). Η ενέργεια Fermi του υλικού είναι 6,25eV.

Λύση

Η πιθανότητα μία στάθμη να είναι κενή είναι:

$$1 - f(E) = 1 - \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{kT}} + 1}$$

$$0,01 = 1 - \frac{1}{e^{(\frac{5,95-6,25}{kT})} + 1} = 1 - \frac{1}{e^{(-\frac{0,30}{kT})} + 1}$$

Λύνοντας ως προς kT , βρίσκουμε kT=0,06529eV, οπότε T=756K.

Άσκηση 3. Να υπολογίσετε τον αριθμό καταστάσεων g(E) ανά μονάδα όγκου μεταξύ των ενεργειακών σταθμών 0 eV και 1 eV (1 eV=1,6x10^{-19}J).

Λύση

$$N=\int_0^{1eV} g(E).\, dE = \frac{4\pi}{h^3}\left(2m\right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{1\,eV} E^{\frac{1}{2}} dE = \frac{4\pi}{h^3}\left(2m\right)^{\frac{3}{2}} \frac{2}{3} E^{\frac{3}{2}} \text{ ανά μονάδα όγκου}$$

$$N = \frac{4\pi[2(9.11x10^{-31})]^{\frac{3}{2}}}{(6,625x10^{-34})^3} \frac{2}{3} (1,6x10^{-19})^{\frac{3}{2}} = 4,5x10^{27} m^{-3}$$

δηλαδή N= 4,5x10^{27} καταστάσεις m^{-3}

Άσκηση 4. Να υπολογίσετε την ενέργεια αναφορικά με την E_F (δηλαδή $E-E_F$) ως προς kT στην οποία η διαφορά μεταξύ της προσέγγισης Boltzmann και στη συνάρτηση Fermi-Dirac θα είναι 5% της συνάρτησης Fermi-Dirac.

Λύση

Fermi-Dirac: $f = \dfrac{1}{1+e^{(E-E_f)/kT}}$,   Boltzmann: $f = e^{-(E-E_f)/kT}$

$$\text{Σφάλμα}=\frac{e^{-(E-E_f)/kT}-\dfrac{1}{e^{\frac{E-E_f}{kT}}+1}}{\dfrac{1}{e^{\frac{E-E_f}{kT}}+1}}=0,05$$

Εάν πολλαπλασιάσουμε αριθμητή και παρανομαστή με το $e^{\frac{E-E_f}{kT}}+1$ έχουμε:

$$e^{\left(-\frac{E-E_f}{kT}\right)} \cdot \left[e^{\left(\frac{E-E_f}{kT}\right)}+1\right]-1=0,05$$

$$e^{\left(-\frac{E-E_f}{kT}\right)}=0,05 \Rightarrow E-E_f = kT\ln\left(\frac{1}{0,05}\right) \approx 3kT$$

Άσκηση 5. Σε μονοσθενές μέταλλο η συγκέντρωση των ελεύθερων ηλεκτρονίων είναι N/V=8,1x10^{22} άτομα/cm^3. Να υπολογιστούν **α)** η ενέργεια Fermi, E_F, **β)** η πυκνότητα των καταστάσεων $g(E_F)$ και **γ)** ο αριθμός των ηλεκτρονίων ανά μονάδα ενέργειας για ένα υλικό όγκου 5cm^3 στους T=0K. (Δίνονται: $\hbar$ =1,054×10^{-34}J·s, m=9,1·10^{-31}Kg, 1eV=1,6·10^{-19}J)

Λύση

α) Η ενέργεια Fermi εξαρτάται από τη συγκέντρωση των ελεύθερων ηλεκτρονίων:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{3\pi^2 N}{V}\right)^{2/3} = \frac{(1,054\cdot 10^{-34})^2}{2\cdot 9,1\cdot 10^{-31}}\left(3\cdot(3,14)^2\cdot\frac{8,1\cdot 10^{22}}{10^{-6}}\right)^{2/3} \Rightarrow$$

$$E_F = 6,1\cdot 10^{-39}\cdot 1,8\cdot 10^{20} = 10,68\cdot 10^{-19}\,J = 6,67eV$$

για τις μονάδες ισχύει:

$$\frac{(J\cdot s)^2}{Kgr}\left(m^{-3}\right)^{2/3} = \frac{J\cdot J\cdot s^2}{Kgr}\left(m^{-2}\right) = J\,\frac{Kgr\cdot m^2\cdot s^2}{Kgr\cdot s^2}\cdot m^{-2} = J$$

β) η πυκνότητα των καταστάσεων, $g(E_F)$ δίνεται από τη σχέση:

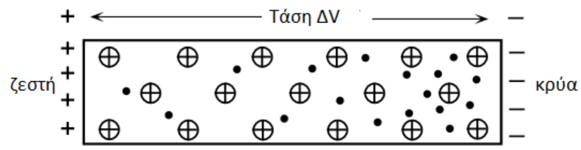
$$g(E_F) = \frac{V}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E_F^{1/2} = \frac{5\cdot 10^{-6}}{2\pi^2}\left(\frac{2\cdot 9,1\cdot 10^{-31}}{\left(1,054\cdot 10^{-34}\right)^2}\right)^{3/2}\left(10,68\cdot 10^{-19}\right)^{1/2} \Rightarrow$$

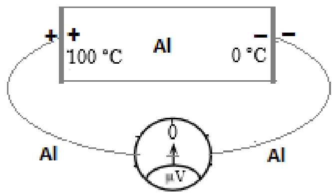
$$g(E_F) = 2,54\cdot 10^{-7}\cdot 2,1\cdot 10^{57}\cdot 1,03\cdot 10^{-9} = 5,5\cdot 10^{41} J^{-1}$$

γ) Στο απόλυτο μηδέν (T=0K) όλες οι καταστάσεις που έχουν ενέργεια ίση με E_F, είναι κατειλημμένες από ηλεκτρόνια. Άρα,

$$n(E) = g(E_F) = 5,5\cdot 10^{41}\,electrons/J = 8,8\cdot 10^{22}\,electrons/eV$$

Άσκηση 6. Θερμοηλεκτρικά φαινόμενα-Ενέργεια Fermi (σχετικό με τις Εργαστηριακές ασκήσεις) Εισαγωγή. Το φαινόμενο Seebeck: όταν τα άκρα του μετάλλου διατηρούνται σε διαφορετικές θερμοκρασίες, στο θερμό άκρο περισσότερα ηλεκτρόνια θα είναι διεγερμένα σε ενεργειακές στάθμες υψηλότερες από την στάθμη E_{F0} στους 0K (λόγω διαφορετικής ενεργειακής κατανομής Fermi-Dirac),και έτσι θα έχουν μεγαλύτερες ταχύτητες από ότι στην κρύα περιοχή, με αποτέλεσμα τη ροή ηλεκτρονίων από το θερμό στο ψυχρό άκρο και την εμφάνιση θερμικής emf στα άκρα του. Η διαφορά δυναμικού στα άκρα του αγωγού λέγεται δυναμικό Seebeck (αντισταθμίζει τη ροή ηλεκτρονίων λόγω ΔΤ) και ισούται με $\Delta V=S\Delta T$, όπου S λέγεται συντελεστής Seebeck $S = \frac{x\pi^2 k^2}{3qE_{F0}}.T$, όπου x είναι ένα αδιάστατο μέγεθος (ο δείκτης Mott-Jones) χαρακτηριστικό του υλικού.

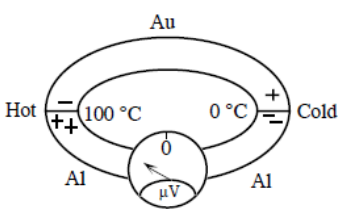




Τα άκρα της ράβδου Al διατηρούνται σε διαφορετικές θερμοκρασίες. Αν χρησιμοποιήσουμε δύο σύρματα Al για να μετρήσουμε την διαφορά δυναμικού Seebeck στα άκρα της ράβδου με βολτόμετρο, θα δούμε μηδενική ένδειξη (γιατί;)

Εφαρμογή του φαινομένου Seebeck αποτελεί το θερμοζεύγος που χρησιμοποιείται στις Εργαστηριακές Ασκήσεις για να προσδιορίσετε τη θερμοκρασία του δείγματος.

<u>Εκφώνηση άσκησης:</u> Θεωρείστε ένα θερμοζεύγος που αποτελείται από ζεύγος σύρματος αλουμινίου Al και σύρματος χρυσού Au. Η μία επαφή είναι στους 100^0C και η άλλη στους 0^0C.Ένα βολτόμετρο (με πολύ μεγάλη αντίσταση εισόδου) παρεμβάλλεται στο σύρμα αλουμινίου (βλέπε παρακάτω σχήμα). Να προσδιορίσετε την emf που δείχνει το βολτόμετρο κάνοντας χρήση των ιδιοτήτων του Al και του Au του παρακάτω πίνακα.



Το θερμοζεύγος Al-Au (αριστερά στο σχήμα). Η ψυχρή επαφή στους 0^0C χρησιμοποιείται σαν θερμοκρασία αναφοράς και η ζεστή επαφή για να προσδιορίσουμε την θερμοκρασία της. Στην άσκηση θερμαίνεται στους 100^0C.Τα σύρματα Al και Au έχουν διαφορετικούς συντελεστές Seebeck S και ως αποτέλεσμα θα δούμε μη μηδενική ένδειξη στο βολτόμετρο.

Ιδιότητες	Al (αγωγός Α)	Au (αγωγός Β)
Ατομική μάζα (g/mol)	27,0	197
Πυκνότητα (g/cm^3)	2,7	19,3

Ηλεκτρόνια ανά άτομο	3	1
x (δείκτης Mott-Jones)	2,78	-1,48

Για κάθε μεταλλικό σύρμα υπάρχει ένα δυναμικό Seebeck ΔV που προκύπτει ολοκληρώνοντας το συντελεστή Seebeck S:

$$\Delta V = \int_{T_0}^{T} S\, dT = \int_{T_0}^{T} = -\frac{x\pi^2 k^2 T}{3eE_{FO}} dT = -\frac{x\pi^2 k^2}{6eE_{FO}}(T^2 - T_0^2) \quad (1)$$

Η emf (V_{AB}) που αναπτύσσεται είναι: $V_{AB} = \Delta V_A - \Delta V_B$

όπου A=Al και B=Au, T_0=273K και T_1=373K. Για να βρούμε την ΔV_A και ΔV_A υπολογίζουμε την ενέργεια Fermi E_{F0A} και E_{F0B} για κάθε μέταλλο (η οποία εξαρτάται από τη συγκέντρωση των ηλεκτρονίων n) από την παρακάτω σχέση:

$$E_{FO} = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{3n}{\pi}\right)^{\frac{2}{3}}$$

Όπου n =ατομική πυκνότητα $\rho_{\alpha\tau o\mu.}$x σθένος (=3 και 1 αντίστοιχα για το Al και τον Au). Από την πυκνότητα μάζας και την ατομική μάζα του παραπάνω πίνακα βρίσκουμε την $\rho_{\alpha\tau o\mu}$ για το Al:

$$n_{Al} = \frac{N_A d}{M_{at}} = \frac{(6{,}022x10^{23} mol^{-1})(\frac{2700kg}{m^3})}{(0{,}027\ kg/mol} = 6{,}022x10^{28} m^{-3}$$

$$n = 3n_{Al} = 1{,}807x10^{29} m^{-3}$$ οπότε η E_{F0A} είναι

$$E_{FOA} = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{3n}{\pi}\right)^{\frac{2}{3}} = \frac{(6{,}626x10^{-34})^2}{8(9{,}109x10^{-31})} = \left(\frac{3(1{,}807x10^{29})}{\pi}\right)^{2/3}$$

$$E_{FOA} = 1{,}867x10^{-18}\text{J ή } 11{,}66\text{ eV}$$

Με τον ίδιο τρόπο βρίσκουμε την $E_{FOB} = 5{,}527\ eV$

Αντικαθιστούμε τις τιμές για το Al και το Au: E_{F0A}, E_{F0B} και x_A, x_B (του παραπάνω πίνακα) στη σχέση (1), και βρίσκουμε:

$$\Delta V_A = -\frac{\pi^2 k^2 x_A}{6eE_{FOA}}(T^2 - T_0^2) = -188{,}4\ \mu V$$

$$\Delta V_B = -\frac{\pi^2 k^2 x_B}{6eE_{FOB}}((T^2 - T_0^2) = 211{,}3\ \mu V$$

Το μέγεθος της διαφοράς τάσης είναι: $|V_{AB}| = |-188{,}4\ \mu V - 211{,}3\mu V\ |$=399,7 μV

Προσοχή Το φαινόμενο Seebeck εμφανίζεται και στους ημιαγωγούς όταν τα άκρα του διατηρούνται σε διαφορετικές θερμοκρασίες ενώ το δυναμικό Seebeck είναι μεγαλύτερο από τα μέταλλα.

Ασκήσεις για λύση

Άσκηση 1. Να υπολογίσετε την πιθανότητα κατάληψης από ένα ηλεκτρόνιο μιας ενεργειακής στάθμης με ενέργεια 3kT πάνω από την ενεργειακή στάθμη Fermi (E_F) στους 300K.(Απάντηση 4,74%).

Άσκηση 2. Η ενέργεια Fermi του αργύρου είναι 5,51 eV. Να υπολογίσετε το εύρος ενέργειας στο οποίο η πιθανότητα μεταβάλλεται από 0,9 μέχρι 0,1 στους 300K. (Απάντηση 5,45 eV $<E_F<$5,57 eV).

Άσκηση 3. Να υπολογίσετε α) την πιθανότητα κατάληψης από ένα ηλεκτρόνιο μιας ενεργειακής στάθμης με ενέργεια $E=E_F+0,5$eVστους 0K και 300K, β) την πιθανότητα να είναι κενή μία ενεργειακή στάθμη με ενέργεια $E=E_F-0,5$ eV.(Απάντηση α) 0% στους 0K , 4,13x10^{-7}% στους 300K, β) 0% στους 0K ,4,13x10^{-7}% στους 300K).

Άσκηση 4. Ένα μέταλλο περιέχει 10^{28} ελεύθερα ηλεκτρόνια/m^3.Να υπολογίσετε την πυκνότητα ηλεκτρονίων στην ενεργειακή περιοχή μεταξύ 2,795 eV μέχρι 2,805 eV , στους 300K. (Απάντηση: 8x$10^6$$m^{-3}$).

Άσκηση 5. Να υπολογίσετε την ενέργεια Fermi στους 0K για τον χαλκό. Δίνεται ότι για κάθε άτομο υπάρχει ένα ελεύθερο ηλεκτρόνιο, η πυκνότητα του χαλκού είναι 8920Kgm^{-3} και το ατομικό βάρος είναι 63,54 (Απάντηση: 7,06 eV)

Άσκηση 6. Να υπολογίσετε το πλήθος των ηλεκτρονίων ανά μονάδα όγκου που καταλαμβάνουν περιοχή ενεργειών εύρους κατά 0,5 eV μικρότερου της ενέργειας Fermi στο μεταλλικό νάτριο στους 0K.(Δίνονται AB=23, πυκνότητα=0,97gr/cm^3). Απάντηση: E_F=3,15 eV, n=5,8x10^{27}electrons/cm^3.