1. *Osoita, että metallin johtavuuselektronien keskimääräinen energia hyvin alhaisissa lämpötiloissa on $3/5\,E_F$. Vihje: elektronisysteemin kokonaisenergia on*

$$U_{total} = \int_0^\infty D(E)\, f(E)\, E\, dE$$

*missä $D(E)$ on tilatiheys ja $f(E)$ on Fermifunktio.*

Kokonaisenergia on $U_{total} = \int_0^\infty D(E)\, f(E)\, E\, dE$, jossa tilatiheys on $D(E) = \frac{8\pi V\left(2m_e^3\right)^{1/2}}{h^3}\sqrt{E}$

ja Fermi-Dirac –jakaumafunktio on $f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_BT}+1}$. Kun $T \to 0$, niin $f(E) \to 1$ välillä $[0, E_F]$. Kokonaisenergiaksi saadaan siis

$U_{total} = \int_0^{E_F} D(E)\, E\, dE = \frac{8\pi V\left(2m_e^3\right)^{1/2}}{h^3}\int_0^{E_F} E^{3/2}\, dE = \frac{2}{5}\cdot\frac{8\pi V\left(2m_e^3\right)^{1/2}}{h^3}E_F^{5/2}$. Sijoitetaan tähän

Fermi-energia elektronikonsentraation funktiona $E_F = \frac{\hbar^2}{2m_e}\left(3\pi^2 n\right)^{2/3} = \frac{h^2}{8\pi^2 m_e}\left(3\pi^2\right)^{2/3}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}$

$\Rightarrow$

$$U_{total} = \frac{2}{5}\cdot\frac{8\pi V\left(2m_e^3\right)^{1/2}}{h^3}\left[\frac{h^2}{8\pi^2 m_e}\left(3\pi^2\right)^{2/3}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}\right]^{5/2} =$$

$$= \frac{2}{5}\cdot\frac{8\pi V\left(2m_e^3\right)^{1/2}}{h^3}\,\frac{h^5}{32\cdot 4\sqrt{2}\cdot\pi^5 m_e^{5/2}}\left(3\pi^2\right)^{5/3}\left(\frac{N}{V}\right)^{5/3} =$$

$= \frac{1}{5}\cdot\frac{V}{m_e}\frac{h^2}{8\pi^4}\left(3\pi^2\right)^{5/3}\left(\frac{N}{V}\right)^{5/3}$. Keskimääräinen energia per elektroni on

$E = \frac{U_{total}}{N} = \frac{1}{5}\cdot\frac{1}{m_e}\frac{h^2}{8\pi^4}\left(3\pi^2\right)^{5/3}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3}$. Järjestetään Fermi-energia uudelleen lausekkeeseen:

$E_{ave} = \frac{U_{total}}{N} = \frac{1}{5}\cdot\frac{1}{m_e}\frac{h^2}{8\pi^4}\left(3\pi^2\right)^{5/3}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} = \frac{3}{5}\cdot\frac{\pi^2}{\pi^2}\frac{h^2}{8\pi^2 m_e}\left(3\pi^2\right)^{2/3}\left(\frac{N}{V}\right)^{2/3} = \frac{3}{5}E_F$.

2. *Laske millä energialla parabolisen johtavuusvyön elektronien jakaumalla on maksimiarvo 3-dimensioisessa puolijohteessa käyttäen Maxwell-Bolzmann -jakaumaa.*

Elektronitiheys johtavuusvyöllä $n = \int_{E_C}^\infty f(E)\, N_e(E)\, dE$, missä $N(E) = \frac{\sqrt{2}\left(m^*\right)^{3/2}\left(E-E_c\right)^{1/2}}{\pi^2\hbar^3}$

Maxwell-Bolzmann -approksimaatio: $f(E) = \exp\left(\frac{E_F - E}{k_BT}\right)$

Elektronitiheys energiayksikköä kohden saadaan derivoimalla, eli $\frac{dn}{dE}$.

Maksimiarvo tämän derivaatan nollakohdassa $\frac{d^2n}{dE^2} = 0$.

$$\frac{dn}{dE} = C \cdot \sqrt{E - E_c} \cdot e^{(E-E_F)/kT}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d^2n}{dE^2} = C\left[\sqrt{E-E_c}\,\frac{1}{kT}e^{(E-E_F)/kT} - \frac{e^{(E-E_F)/kT}}{2\sqrt{E-E_c}}\right] = 0$$

$$\Rightarrow \quad \frac{1}{kT}\sqrt{E-E_c} = \frac{1}{2\sqrt{E-E_c}} \quad \Rightarrow \quad E - E_c = \frac{1}{2}kT$$

Elektronitiheydellä on maksimi energialla $E = E_c + \frac{1}{2}kT \approx E_c + 13meV$, kun $T = 300K$.

3. *Osoita, että puolijohteen parabolisen johtavuusvyön efektiivinen tilatiheys $N_{eff}^{C}$ on likimäärin yhtäsuuri kuin tilojen lukumäärä johtavuusvyön alareunasta mitatulla $\Delta E = 1,2\ kT$ leveällä kaistalla (eli tilat ovat keskittyneet aivan vyön alareunaan).*

Tilojen lkm kaistaleella $E_c \to E_c + 1.2kT$:

$$N = \int_{E_c}^{E_c+1.2kT} N_c(E)\,dE; \qquad N_c(E) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2}\left(\frac{m_e^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}(E-E_c)^{\frac{1}{2}}$$

$$N = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2}\left(\frac{m_e^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \int_{E_c}^{E_c+1.2kT}(E-E_c)^{\frac{1}{2}}dE = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2}\left(\frac{m_e^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \Big/_{E_c}^{E_c+1.2kT}\frac{2}{3}(E-E_c)^{\frac{3}{2}}$$

$$= \frac{2\sqrt{2}}{3\pi^2}\left(\frac{m_e^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot (1.2kT)^{\frac{3}{2}} = \frac{4(1.2)^{\frac{3}{2}}}{3\sqrt{\pi}} \cdot 2\left(\frac{m_e^* kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \approx 0.98886 \cdot N_{eff} \approx N_{eff}$$

4. *Laske GaAs-itseispuolijohteen elektroni- ja aukkotiheys $n_i$, kun T = 300 K ja T = 500 K. Energia-aukon lämpötilariippuvuus on yleisesti (ns. Varshnin yhtälö):*

$$E_g(T/K) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T+\beta},$$

*missä GaAs:lle* $E_g(0\ \mathrm{K}) = 1,519\,\mathrm{eV}$, $\alpha = 5,405 \cdot 10^{-4}\ \mathrm{eV/K}$, $\beta = 204\ \mathrm{K}$. *GaAs:n efektiiviset massat ovat* $m_e^* = 0,067\,m_0$ *ja* $m_h^* = 0,45\,m_0$.

$$E_g\left(\frac{T}{K}\right)=1,519-\frac{5,405\times10^{-4}\,T^2}{T+204}\,eV \Rightarrow \; E_g\left(300\ K\right)=1,4225\ eV \text{ ja } E_g\left(500\ K\right)=1,3271\ eV$$

$m_e^* = 0,067m_0 \quad m_h^* = 0,450m_0 \quad k_B = 1,38\cdot10^{-23}\ J/K \quad h = 6,63\cdot10^{-34}\ Js \quad e = 1,602\cdot10^{-19}\ As$

Itseispuolijohteen varauksenkuljettajatiheys $n_i = \sqrt{N_c N_v}\,e^{-\frac{E_g}{2kT}}$

$$N_c = \frac{2}{h^3}\left(2\pi m_e^* kT\right)^{\frac{3}{2}} = 4,82\cdot10^{21}\left(\frac{m_e^*}{m_0}T\right)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{m^3}; \quad N_v = \frac{2}{h^3}\left(2\pi m_h^* kT\right)^{\frac{3}{2}} = 4,82\cdot10^{21}\left(\frac{m_h^*}{m_0}T\right)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{m^3}$$

$$\Rightarrow \sqrt{N_c N_v} = 4,82\cdot10^{21}\left(\frac{m_e^*}{m_0}\frac{m_h^*}{m_0}T^2\right)^{\frac{3}{4}}\frac{1}{m^3}$$

$$n_i\left(300K\right) = 4,82\cdot10^{21}\left(0,067\cdot0,45\cdot\left(300\right)^2\right)^{\frac{3}{4}}\cdot e^{-\frac{1,4225\cdot1,602\cdot10^{-19}}{2\cdot1,38\cdot10^{-23}\cdot300}} = 2,0\cdot10^{12}\,\frac{1}{m^3} \approx \; 2\cdot10^{6}\,\frac{1}{cm^3}$$

$$n_i\left(500K\right) = 4,82\cdot10^{21}\left(0,067\cdot0,45\cdot\left(500\right)^2\right)^{\frac{3}{4}}\cdot e^{-\frac{1,3271\cdot1,602\cdot10^{-19}}{2\cdot1,38\cdot10^{-23}\cdot500}} = 8,0\cdot10^{17}\,\frac{1}{m^3} \approx 8\cdot10^{11}\,\frac{1}{cm^3}$$

Huomaa, että tulos riippuu herkästi käytettyjen vakioiden ja välitulosten tarkkuudesta!