Pozo cuántico cuadrado infinito de GaAs de ancho L. Se dopa la banda de conducción (masa efectiva m^*) con una densidad n (por unidad de área) de electrones. Suponiendo $T = 0$:

a) ¿A qué densidad se empieza a llenar la segunda subbanda?

Para un pozo cuadrado infinito de ancho a se tienen los niveles de energía:

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 \tag{1}$$

si $t << (E_F - \varepsilon_j)/k_B$...

$$n_{2D} = \frac{m}{\pi\hbar^2}\sum_j (E_F - \varepsilon_j)\Theta(E_F - \epsilon_j) \tag{2}$$

Si $E_F < \varepsilon_2$ entonces:

$$n_{2D} = \frac{m}{\pi\hbar^2}(E_F - \varepsilon_1)(1) \tag{3}$$

Luego, la segunda subbanda se empieza a llenar cuando $E_F = \varepsilon_2$ a la densidad:

$$n_{2D} = \frac{m}{\pi\hbar^2}\left[\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(2)^2 - \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}(1)^2\right] = \frac{3\pi}{2a^2} \tag{4}$$

b) Obtenga la energía de Fermi en función de la densidad hasta que la energía de Fermi llega al mínimo de la tercera subbanda.

Ahora, si $\varepsilon_2 < E_F < \varepsilon_3$, tenemos:

$$n_{2D} = \frac{m}{\pi\hbar^2}\left[(E_F - \varepsilon_1) + (E_F - \varepsilon_2)\right] \tag{5}$$

esto es:

$$n_{2D} = \frac{m}{\pi\hbar^2}\left[(E_F - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2}) + (E_F - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2}4)\right] = \frac{m}{\pi\hbar^2}\left(2E_F - \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2}5\right) \tag{6}$$

de donde:

$$E_F = \left(n_{2D} + \frac{5\pi}{2a^2}\right)\frac{\pi\hbar^2}{2m} \tag{7}$$

c) Calcule la energía total en función de la densidad y la energía de Fermi.

La energía de un electrón en la subbanda n viene dada por:

$$E_n(k_x, k_y) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2}{a^2}n^2 + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} \tag{8}$$

Para calcular la energía total de la configuración:

$$E_{Total} = \int_{-\infty}^{\infty} n(E)\, E\, f(E, E_F, T) dE \tag{9}$$

a T=0, la distribución de Fermi-Dirac es una función escalón que vale 1 para $E \leq E_F$ y cero si $E > E_F$ y la densidad de estados n es constante (6).

En nuestro caso, haciendo las integrales en $\vec{k}$ y teniendo en cuenta que la energía de Fermi se encuentra en la segunda subbanda y por lo tanto hay dos valores de k_F (Figura 1) :

$$E_{total} = n_{2D}\left[\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \int_0^{K_{F1}}\int_0^{2\pi}\frac{\hbar^2 k^2}{2m}k\, d\theta\, dk + \int_0^{K_{F2}}\int_0^{2\pi}\frac{\hbar^2 k^2}{2m}k\, d\theta\, dk\right] \tag{10}$$

Donde:

$$E_F = \varepsilon_i + \frac{\hbar^2}{2m}k_{Fi}^2 \tag{11}$$

con $i = 1, 2$

luego:

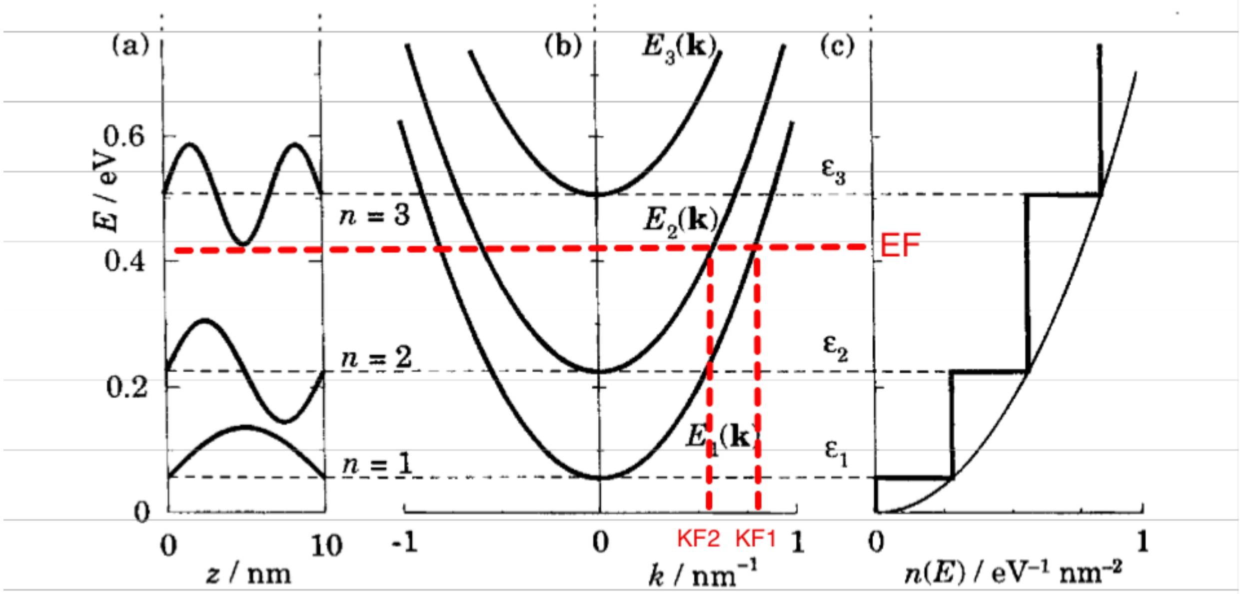

FIGURE 4.7. (a) Potential well with energy levels, (b) total energy including the transverse kinetic energy for each subband, and (c) steplike density of states of a quasi-two-dimensional system. The example is an infinitely deep square well in GaAs of width 10 nm. The thin curve in (c) is the parabolic density of states for unconfined three-dimensional electrons.

Figura 1. Se puede ver en la figura que a una energía de Fermi entre ε_1 y ε_2 le corresponden dos k_F, uno en cada subbanda.

$$k_{Fi} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_F - \varepsilon_i)} \tag{12}$$

Integrando (10) se obtiene:

$$E_{Total} = n_{2D}\left[\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \frac{\pi m}{\hbar^2}(E_F - \varepsilon_1)^2 + \frac{\pi m}{\hbar^2}(E_F - \varepsilon_2)^2\right] \tag{13}$$

Usando las expresiones para ε_1 y ε_2 de un pozo cuadrado infinito:

$$E_{Total} = n_{2D}\left[\frac{5\hbar^2\pi^2}{2ma^2} + \frac{\pi m}{\hbar^2}\left(E_F - \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\right)^2 + \frac{\pi m}{\hbar^2}\left(E_F - \frac{4\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\right)^2\right] \tag{14}$$

d) Especialice los resultados de a) y b) a los valores $L = 10nm$, $m^* = 0{,}067m_e$. Exprese la densidad n en unidades de cm^{-2}.

Para un ancho del pozo igual a $10nm$ se tiene la densidad:

$$n_{2D} = \frac{3\pi}{2(1 \times 10^{-6}cm)^2} = 4{,}71 \times 10^{12}cm^{-2} \tag{15}$$

La energía de Fermi para estos datos viene dada por:

$$E_F = \left(n_{2D} + \frac{5\pi}{2a^2}\right)\frac{\pi\hbar^2}{2m} \tag{16}$$

$$m^*c^2 = 0{,}067(5{,}11 \times 10^5 eV) \tag{17}$$

con $c = 3 \times 10^{10}cm/s$.

Entonces:

$$E_F = (1{,}26 \times 10^{13}cm^{-2})\left(\frac{\pi(6{,}58 \times 10^{-16}eVs)^2(3 \times 10^{10}cm/s)^2}{2(0{,}067)(5{,}11 \times 10^5 eV)}\right) \tag{18}$$

$$E_F = 0{,}23eV \tag{19}$$