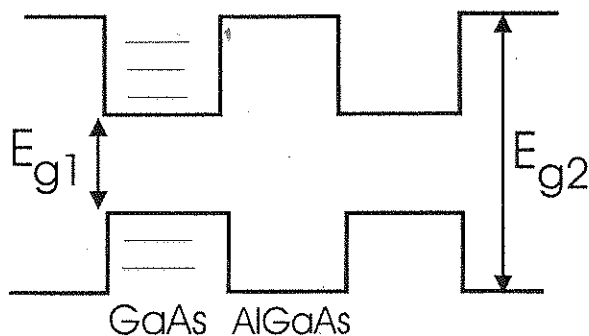


# 1 Πυκνότητα καταστάσεων

## 1.1 Εισαγωγή

Οι εφαρμογές της κβαντομηχανικής στην μικροηλεκτρονική και οπτοηλεκτρονική έχουν να κάνουν με μεγάλο αριθμό φορέων, οι οποίοι για ηλεκτρόνια (φερμιόνια) στην κατάσταση ισοροπίας ικανοποιούν την αρχή του *Pauli* για την κατανομή τους στις καταστάσεις του συστήματος. Με την εφαρμογή εξωτερικού πεδίου ή άλλης διαταραχής έχουμε φαινόμενα μεταφοράς ή αλληλεπίδρασης εκτός ισοροπίας. Η συμμετοχή στα φαινόμενα μεταφοράς δεν μπορεί να εξαρτάται από τις λεπτομέρειες της κυματοσυνάρτησης (π.χ. οριακές συνθήκες) για κάθε κατειλημμένη κατάσταση, αλλά από την ενεργειακή κατανομή των κατειλημμένων καταστάσεων, που είναι ανάλογη της πυκνότητας καταστάσεων (ανά μονάδα ενέργειας) και της πιθανότητας κατάληψης των καταστάσεων αυτών. Είναι προφανές ότι αυξάνοντας τον όγκο (ή διαστάσεις) ενός συστήματος ηλεκτρονίων, περιμένουμε αύξηση του αριθμού των καταστάσεων σε δεδομένο ενεργειακό εύρος  $dE$ . Αυτό οφείλεται στο γεγονός ότι λόγω ελάττωσης του περιορισμού οι αποστάσεις μεταξύ διαδοχικών ενεργειακών καταστάσεων είναι μικρότερες. Π.χ. για  $1d$  σε πεπερασμένο μήκος  $L$  οι ενεργειακές αποστάσεις είναι ανάλογες του  $1/L^2$ , ενώ οι αποστάσεις στον χώρο των  $k$  είναι  $2\pi/L$  για περιοδικές οριακές συνθήκες. Έτσι για να έχουμε μία πυκνότητα που δεν εξαρτάται από τις διαστάσεις του συστήματος, αφού προσθέσουμε τις καταστάσεις  $k$  που έχουν ενέργεια στο εύρος  $dE$ , διαιρούμε με τις αντίστοιχες διαστάσεις. Θα ορίσουμε δηλ. την πυκνότητα καταστάσεων ανά μονάδα ενέργειας ανά μονάδα μήκους για μονοδιάστατο σύστημα, η ανά μονάδα επιφάνειας για διδιάστατο σύστημα ή ανα μονάδα όγκου για τρισδιάστατο.



Σχ. 1 (α) Κβαντική ετεροδομή με δύο πηγάδια ( στρώμα  $GaAs$ ) και φράγματα (στρώματα  $AlGaAs$ ). Στο σχεδιάγραμμα δίνεται η ενέργεια  $E_c(z)$  για την ζώνη αγωγιμότητας και η ενέργεια  $E_v(z)$  για την ζώνη σθένους κάθετα στα στρώματα στην  $z$ -κατεύθυνση. (β) Σύρμα  $GaAs$  με δύο επαφές ( $\gamma$ ) Νανοτελείες ημιαγωγικές σε μονοτικό υλικό.

Ταυτόχρονα λόγω του περιορισμού της κίνησης των ηλεκτρονίων έχουμε την παρουσία κβάντωσης των ενεργειακών σταθμών, ιδιαίτερα αν κατεβούμε στην κλίμακα νανοδομών, με μέγεθος της τάξης μερικών  $nm$ . Εδώ έχουμε διακριτές ενεργειακές στάθμες που εξαρτώνται από το μέγεθος των νανοδομών. Οι παράλληλες σύνθετες νανοδομές έχουν ιδιότητες που είναι πολύ διαφορετικές από μακροσκοπικά τρισδιάστατα υλικά. Έλεγχος των διαστάσεων και των υλικών στις σύνθετες δομές, μας δίνει τη δυνατότητα να κατασκευάσουμε υλικά με προσαρμοσμένες ιδιότητες για συγκεκριμένες εφαρμογές. Οι ιδιαίτερες ιδιότητες σε μεγάλο βαθμό θα εξαρτώνται από την ενεργειακή κατανομή των καταστάσεων, δηλ. την πυκνότητα καταστάσεων<sup>1</sup>. Για να εκτιμήσουμε την σημασία της πυκνότητας καταστάσεων θα μελετήσουμε απλά μοντέλα σύνθετων υλικών.

<sup>1</sup> Δεν είναι η μόνη παράμετρος που επηρεάζει τις ιδιότητες. Πάσι ο λόγος του αριθμού των απόμων στην επιφάνεια προς αυτά στον όγκο είναι ακόμα χαρακτηριστική παράμετρος.

Επίσης οι νανοδομές είναι εμφυτευμένες σε μακροσκοπικά υλικά (*matria*) που επιρεάζουν τις ηλεκτρονικές καταστάσεις στις νανοδομές. Αυτό δεν θα το πάρουμε υπόψη καθόσον απαιτεί υπολογιστική αντιμετώπιση. Παρόλα αυτά οι απλές νανοδομές που θα μελετήσουμε θα μας δώσουν τις βασικές αρχές πίσω από τα κβαντικά φαινόμενα σε νανοδομές. Έτσι το πλάνο είναι να μελετήσουμε την πυκνότητα καταστάσεων σε ιδανικά ηλεκτρονικά αέρια σε τρεις (3d), δύο (2d) και μία (1d) διάσταση<sup>EM</sup>. Αυτά θα μας χρειαστούν για να μελετήσουμε τις αντίστοιχες πυκνότητες καταστάσεων σε ρεαλιστικές νανοδομές, όπου π.χ. το επίπεδο έχει πάντα πάχος (κβαντικό πηγάδι) και το σύρμα (κβαντικό σύρμα) επίσης.

Σε ένα σύστημα με συνεχές ενεργειακό φάσμα μία χρήσιμη ποσότητα είναι η πυκνότητα καταστάσεων ανά μονάδα ενέργειας. Για το σκοπό αυτό δύο στοιχεία είναι απαραίτητα να έχουμε ένα δείκτη για την απαρίθμηση των ενεργειακών καταστάσεων και μία σχέση που συνδέει την ενέργεια της κατάστασης με το δείκτη. Για την αρύθμηση μεγάλη βοήθεια ήρθε από την χρήση των περιοδικών οριακών συνθηκών, ενώ και η σχέση διασποράς είναι απλή. Όπως τονίσαμε, οι οριακές συνθήκες δεν αλλάζουν την πυκνότητα καταστάσεων.

### 1.1.1 Πυκνότητα καταστάσεων σε 3d

Ας θεωρήσουμε ότι τα ηλεκτρόνια είναι περιορισμένα σε ένα κουτί διαστάσεων  $L \times L \times L$  στις τρεις κατευθύνσεις (Σχ. 2α). Η λύση της εξίσωσης *Schrodinger* για ελεύθερα σωματίδια είναι επίπεδα κύματα

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{1}{\Omega}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}, \quad \vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$$

κανονικοποιημένη σε όγκο  $\Omega = L^3$ , με αντίστοιχη ενέργεια

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Εισάγοντας περιοδικές οριακές συνθήκες στις τρεις κατευθύνσεις,

$$\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z), \quad \psi(x, y + L, z) = \psi(x, y, z), \quad \psi(x, y, z + L) = \psi(x, y, z)$$

οι τρεις συνιστώσες του  $\vec{k} = (k_x, k_y, k_z)$  παίρνουν διακριτές τιμές,

$$\psi(x + L, y, z) = \psi(x, y, z) \implies e^{ik_x L} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \implies k_x = n_x \frac{2\pi}{L},$$

ώστε για τις τρεις κατευθύνσεις

$$k_x = n_x \frac{2\pi}{L}, \quad k_y = n_y \frac{2\pi}{L}, \quad k_z = n_z \frac{2\pi}{L},$$

όπου  $n_x, n_y, n_z = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  είναι ακέραιοι αριθμοί. Έτσι κάθε κατάσταση στον  $\vec{k}$ -χώρο καταλαμβάνει  $\vec{k}$ -όγκο  $(2\pi/L)^3$ , όπου  $\Omega = L^3$  είναι ο όγκος του κουτιού<sup>2</sup>. Επειδή οι επιφάνειες σταθερής ενέργειας (για το τρισδιάστατο ελεύθερο ηλεκτρονικό αέριο) στον  $k$ -χώρο είναι σφαιρικές, θα θεωρήσουμε τον  $\vec{k}$ -όγκο που περικλείεται από δύο σφαιρικές επιφάνειες σταθερής ενέργειας που απέχουν μεταξύ τους κατά  $dk$  στον  $\vec{k}$ -χώρο με αντίστοιχη διαφορά ενέργειας  $dE$ . Ο αριθμός των καταστάσεων μεταξύ των δύο σφαιρών είναι ο όγκος δια τον όγκο μιας κατάστασης, δηλ.

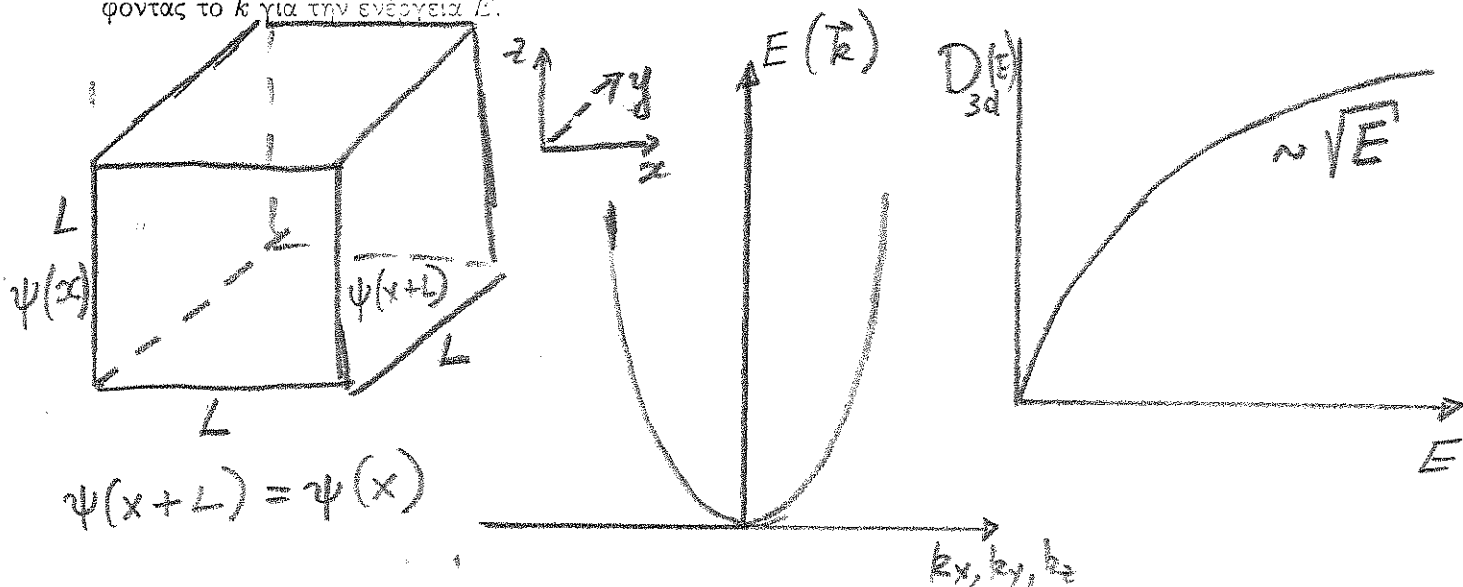
$$\text{αριθμός καταστάσεων στο διάστημα } dE, \quad dN = 2 \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi/L)^3} = \frac{\Omega}{\pi^3} k^2 dk,$$

<sup>2</sup>Η γενίκευση σε κουτί με διαστάσεις  $L_x \times L_y \times L_z$  είναι προφανής, χρησιμοποιώντας για όγκο  $\Omega = L_x L_y L_z$ . Στις σχέσεις για τα κυματοδιανύσματα εισέρχονται τα αντίστοιχα μήκη, ενώ ο όγκος κάθε κατάστασης είναι  $\Omega_{\vec{k}} = (2\pi)^3 / \Omega = (2\pi)^3 / (L_x L_y L_z)$ .

όπου ο παράγοντας 2 στην αρχή οφείλεται <sup>παλι</sup> στο γεγονός ότι σε κάθε κατάσταση έχουμε εκφυλισμό  $g = 2$  λόγω του σπίν. Διακρίνοντας με το εύρος ενέργειας  $dE$  και τον όγκο του κουτιού  $\Omega$  έχουμε την πυκνότητα καταστάσεων ανά μονάδα ενέργειας και ανά μονάδα όγκου,  $D_3d$ .

$$D_{3d}(E) = \frac{dN}{\Omega dE} = \frac{\cancel{2} \int k^2 dk}{\pi^3 \cancel{2} dE} = \frac{1}{\pi^3} k^2 \frac{1}{|dE/dk|} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{3/2} E^{1/2},$$

όπου χρησιμοποιήσαμε τη σχέση διασποράς ( $E \sim k^2$ ) και την παράγωγο ( $dE/dk \sim k \sim E^{1/2}$ ), απαλο-  
φοντας το  $k$  για την ενέργεια  $E$ .



Σχ. 2 (α) 3d κουτί με περιοδικές οριακές συνθήκες. (β) Σχέση διασποράς  $E(\vec{k})$  (γ) πυκνότητα καταστάσεων  $D_{3d}(E)$ .

### 1.1.2 Πυκνότητα καταστάσεων σε 2δ

Ας θεωρήσουμε ότι τα ηλεκτρόνια είναι περιορισμένα σε ένα επίπεδο διαστάσεων  $L \times L$  στις δύο κατευθύνσεις (Σχ. 3β), ενώ στην  $z$ -κατεύθυνση έχει σχεδόν μηδενικό πάχος. Η λύση της εξίσωσης *Schrodinger* για ελεύθερα σωματίδια είναι επίπεδα κύματα σε δύο διαστάσεις

$$\psi_{\vec{k}_{\parallel}}(\vec{r}_{\parallel}) = \sqrt{\frac{1}{S}} e^{i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel}}, \quad \vec{k}_{\parallel} = (k_x, k_y),$$

κανονικοποιημένη σε επιφάνεια  $S = L^2$ , με αντίστοιχη ενέργεια

$$E_{\vec{k}_{\parallel}} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} \equiv \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m}.$$

Εισάγοντας περιοδικές οριακές συνθήκες στις δύο κατευθύνσεις,

$$\psi(x+L, y, z) = \psi(x, y, z), \quad \psi(x, y+L, z) = \psi(x, y, z),$$

οι δύο συνιστώσες του  $\vec{k} = (k_x, k_y)$  παίρνουν διακριτές τιμές,

$$\psi(x+L, y) = \psi(x, y) \implies e^{ik_x L} e^{i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel}} = e^{i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel}} \implies k_x = n_x \frac{2\pi}{L},$$

ώστε για τις δύο κατευθύνσεις

$$k_x = n_x \frac{2\pi}{L}, \quad k_y = n_y \frac{2\pi}{L},$$

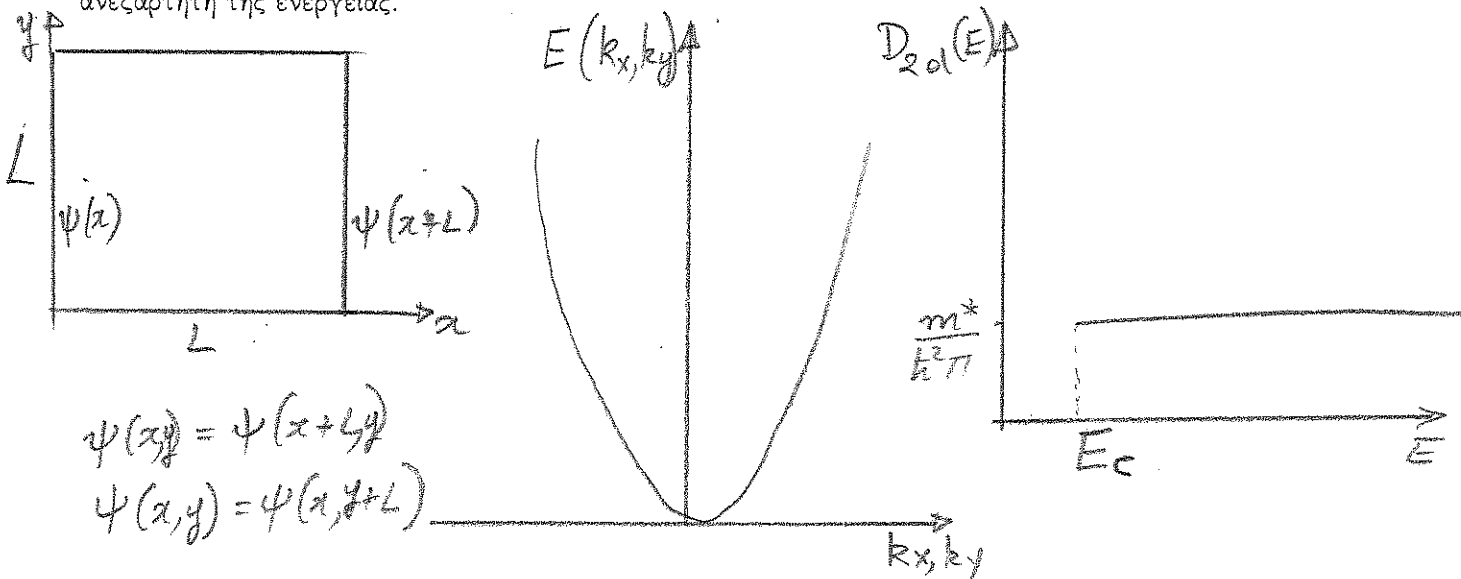
όπου  $n_x, n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  είναι ακέραιοι αριθμοί. Κάθε κατάσταση στον  $\vec{k}_{\parallel}$ -χώρο καταλαμβάνει  $\vec{k}_{\parallel}$ -επιφάνεια  $\delta S_k = (2\pi/L)^2$ , όπου  $S = L^2$  είναι η επιφάνεια του επιπέδου. Επειδή οι καμπύλες σταθερής ενέργειας στον διδιάστατο  $\vec{k}_{\parallel}$ -χώρο είναι κυκλικές, ο αριθμός των καταστάσεων που περιλαμβάνονται μεταξύ δύο κυκλικών καμπύλων σταθερής ενέργειας που απέχουν από το κέντρο του διδιάστατου  $\vec{k}_{\parallel}$ -χώρου με αντίστοιχη διαφορά ενέργειας  $dE$ . Ο αριθμός των καταστάσεων μεταξύ δύο κυκλικών είναι η επιφάνεια  $2\pi k_{\parallel} dk_{\parallel}$  δια την επιφάνεια μιας κατάστασης, δηλ.

$$\text{αριθμός καταστάσεων στο διάστημα } dE, \quad dN = 2 \frac{2\pi k_{\parallel} dk_{\parallel}}{(2\pi/L)^2} = \frac{S}{\pi} k_{\parallel} dk_{\parallel},$$

όπου πάλι ο παράγοντας 2 στην αρχή οφείλεται στο γεγονός ότι σε κάθε κατάσταση έχουμε εκφυλισμό  $g = 2$  λόγω του σπίν. Διαιρώντας με το εύρος ενέργειας  $dE$  και την επιφάνεια του επιπέδου  $S$  έχουμε την πυκνότητα καταστάσεων ανά μονάδα ενέργειας και ανά μονάδα επιφάνειας,

$$D_{2d}(E) = \frac{dN}{S dE} = \frac{S}{\pi} k_{\parallel} dk_{\parallel} \frac{1}{S dE} = \frac{1}{\pi} k_{\parallel} \frac{dk_{\parallel}}{dE} = \frac{1}{\pi} \dots$$

όπου χρησιμοποιήσαμε από τη σχέση διασποράς  $dE \sim \hbar v_{\parallel} dk_{\parallel}$ . Καθ' η διαδικασία καταστάσεων είναι ανεξάρτητη της ενέργειας.



Σχ. 3 (α) 2d λεπτό στρώμα στο  $(x - y)$  επίπεδο με περιοδικές οριακές συνθήκες. (β) Παραβολική σχέση διασποράς  $E_{\vec{k}_{\parallel}}(\vec{k}_x)$  και παραβολοειδές στο  $k_x - k_y$  επίπεδο. (γ) πυκνότητα καταστάσεων  $D_{2d}(E)$ .

### 1.1.3 Πυκνότητα καταστάσεων σε 1d

Ας θεωρήσουμε ότι τα ηλεκτρόνια είναι περιορισμένα σε ένα πολύ λεπτό στρώμα μήκους  $L$  (Σχ. 4α). Η λύση της εξίσωσης *Schrodinger* για ελεύθερα σωματίδια είναι επίπεδα κύματα σε μία διάσταση

$$\psi_k(x) = \sqrt{\frac{1}{L}} e^{ikx},$$

κανονικοποιημένη σε μήκος  $L$  με αντίστοιχη ενέργεια

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Εισάγοντας περιοδικές οριακές συνθήκες στην  $x$ -κατεύθυνση,

$$\psi(x + L) = \psi(x) \implies e^{ikL} e^{ikx} = e^{ikx} \implies k = n \frac{\pi}{L},$$

έκαστη διακριτές τιμές για  $k$ .

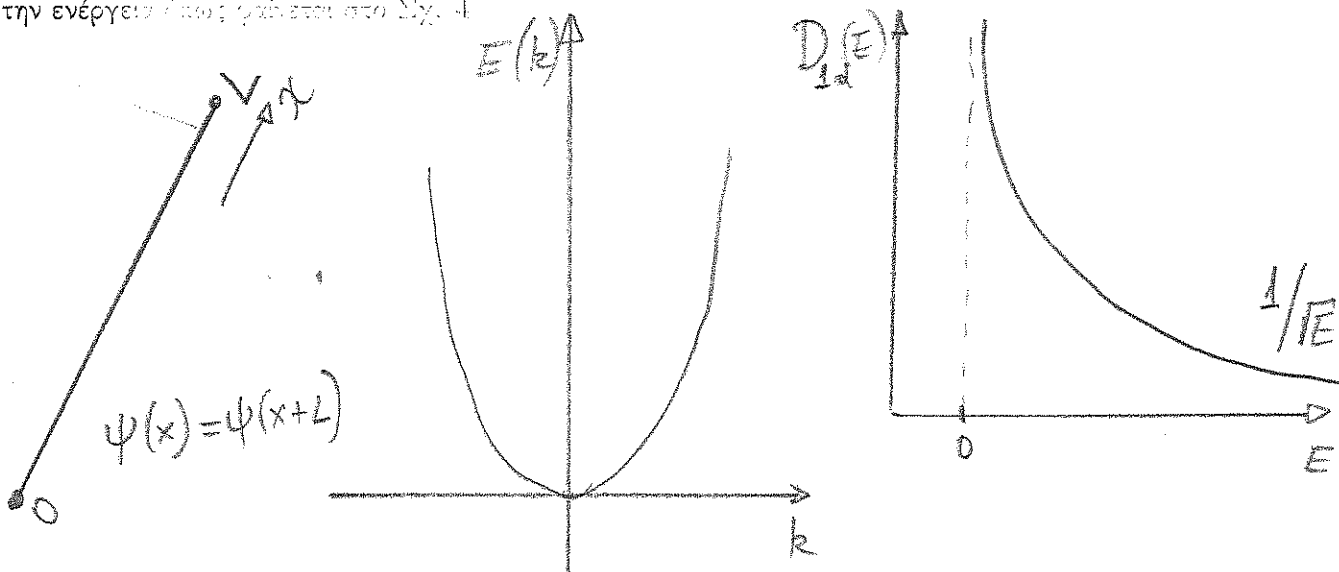
όπου  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  είναι ακέραιος αριθμός. Έτσι κάθε κατάσταση στον μονοδιάστατο  $k$ -χώρο καταλαμβάνει  $k$ -μήκος  $\delta L_k = (2\pi/L)$ . Σε μία διάσταση υπάρχει ένα προς ένα αντιστοιχία μεταξύ  $k$  και  $E$ , εκτός από τον εκφυλισμό για  $\pm k$ . Έτσι για ~~για~~ ένα  $k$ -μήκος κατά  $dk$  έχουμε αντίστοιχη διαφορά ενέργειας  $dE$ . Ο αριθμός των καταστάσεων στο μήκος  $dk$  είναι το μήκος  $2dk$  (εκφυλισμός  $\pm k$ ) δια το  $k$ -μήκος μιας κατάστασης, δηλ.

$$\text{αριθμός καταστάσεων στο διάστημα } dE, \quad dN = 2 \frac{2dk}{(2\pi/L)} = \frac{2L}{\pi} dk,$$

όπου πάλι ο παράγοντας 2 στην αρχή οφείλεται στο γεγονός ότι σε κάθε κατάσταση έχουμε εκφυλισμό  $g = 2$  λόγω του σπίν. Διακρίνοντας με το εύρος ενέργειας  $dE$  και το μήκος  $L$  έχουμε την πυκνότητα καταστάσεων ανά μονάδα ενέργειας και ανά μονάδα μήκους,

$$D_{1d}(E) = \frac{dN}{L dE} = \frac{2L}{\pi} dk \frac{1}{L dE} = \frac{2}{\pi} \frac{1}{|dE/dk|} = \frac{1}{\pi \hbar^2} \sqrt{2mE},$$

όπου χρησιμοποιούμε την σχέση  $dE \sim \hbar^2 k dk$ . Εδώ η πυκνότητα καταστάσεων είναι φθίνουσα με την ενέργεια όπως φαίνεται στο Σχ. 4.



Σχ. 4 (α) Μονοδιάστατο σύστημα με περιοδικές οριακές συνθήκες. (β) Σχέση διασποράς  $E(k)$  (γ) πυκνότητα καταστάσεων  $D_{1d}(E)$ .

Να τονίσουμε ότι η χρήση περιόδων οριακών συνθηκών (στο μήκος  $L$ ) είναι μόνον ένα μαθηματικό κατασκεύασμα, αλλά είναι πολύ χρήσιμο φυσικά συμπέρασμα. Και τούτο διότι αναφερόμαστε σε ένα σύστημα με μεγάλα αριθμητικά κβαντά και αντίστοιχων κατειλημμένων καταστάσεων. Αυτό δεν σημαίνει ότι οι κυματοσυναρτήσεις και οι ενέργειες είναι ανεξάρτητες των οριακών συνθηκών. Το αντίθετο μάλιστα είναι που είναι η ευαισθησία είναι ότι η ευαισθησία στις οριακές καταστάσεις εντοπίζεται κυρίως στην συμπεριφορά της κατανομής κοντά στα άκρα του συστήματος, που δεν αλλάζει την κατανομή στο χώρο μηδενικά. Φυσικά εάν ενδιαφερόμαστε για φαινόμενα που εντοπίζονται στην επιφάνεια πρέπει να επιλέξουμε με προσοχή τις κατάλληλες φυσικές οριακές συνθήκες. Όταν ενδιαφερόμαστε σε ιδιότητες που αφορούν το εσωτερικό, τότε οι ιδιότητες δεν αλλάζουν, κυρίως διότι δεν αλλάζει η πυκνότητα καταστάσεων. Έτσι να προσφέρουμε πάλι το μονοδιάστατο πρόβλημα, αλλά αυτή τη φορά επιβάλλοντας μηδενική της κυματοσυναρτήσεως στα δύο άκρα, δηλ. στα άκρα έχουμε άπειρα φράγματα.

Η λύση της εξίσωσης Schrödinger για ελεύθερα σωματίδια σε φραγμένο σύρμα με μηδενικές οριακές συνθήκες στα άκρα είναι:

$$\psi_q(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(qx), \quad \psi_q(x=0) = \psi_q(x=L) = 0$$

κανονικοποιημένη σε μήκος  $L$  με αντίστοιχη ενέργεια

$$E_q = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$$

Οι μηδενικές οριακές συνθήκες στα  $x = 0, L$ ,

$$\psi(x+L) = \psi(x) \Rightarrow \sin(k(x+L)) = \sin(kx)$$

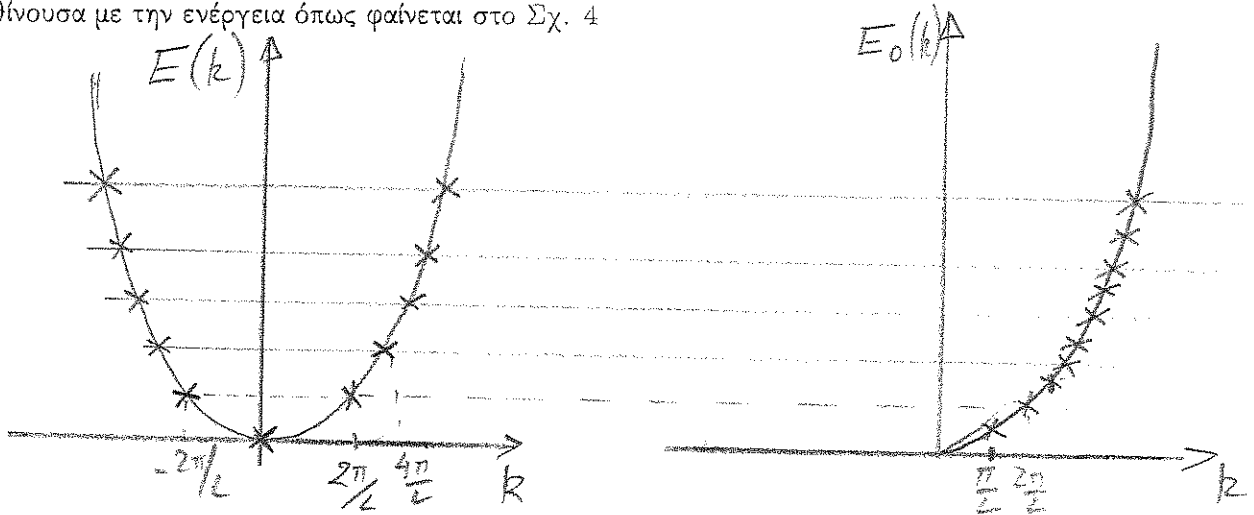
όπου  $n_0 = 1, 2, \dots$  είναι θετικός ακέραιος αριθμός. Τα  $q = 0$  τα αλείφει και οι αρνητικοί δείκτες δεν δίνουν διαφορετικές λύσεις. Έτσι κάθε κατάσταση στον μονοδιάστατο φρένο καταλαμβάνει  $q$ -μήκος  $\delta L_q = (\pi/L)$ , δηλ. το 1/2 από αυτό για περιοδικές οριακές συνθήκες. Αυτό καταδεικνύει το γεγονός ότι δεν έχουμε καταστάσεις για  $q < 0$ , και δεν έχουμε τον  $q = 0$  γιατί για ένα  $q$ -μήκος κατά  $dq$  έχουμε αντίστοιχη διαφορά ενέργειας  $dE$ . Ο αριθμός των καταστάσεων στο μήκος  $dq$  είναι το μήκος  $dq$  δια το  $q$ -μήκος μιας κατάστασης, δηλ.

$$\text{αριθμός καταστάσεων στο διάστημα } dq \Rightarrow dN = L \frac{dq}{(\pi/L)} = \frac{2L}{\pi} dk,$$

δηλ. ακριβώς το ίδιο όπως και με περιοδικές οριακές συνθήκες, αλλά λαμβάνοντας 2 στην αρχή οφείλεται πάλι στον εκφυλισμό  $g = 2$  λόγω του σπίν. Λαμβάνοντας με το εύρος ενέργειας  $dE$  και το μήκος  $L$  έχουμε πάλι την ίδια πυκνότητα καταστάσεων ανά μονάδα ενέργειας και ανά μονάδα μήκους,

$$D_{1d}(E) = \frac{dN}{LdE} = \frac{2L}{\pi} dq \frac{1}{LdE} = \frac{2}{\pi} \frac{1}{\hbar^2 v} = \frac{2}{\pi \hbar^2 v} \frac{dE}{dE}$$

όπου χρησιμοποιήσαμε από τη σχέση διασποράς  $dE \sim \hbar v dk$ . Και πάλι η πυκνότητα καταστάσεων είναι φθίνουσα με την ενέργεια όπως φαίνεται στο Σχ. 4



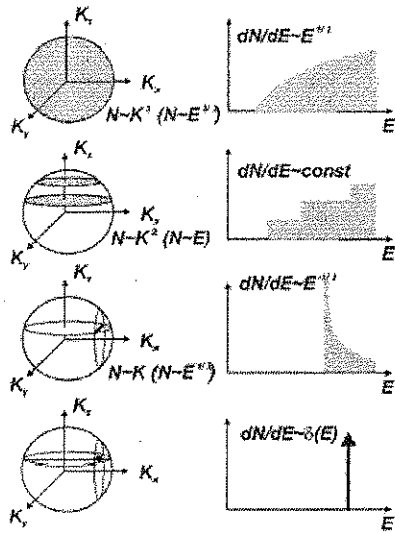
Σχ. 5 Μονοδιάστατο σύρμα μήκους  $L$  με μηδενικές οριακές συνθήκες. Πύκνωση, ενεργειακών σταθμών με περιοδικές και μηδενικές οριακές συνθήκες.

Συνοψίζοντας, η πυκνότητα καταστάσεων σε μία, δύο και τρεις διαστάσεις είναι

$$D(E) = g \frac{2m}{2\pi\hbar^2} \begin{cases} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mE}} & \sim E^{-1/2} & 1D \\ 1 & \sim \text{const.} & 2D \\ \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} & \sim E^{1/2} & 3D \end{cases} \quad (1)$$

όπως φαίνεται και στο Σχ. 6.

Σχ. 6 Σύγκριση της πυκνότητας καταστάσεων για (α) τρεις (3d), (β) δύο (2d), (γ) μία (1d) διαστάσεις..



Για τον υπολογισμό της πυκνότητας καταστάσεων σε 3d, 2d και 1d χρησιμοποιούμε  $k$ -όγκο,  $k$ -επιφάνεια και  $k$ -μήκος αντίστοιχα.

### 1.1.4 Πυκνότητα καταστάσεων: Γενικευμένη σχέση

Στους παραπάνω υπολογισμούς δουλέψαμε με στοιχειώδεις όγκους, επιφάνειες και μήκη. Αυτό ήταν εφικτό επειδή οι επιφάνειες σταθερής ενέργειας ήταν πολύ απλά σχήματα. Εδώ θα εισάγουμε ένα γενικευμένο υπολογισμό που ισχύει για πιά πολύπλοκες επιφάνειες, που μπορούμε να προχωρήσουμε με εν μέρει αναλυτικές πράξεις και εν μέρει αριθμητικούς υπολογισμούς. Εδώ θα περιοριστούμε σε παραδείγματα για τα οποία έχουμε αναλυτική σχέση.

Η πυκνότητα καταστάσεων ανά μονάδα όγκου και ενέργειας ( $D(E)$ ) μας δίνει τη δυνατότητα να υπολογίσουμε τον αριθμό καταστάσεων ανά μονάδα όγκου ( $\Delta N$ ) σε ένα εύρος ενέργειας  $[E_1, E_1 + \Delta E]$

$$\Delta N = \int_{E_1}^{E_1 + \Delta E} D(E) dE$$

όπου για μικρό  $\Delta E \rightarrow dE$  μπορούμε να αντιστρέψουμε τη σχέση και να υπολογίσουμε το  $D(E)$  εάν μπορούμε να υπολογίσουμε τον αριθμό καταστάσεων ανά μονάδα όγκου  $dN = D(E)dE$  με ενέργεια μεταξύ  $[E_1, E_1 + dE]$ ,

$$D(E) = \frac{dN}{dE}$$

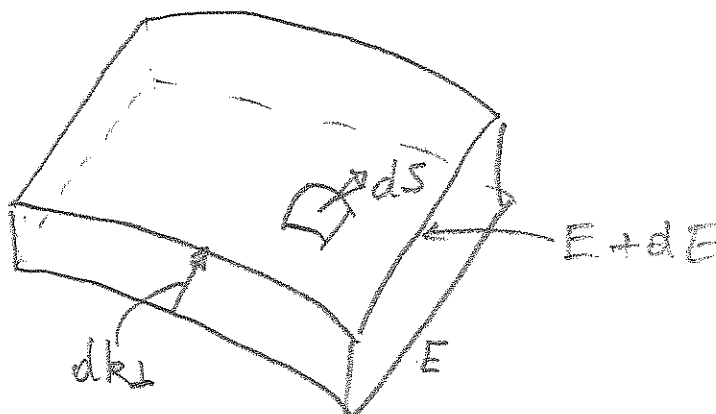
Ο υπολογισμός του  $dN$  ήταν εύκολος για σφαιρικές επιφάνειες σταθερής ενέργειας. Για μη σφαιρική επιφάνεια πάλι θα υπολογίσουμε τον  $k$ -όγκο μεταξύ των επιφανειών  $E$  και  $E + dE$ , και θα διαιρέσουμε με τον όγκο μιάς κατάστασης  $\delta V_k = \frac{1}{(2\pi)^3 \Omega}$ , και στη συνέχεια με τον όγκο του υλικού  $\Omega$ .

$$dN = \frac{1}{\Omega} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_{\Delta V_k} d^3 k \cdot 1$$

Για την ολοκλήρωση επιλέγουμε στοιχεία όγκου με παράλληλες στοιχειώδεις επιφάνειες με μέτρο  $dS_k$  σε απόσταση  $dk_{\perp}$  μεταξύ τους, όπου το  $dk_{\perp}$  είναι κάθετο στις επιφάνειες σταθερής ενέργειας σε κάθε σημείο της επιφάνειας, και επομένως έχουμε  $dE = |\vec{\nabla}_k E_k| dk_{\perp}$  καθόσον επιλέξαμε το  $dk_{\perp}$  παράλληλα στο  $\vec{\nabla}_k E_k$ , που είναι κάθετο στις επιφάνειες σταθερής ενέργειας. Έτσι ο όγκος  $V_k$  χωρίζεται σε στοιχεία

$$d^3 k \rightarrow dS_k dk_{\perp} \rightarrow \frac{dS_k}{|\vec{\nabla}_k E_k|} dE$$

όπως φαίνεται στο Σχ. 7



Σχ. 7  $\vec{k}$ -όγκος ολοκλήρωσης για τον υπολογισμό της πυκνότητας καταστάσεων.

$$dN = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{V_k} dS_k dk_{\perp} = \frac{dE}{(2\pi)^3} \int_{S_k} \frac{dS_k}{|\vec{\nabla}_k E_k|}$$



όπου στην ολοκλήρωση το στοιχείο  $dS_k$  (με μονάδες  $\sim 1/\mu\text{ήκος}^2$ ) έχει κάθετο το  $\vec{\nabla}_k E_k$ , και εν γένει για πολύπλοκη επιφάνεια το επιφανειακό ολοκλήρωμα πρέπει να γίνει αριθμητικά. Επίσης θεωρήσαμε το  $dE$  αρκετά μικρό ώστε οι υπόλοιποι παράγοντες στο ολοκλήρωμα δεν μεταβάλλονται με την ενέργεια. Έτσι έχουμε

$$D(E) = \frac{2}{(2\pi)^3} \int_{S_k} \frac{dS_k}{|\vec{\nabla}_k E_k|}$$

όπου ο παράγοντας 2 οφείλεται στο σπιν. Γνώση της σχέσης διασποράς μας δίνει (τουλάχιστον αριθμητικά) την  $D(E)$ . Έτσι σαν επιβεβαίωση ας δούμε πάλι την ιστροπική παραβολική σχέση διασποράς για το ελεύθερο ηλεκτρόνιο  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ . Τότε

$$\vec{\nabla}_k E_k = \frac{\hbar^2}{m} (k_x \hat{i} + k_y \hat{j} + k_z \hat{k}) \rightarrow |\vec{\nabla}_k E_k| = \frac{\hbar^2 k}{m},$$

ενώ το στοιχείο σφαιρικής επιφάνειας είναι  $dS_k = k^2 d\Omega_k$ , όπου  $d\Omega_k$  είναι το στοιχείο στερεάς γωνίας. Και αναπαράγουμε την πυκνότητα καταστάσεων

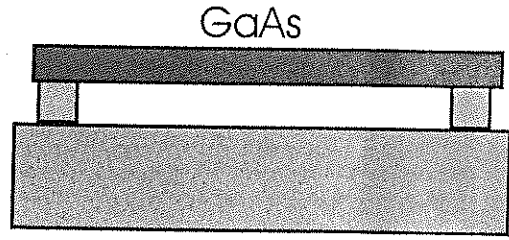
$$D(E) = \frac{1}{4\pi^3} \frac{m}{\hbar^2} k \int d\Omega_k = \frac{1}{2\pi^2} \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E},$$

όπου χρησιμοποιήσαμε ότι το ολοκλήρωμα της στερεάς γωνίας είναι  $\int d\Omega_k = 4\pi$  και αντικαταστήσαμε το  $k$  με την ενέργεια  $E$ , από τη σχέση διασποράς.

## 1.2 Πυκνότητα καταστάσεων: Κβαντικά πηγάδια, σύρματα και τελείες.

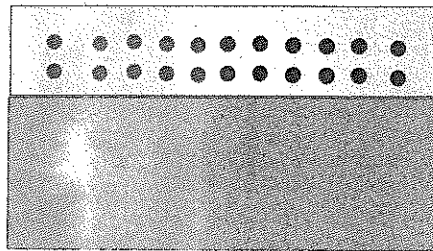
Οι προηγούμενες ιδανικές δομές μειομένων διαστάσεων έχουν αντίκρουσμα σε πραγματικές δομές όπου τα ηλεκτρόνια είναι εντοπισμένα να κινούνται αντί σε επίπεδο σε ένα λεπτό στρώμα και αντί για λεπτό σύρμα σε ένα σύρμα πεπερασμένου πάχους. Αυτό κάνει τις δομές τρισδιάστατες αλλά τα ηλεκτρόνια είναι εντοπισμένα στη μία (κβαντικό πηγάδι) η δύο διαστάσεις αντίστοιχα (κβαντικό σύρμα). Το πρώτο επιτυγχάνεται χρησιμοποιώντας ημιαγωγικές διατάξεις όπου έχουμε στρώματα ημιαγωγών με διαφορετικό χάσμα. Π.χ. η αντικατάσταση μερικώς  $Ga$  για  $Al$  στο  $GaAs$  αυξάνει το χάσμα, που χωρίζει τη ζώνη σθένους που είναι πλήρης από τη ζώνη αγωγιμότητας. Το χάσμα στο  $Al_x Ga_{1-x} As$  μεταβάλλεται με το ποσοστό  $x$  του  $Al$ . Όταν διαφορετικά υλικά έρθουν σε επαφή τότε έχουν κοινή ενέργεια *Fermi* στην κατάσταση ισοροπίας. Που για ενδογενείς (χωρίς προσμίξεις) ημιαγωγούς σε χαμηλές θερμοκρασίες είναι στο μέσο του χάσματος. Έτσι στα τρία στρώματα του σχήματος  $Al_x Ga_{1-x} As / GaAs / Al_x Ga_{1-x} As$  σχεδιάζεται το κάτω μέρος της ζώνης αγωγιμότητας  $E_c(z)$  κάθετα στην ετεροδομή, που είναι η ελάχιστη ενέργεια που αισθάνεται το ηλεκτρόνιο. Στην  $z$ -κατεύθυνση αισθάνεται το δυναμικό ενός πηγαδιού  $V(z)$ , που είναι ανεξάρτητο του  $x$  και  $y$ , δηλ στις κατευθύνσεις  $x$  και  $y$  συμπεριφέρεται σαν ελεύθερο σωματίδιο. Για το κβαντικό σύρμα η αντίστοιχη κατασκευή στο  $\Sigma_{\chi}$  ;; έχουμε ένα σύρμα  $GaAs$  ορθογώνιας διατομής που περιβάλλεται κατά μήκος από ένα εξωτερικό στρώμα  $Al_x Ga_{1-x} As$  και το ηλεκτρόνιο είναι περιορισμένο στο εσωτερικό σύρμα και είναι ελεύθερο στην  $z$ -κατεύθυνση καθόσον το δυναμικό είναι ανεξάρτητο του  $z$ . Να προσθέσουμε ότι όλες οι παραπάνω δομές είναι πραγματοποιήσιμες με πραγματικά υλικά και χρησιμοποιούνται σε σημαντικές εφαρμογές. Π.χ. τα κβαντικά πηγάδια χρησιμοποιούνται σε ημιαγωγικούς λέιζερ όπου η δομή επιλέγεται ώστε να έχουμε επιθυμητό μήκος κύματος εκπεμπόμενης ακτινοβολίας. Τα κβαντικά σύρματα έχουν επίσης εφαρμογές σε ανιχνευτές μορίων καθόσον η εναπόθεση μοριακών δεκτών (ευαίσθητων σε συγκεκριμένα μόρια) μπορεί να επηρεάσει σημαντικά την αγωγιμότητα του κβαντικού σύρματος και όταν ακόμη μικρός αριθμός μορίων δεσμευτεί από τους δέκτες. Οι κβαντικές τελείες από ημιαγωγία υλικά έχουν σημαντικές προοπτικές όταν ενσωματωθούν σε μονωτικό υλικό.

Η αντίστοιχη κατασκευή για μία κβαντική τελεία, όπου ένας μικρός κύβος ή σφαίρα περικλείεται από υλικό με μεγαλύτερο χάσμα. Έτσι το ηλεκτρόνιο είναι εντοπισμένο και στις τρεις κατευθύνσεις. Η επιλογή του υλικού είναι τυχαία αρκεί να έχουμε ημιαγωγικά υλικά με διαφορετικό χάσμα όπου το υλικό με μικρότερο χάσμα λειτουργεί ως το εσωτερικό του πηγαδιού και το υλικό με το μεγαλύτερο χάσμα ως φράγμα όπου το ηλεκτρόνιο έχει μικρή διεύθυνση.



Σχ.8 Κβαντικό πηγάδι

Σχ.9 Κβαντικό σύρμα



Σχ. 10 Κβαντική τελεία

### 1.2.1 Κβαντικό πηγάδι

Η χαμιλτονιανή ενός κβαντικού πηγαδιού περιγράφεται από την εξίσωση *Schrodinger* με<sup>3</sup>

$$H_{QW} = H_{r_{\parallel}} + H_z \equiv -\frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} \nabla_{xy}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z), \quad \vec{r}_{\parallel} = (x, y)$$

δηλ. είναι χωριζομένων μεταβλητών στις τρεις κατευθύνσεις, όντας ελεύθερο στο  $(x - y)$  επίπεδο και περιορισμένο στο δυναμικό  $V(z)$  στην  $z$ -κατεύθυνση, και επομένως μπορούμε να λύσουμε ανεξάρτητα σε κάθε κατεύθυνση. Στην περίπτωση αυτή η κυματοσυνάρτηση είναι το γινόμενο των τριών συναρτήσεων και οι ιδιοενέργειες το άθροισμα των τριών ενεργειών με αντίστοιχους κβαντικούς αριθμούς.

Ας θεωρήσουμε ότι τα ηλεκτρόνια είναι περιορισμένα σε ένα επίπεδο διαστάσεων  $L_x \times L_y$  στις δύο κατευθύνσεις (Σχ. 5β), ενώ στην  $z$ -κατεύθυνση έχει πάχος  $L_z \ll L_x, L_y$ . Η λύση της εξίσωσης *Schrodinger* για ελεύθερα σωματίδια στο επίπεδο με περιοδικές οριακές συνθήκες είναι

$$\psi_{\vec{k}_{\parallel}}(\vec{r}_{\parallel}) = \sqrt{\frac{1}{S}} e^{i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel}} \equiv \sqrt{\frac{1}{S}} e^{ik_x x} e^{ik_y y}, \quad \vec{k}_{\parallel} = (k_x, k_y), \quad \vec{r}_{\parallel} = (x, y)$$

κανονικοποιημένη σε επιφάνεια  $S = L_x L_y$ , με αντίστοιχη ενέργεια

$$E_{\vec{k}_{\parallel}} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} \equiv \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m}.$$

Εισάγοντας περιοδικές οριακές συνθήκες στις δύο κατευθύνσεις,

$$\psi(x + L_x, y, z) = \psi(x, y, z), \quad \psi(x, y + L_y, z) = \psi(x, y, z),$$

<sup>3</sup>Για γενίκευση θεωρήσαμε ότι η ενεργός μάζα είναι διαφορετική στο  $x - y$  επίπεδο ( $m_{\parallel}$ ) και κάθετα ( $m_z$ ). Αυτή είναι συνήθης περίπτωση σε ημιαγωγούς όταν είμαστε στο κάτω μέρος της ζώνης αγωγιμότητας.

οι δύο συνιστώσες του  $\vec{k} = (k_x, k_y)$  παίρνουν διακριτές τιμές,

$$\psi(x + L_x, y) = \psi(x, y) \implies e^{ik_x L_x} e^{i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel}} = e^{i\vec{k}_{\parallel} \cdot \vec{r}_{\parallel}} \implies k_x = n_x \frac{2\pi}{L_x},$$

ώστε για τις δύο κατευθύνσεις

$$k_x = n_x \frac{2\pi}{L_x}, \quad k_y = n_y \frac{2\pi}{L_y},$$

όπου  $n_x, n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  είναι ακέραιοι αριθμοί. Έτσι κάθε κατάσταση στον  $\vec{k}_{\parallel}$ -χώρο καταλαμβάνει  $\vec{k}_{\parallel}$ -επιφάνεια  $\delta S_k = (2\pi)^2/S$ , όπου  $S = L_x L_y$  είναι η επιφάνεια του επιπέδου.

Στην  $z$  κατεύθυνση έχουμε να λύσουμε το πρόβλημα

$$H_z \phi_n(z) \equiv \left( -\frac{\hbar^2}{2m_z} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + V(z) \right) \phi_n(z) = \epsilon_n \phi_n(z)$$

όπου έχουμε διακριτές καταστάσεις με ενέργεια  $\epsilon_n$ ,  $n = 1, 2, \dots$ . Συνοψίζοντας οι ιδιοκαταστάσεις είναι

$$\Psi_{n, k_x, k_y}(x, y, z) = \psi_{\vec{k}_{\parallel}}(\vec{r}_{\parallel}) \phi_n(z) \equiv \sqrt{\frac{1}{S}} e^{ik_x x} e^{ik_y y} \phi_n(z)$$

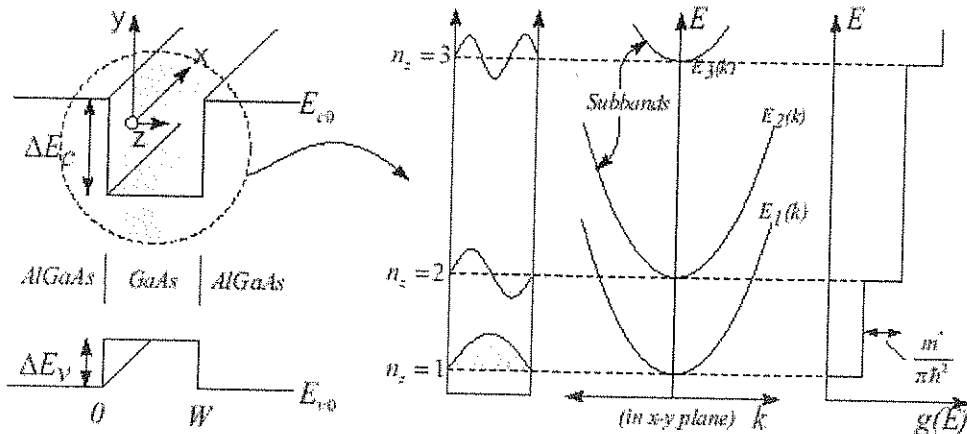
με ιδιοενέργειες

$$E(n, k_x, k_y) = \epsilon_n + \frac{\hbar^2}{2m_{\parallel}} (k_x^2 + k_y^2)$$

όπου  $n$  παίρνει διακριτές τιμές και  $k_x, k_y$  σχεδόν συνεχείς τιμές σχηματίζοντας υποζώνες όπως φαίνεται στο Σχ. 7 όπου σχεδιάσαμε τις δύο πρώτες υποζώνες  $n = 1, 2$  συναρτήσει του  $k_x$ . Εάν στο τρίτο άξονα βάλουμε το  $k_y$  τότε η παραβολή στο διάγραμμα γίνεται παραβολοειδής. Έτσι η ελάχιστη ενέργεια είναι η  $\epsilon_1$  και μέχρι την  $n = 2$  δέσμια κατάσταση έχουμε ένα διδιάστατο αέριο, του οποίου την πυκνότητα καταστάσεων ξέρουμε να υπολογίζουμε. και είδαμε ότι είναι σταθερή ανεξάρτητη της ενέργειας. Κάθε φορά όμως που περνάμε από την επόμενη δέσμια κατάσταση  $n$  έχουμε ένα νέο σύνολο καταστάσεων στο  $k_x - k_y$  επίπεδο και πρέπει να τις προσθέσουμε στην πυκνότητα καταστάσεων της προηγούμενης υποζώνης. Έτσι η πυκνότητα καταστάσεων για το κβαντικό πηγάδι φαίνεται στο Σχ.8 και μπορεί να γραφεί ως

$$D_{QW}(E) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{m}{\hbar^2 \pi} \Theta(E - \epsilon_n)$$

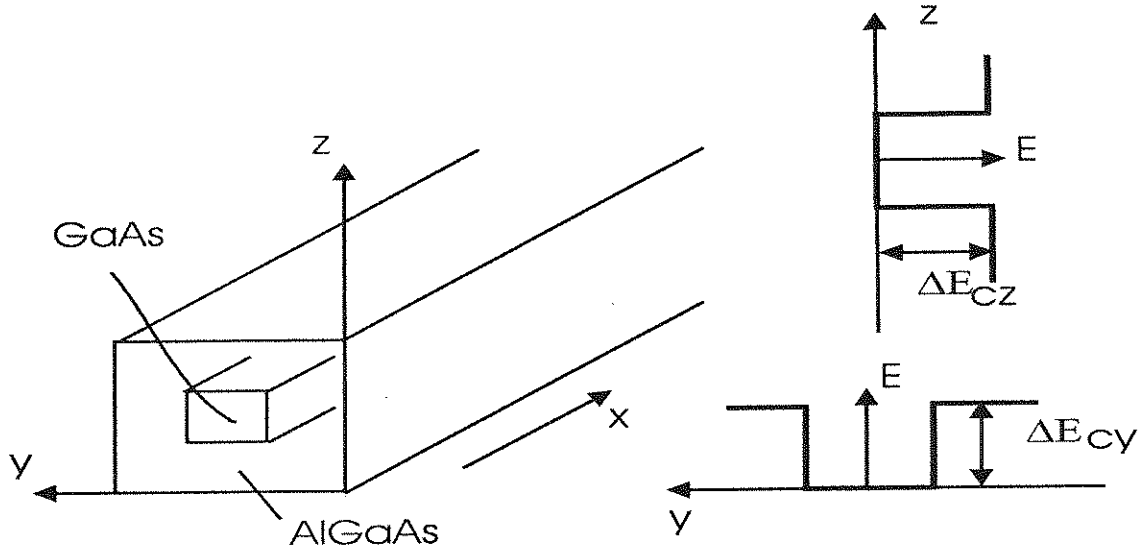
όπου  $\Theta(E - \epsilon_n) = 1, 0$  για  $E > \epsilon_n$  ή  $E < \epsilon_n$  αντίστοιχα, είναι η συνάρτηση Heaviside και  $\epsilon_n$  οι ενέργειες των δέσμιων καταστάσεων.



11α. Ενεργειακές υποζώνες σαν συνάρτηση του  $k_x$ . (β) Πυκνότητα καταστάσεων σαν συνάρτηση της ενέργειας,  $D_{QW}(E)$ , για το κβαντικό πηγάδι.

Στο όριο  $L_z \rightarrow 0$  η ενεργειακή απόσταση ανάμεσα στις δέσμιες καταστάσεις είναι μεγάλη και μόνο η πρώτη υποζώνη θα καλυφθεί, και συμφωνούμε με το αποτέλεσμα για το ηλεκτρόνιο στο επίπεδο. Στο άλλο όριο  $L_z \rightarrow \infty$  πρέπει να πάρουμε το τρισδιάστατο αέριο, καθόσον το άθροισμα στο  $n$  θα μετατραπεί σε ολοκλήρωμα, γιατί και στη  $z$ -κατεύθυνση έχουμε συνεχές ενεργειακό φάσμα.

### 1.2.2 Κβαντικό σύρμα



Σχ. 12 (α) Κβαντική ετέροδομή με σύρμα  $GaAs$  που περιβάλλεται από στρώμα  $AlGaAs$ . Στο σχεδιάγραμμα δίνεται η δυναμική ενέργεια  $V(x, y) = V_x(x) + V_y(y)$  πάνω στην διατομή. (β) Πυκνότητα καταστάσεων.

Ας θεωρήσουμε ότι τα ηλεκτρόνια είναι περιορισμένα σε ένα πολύ λεπτό σύρμα μήκους  $L_z$  και διατομής  $L_x \times L_y$  ( $L_z \gg L_x, L_y$ ) (Σχ. 9γ). Η λύση της εξίσωσης *Schrodinger* για ελεύθερα σωματίδια στην  $z$  είναι

$$\psi_k(z) = \sqrt{\frac{1}{L}} e^{ikz},$$

κανονικοποιημένη σε μήκος  $L$  με αντίστοιχη ενέργεια

$$E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Εισάγοντας περιοδικές οριακές συνθήκες στην  $z$ -κατεύθυνση,

$$\psi(z + L_z) = \psi(z) \implies e^{ikL_z} e^{ikz} = e^{ikz} \implies k = n \frac{2\pi}{L_z},$$

όπου  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  είναι ακέραιος αριθμός. Στις άλλες δύο κατευθύνσεις έχουμε περιορισμό με  $V(x, y) = V_x(x) + V_y(y)$ , δηλ. πάλι η χαμιλτονιανή είναι χωριζομένων μεταβλητών. Εάν μάλιστα θεωρήσουμε ότι το σύρμα έχει τετραγωνική διατομή και άπειρα τοιχώματα τότε στις  $x - y$  κατευθύνσεις οι κυματοσυναρτήσεις είναι αυτές του απειροβάθου πηγαδιού. Έτσι οι ιδιοσυναρτήσεις είναι

$$\psi_{n_x, n_y, k}(x, y, z) = \phi_{n_x, n_y}(x, y) \sqrt{\frac{1}{L_z}} e^{ikz}, \quad \phi_{n_x, n_y}(x, y) = \frac{2}{L_x L_y} \cos\left(\frac{n_x \pi x}{L_x}\right) \cos\left(\frac{n_y \pi y}{L_y}\right)$$

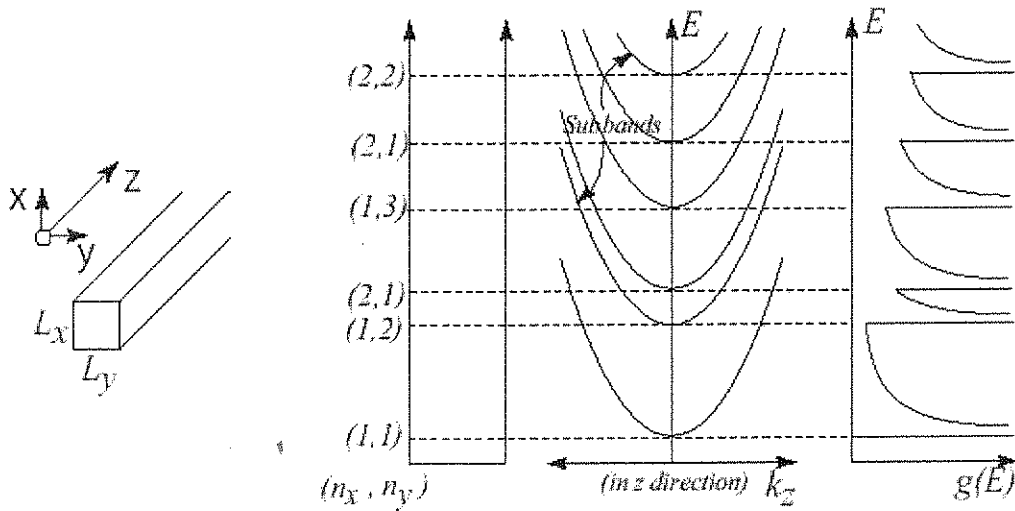
$$E_{n_x, n_y, k} = \epsilon_{n_x} + \epsilon_{n_y} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\epsilon_{n_x, n_y} \equiv \epsilon_{n_x} + \epsilon_{n_y} = + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left( \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} \right)$$

Στο Σχ. 9α σχεδιάζουμε τις ενεργειακές υποζώνες για το κβαντικό σύρμα, όπου το  $k$  παίρνει σχεδόν συνεχείς τιμές και έτσι για κάθε δέσμια κατάσταση  $\epsilon_{n_x, n_y}$  έχουμε μία υποζώνη με χαμηλότερη ενέργεια  $\epsilon_{1,1}$  (και  $\epsilon_{n_x, n_y}$  για τις επόμενες υποζώνες). Εάν  $L_x = L_y$  τότε έχουμε εκφυλισμό στις δέσμιες καταστάσεις, π.χ.  $\epsilon_{1,2} = \epsilon_{2,1}$  και πρέπει να το πάρουμε υπόψη. Για την πυκνότητα καταστάσεων μπορούμε να γράψουμε

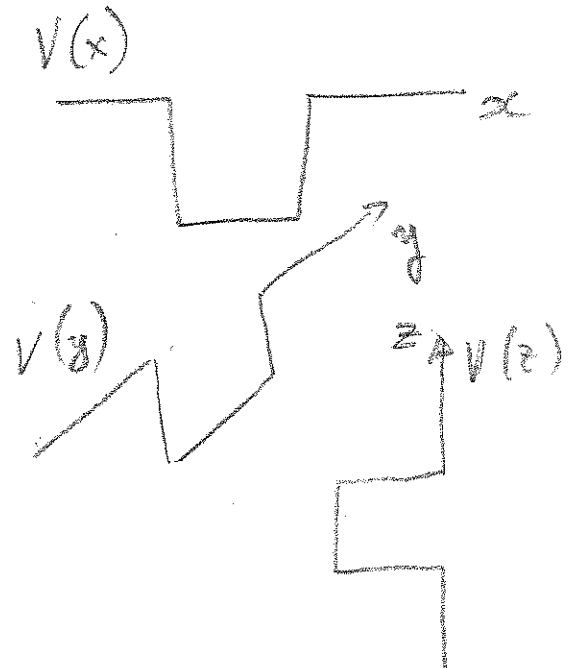
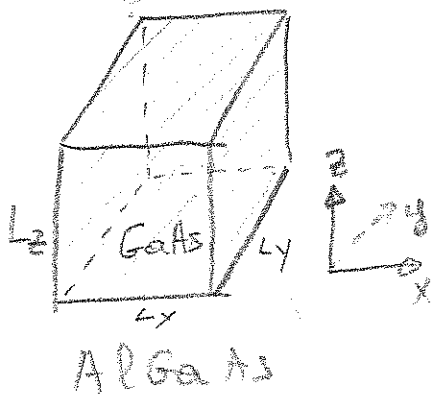
$$D(E) = \sum_{n_x, n_y=1,1}^{\infty, \infty} \frac{L_z}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{m}{2(E - \epsilon_{n_x, n_y})}} \Theta(E - \epsilon_{n_x, n_y})$$

Στο όριο  $E \rightarrow \epsilon_{n_x, n_y}$  έχουμε απειρισμό  $D(E) \rightarrow \infty$ .



13α. Ενεργειακές υποζώνες σαν συνάρτηση του  $k$ . (β) Πυκνότητα καταστάσεων σαν συνάρτηση της ενέργειας,  $D_{wire}(E)$ , για το κβαντικό σύρμα.

### 1.2.3 Κβαντική τελεία



Σχ. 12 (α) Κβαντική ετεροδομή με κυβική τελεία  $GaAs$  που περιβάλλεται από στρώμα  $AlGaAs$ . Στο σχεδιάγραμμα δίνεται η δυναμική ενέργεια  $V(x, y) = V_x(x) + V_y(y) + V_z(z)$ . (β) Πυκνότητα καταστάσεων με διακριτό φάσμα.

Ας θεωρήσουμε ότι τα ηλεκτρόνια είναι περιορισμένα σε ένα μικρό κύβο διαστάσεων  $L_x \times L_y \times L_z$  ( $L_x, L_y, L_z$  όχι απαραίτητα ίσα) (Σχ. 9γ) με δυναμικό  $V(x, y) = V_x(x) + V_y(y)$ , δηλ. πάλι η χαμιλτονιανή είναι χωριζομένων μεταβλητών. Η λύση της εξίσωσης *Schrodinger* για ελεύθερα σωματίδια με μηδενικές οριακές συνθήκες στις τρεις κατευθύνσεις είναι

$$\psi_{\vec{k}}(x, y, z) = \phi_{k_x}(x)\phi_{k_y}(y)\phi_{k_z}(z),$$

με τη μορφή στάσιμων κυμάτων οι κυματοσυνάρτησεις είναι αυτές του απειρόβαθου πηγαδιού.

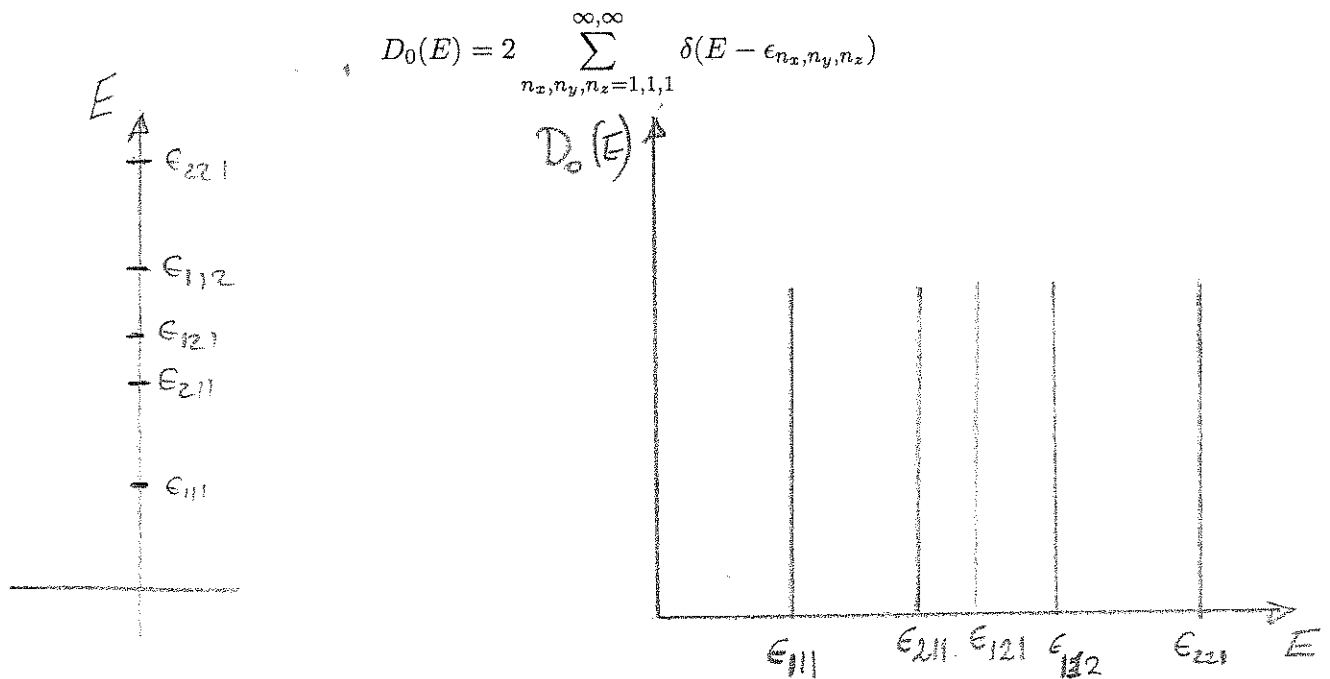
$$\phi_{k_x}(x) = \sqrt{\frac{2}{L_x}} \sin(k_x x), \quad k_x = n_x \frac{\pi}{L_x}$$

κανονικοποιημένη σε μήκος  $L_x$  και ομοίως για  $\phi_{k_y}(y)$  και  $\phi_{k_z}$ , όπου θεωρήσαμε άπειρα τοιχώματα, με αντίστοιχη ενέργεια

$$E_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(n_x^2\left(\frac{\pi}{L_x}\right)^2 + n_y^2\left(\frac{\pi}{L_y}\right)^2 + n_z^2\left(\frac{\pi}{L_z}\right)^2\right) \equiv \epsilon_{n_x, n_y, n_z}$$

$$k_i = n_i \frac{\pi}{L_i}, \quad n_i = 1, 2, \dots$$

Στο Σχ. 14α σχεδιάζουμε τις διακριτές ενεργειακές καταστάσεις για την κβαντική τελεία. Εάν  $L_x = L_y$  ή  $L_z$  τότε έχουμε εκφυλισμό στις δέσμιες καταστάσεις, π.χ.  $\epsilon_{1,2,1} = \epsilon_{2,1,1}$  και πρέπει να το πάρουμε υπόψη. Για την πυκνότητα καταστάσεων μπορούμε να γράψουμε



14α. Ενεργειακό φάσμα και (β) Πυκνότητα καταστάσεων σαν συνάρτηση της ενέργειας,  $D_{dot}(E)$ , για την κβαντική τελεία.