אלקטרוניקה פיסיקלית 044124

סמסטר אביב 2023

מועד ב

פתרון

הנחיות

- **משך הבחינה – 3 שעות.**
- **במבחן ישנן 2 חלקים - חלק 1 : 5 שאלות רב ברירה**
  חלק 2 : 2 שאלות פתוחות
- **בדקו שברשותכם 10 עמודים .**
- **ניתן להשתמש במחשבון ו- 8 דפי נוסחאות דו-צדדיים.**

בהצלחה!

חלק 1 (30 נקודות)

שאלה 1 (6 נקודות):

נתון גביש דו-מימדי מלבני עם וקטורי תא יחידה $\vec{a}=a\hat{x},\quad \vec{b}=b\hat{y}\quad (b>a)$.

הפוטנציאל הגבישי נתון ע״י הביטוי הבא:

$$U(x,y)=C_0\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)\cdot\cos\left(\frac{2\pi}{b}y\right)+2C_0\cos\left(\frac{4\pi}{a}x\right)\cdot\cos\left(\frac{4\pi}{b}y\right)$$

פער האנרגיה בנקודות הבאות מסומן באופן הבא:

$$\Delta E_1(k_x=\pi/a,k_y=0),\quad \Delta E_2(k_x=0,k_y=2\pi/b),\quad \Delta E_3(k_x=0,k_y=\pi/2b)$$

איזו טענה נכונה:

א. $\Delta E_1\neq 0,\quad \Delta E_2\neq 0,\quad \Delta E_3=0$

ב. $\Delta E_1=0,\quad \Delta E_2=0,\quad \Delta E_3\neq 0$

ג. $\Delta E_1\neq C_0,\quad \Delta E_2=0,\quad \Delta E_3=0$

ד. $\Delta E_1\neq 0,\quad \Delta E_2\neq 0,\quad \Delta E_3\neq 0$

פתרון: הפוטנציאל הגבישי נתון ע״י הביטוי הבא: $U(x,y)=\sum_{\vec{G}}C_G e^{iG_x x+iG_y y}$ כאשר G הם וקטורים של השריג ההופכי. במקרה שלנו $G_x=\pm\frac{2\pi}{a}\cdot n,\quad G_y=\pm\frac{2\pi}{b}\cdot n$

כאשר n הוא מספר שלם. לכן, בביטוי שנתון בשאלה, U מורכב מסכום הכולל n=1 (האיבר הראשון) ו n=2 (האיבר השני). פער האנרגיה נפתח עבור אותם k שקרובים (או ממש נמצאים) בקצות אזור ברילואן השונים.

הפרש האנרגיה בקצה אזור ברילואן נתון ע״י הקשר הבא: $\Delta E(G/2)=2C_G$.

לשם מציאת המקדמים של U(x,y) עבור הכיוונים השונים של התנע נרשום את U בצורה מפורשת עבור אותם כיוונים, כלומר, עבור תנועה בכיוון X בלבד נקבל:

$$U(x,0)=C_0\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right)+2C_0\cos\left(\frac{4\pi}{a}x\right)=$$
$$\frac{C_0}{2}\left(e^{i\frac{2\pi}{a}x}+e^{-i\frac{2\pi}{a}x}\right)+C_0\left(e^{i\frac{4\pi}{a}x}+e^{-i\frac{4\pi}{a}x}\right)$$

ועבור תנועה בכיוון ציר Y בלבד נקבל:

$$U(0,y)=C_0\cos\left(\frac{2\pi}{b}y\right)+2C_0\cos\left(\frac{4\pi}{b}y\right)=$$
$$\frac{C_0}{2}\left(e^{i\frac{2\pi}{b}y}+e^{-i\frac{2\pi}{b}y}\right)+C_0\left(e^{i\frac{4\pi}{b}y}+e^{-i\frac{4\pi}{b}y}\right)$$

נבדוק מיהם וקטורי הגל השונים המופיעים בביטויים לפערי האנרגיה:

עבור ההפרש הראשון: $\Delta E_1(k_x=\pi/a=\frac{1}{2}\frac{2\pi}{a},k_y=0)=2C_{\frac{2\pi}{a}}=2\frac{C_0}{2}=C_0$

עבור ההפרש השני: $\Delta E_2(k_x=0,k_y=\frac{2\pi}{b}=\frac{1}{2}\frac{4\pi}{b})=2C_{\frac{4\pi}{b}}=2C_0$

שימו לב שפער אמרגיה זה הוא עבור פס אחד יותר גבוה מהפס הקודם.

עבור ההפרש השלישי: $\Delta E_3(k_x=0,k_y=\pi/2b=\frac{1}{4}\frac{2\pi}{b})$

במקרה הזה, הוקטור נמצא בתוך אזור ברילואן הראשון (מרוחק מקצותיו) ולכן אין אף וקטור שריג הופכי שיכול לייצר פיזור מתאים ולפתוח פער אנרגיה ולכן, $\Delta E_3(k_x=0,k_y=\pi/2b=\frac{1}{4}\frac{2\pi}{b})=0$.

לפיכך, א' היא התשובה הנכונה.

שאלה 2 (6 נקודות):

מודל פשוט למעבר פאזה ממוצק לגז מבוסס על ההנחות הבאות: נתון שריג ריבועי דו-מימדי עם N אתרים המצומד לאמבט חום בטמפרטורה T. בכל אתר נמצא אטום יחיד. כאשר האטום נמצא בפאזה המוצקה, האנרגיה של האתר היא שלילית: $\epsilon = -\epsilon_0$ כאשר $\epsilon_0 > 0$. כאשר האטום נמצא בפאזה הגזית, האנרגיה של האתר היא $\epsilon = 0$. בנוסף, בפאזה הגזית הניוון של רמת האנרגיה היא $\Omega \gg 1$.

הביטוי למספר האטומים הנמצאים בפאזה המוצקה נתון ע"י הביטוי הבא:

א. $N\dfrac{1}{e^{\varepsilon_0/k_BT}+1}$

ב. $N\dfrac{e^{\varepsilon_0/k_BT}}{\Omega e^{-\varepsilon_0/k_BT}+1}$

ג. $N\dfrac{e^{\varepsilon_0/k_BT}}{e^{\varepsilon_0/k_BT}+\Omega}$

ד. $N\dfrac{e^{-\varepsilon_0/k_BT}}{e^{-\varepsilon_0/k_BT}+\Omega}$

פתרון: נחשב תחילה את פונקציית החלוקה ולאחר מכן את הסיכוי להיות בפאזה המוצקה.

$$Z = e^{-(-\varepsilon_0)/k_BT} + \Omega e^{-0/k_BT} = e^{\varepsilon_0/k_BT} + \Omega$$

הסיכוי להיות בפאזה המוצקה הוא:

$$P(\varepsilon = -\varepsilon_0) = \frac{e^{\varepsilon_0/k_BT}}{Z} = \frac{e^{\varepsilon_0/k_BT}}{e^{\varepsilon_0/k_BT}+\Omega}$$

ולכן מספר האטומים בפאזה המוצקה יהיה:

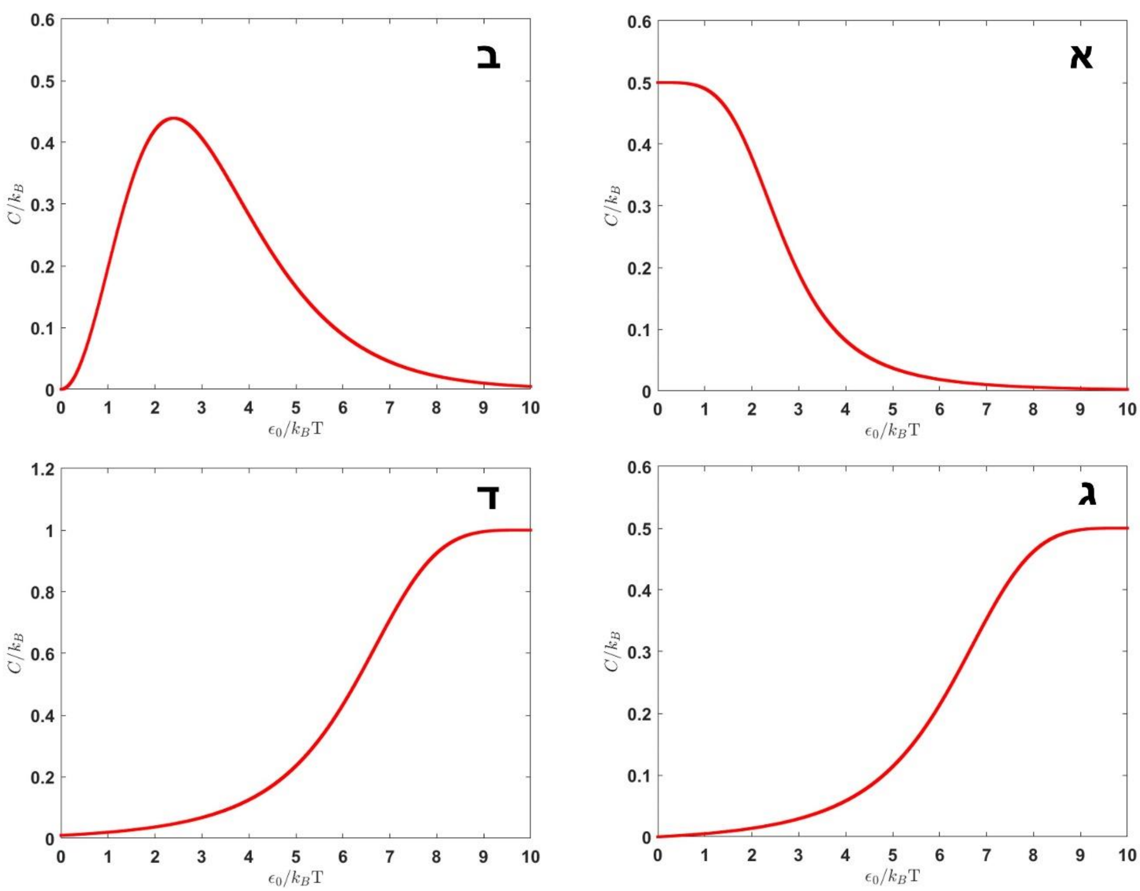
$$n(\varepsilon = -\varepsilon_0) = NP(\varepsilon = -\varepsilon_0) = \frac{Ne^{\varepsilon_0/k_BT}}{e^{\varepsilon_0/k_BT}+\Omega}$$

והתשובה הנכונה היא ג'.

<u>שאלה 3 (6 נקודות):</u>

נתון מוצק תלת מימדי עם N אתרים המצומד לאמבט עם טמפרטורה T. בכל אתר נמצא אטום עם שתי רמות אנרגיה אפשריות. רמת יסוד עם $\epsilon_g = 0$ ורמה מעוררת עם $\epsilon_{ex} = \epsilon_0$.

קיבול החום לאטום נתון ע"י הגרף הבא:



פתרון : על השאלה הזאת ניתן לענות בשתי דרכים. אחת משיקולים אינטואיטיבים ושניה בצורה ריגורוזית.

דרך א: קיבול חום מייצג את שינוי האנרגיה כתוצאה משינוי בטמפרטורה. עבור טמפרטורות הנמוכות בהרבה מאנרגיית המצב המעורר ($\epsilon_{ex} \gg k_B T$) הסיכוי לאכלס את הרמה המעוררת יהיה מתכונתי ל $e^{-\varepsilon_0/k_BT}$ ולכן קיבול החום ישאף לאפס בגבול המדובר (רק א' וב' מקיימים זאת). עבור הגבול השני, ($\epsilon_{ex} \ll k_B T$) האכלוס של שתי הרמות יהיה זהה ולא יהיה שינוי באנרגיה הכוללת כתוצאה משינוי ב T, ולכן, רק תשובה ב' נכונה.

דרך ב: נחשב תחילה את Z:

$$Z = 1 + e^{-\varepsilon_0/k_BT}$$

$$E=-\frac{\partial}{\partial\beta}\ln(1+e^{-\varepsilon_0/k_BT})=\frac{\varepsilon_0 e^{-\varepsilon_0/k_BT}}{1+e^{-\varepsilon_0/k_BT}}$$

$$C=\frac{\partial E}{\partial T}=\frac{\partial E}{\partial\beta}\frac{\partial\beta}{\partial T}=-\frac{1}{k_BT^2}\frac{\partial}{\partial\beta}\frac{\varepsilon_0 e^{-\beta\varepsilon_0}}{1+e^{-\beta\varepsilon_0}}=-\frac{1}{k_BT^2}\left(\frac{-\varepsilon_0^2 e^{-\beta\varepsilon_0}}{1+e^{-\beta\varepsilon_0}}-\frac{-\varepsilon_0^2 e^{-2\beta\varepsilon_0}}{\left(1+e^{-\beta\varepsilon_0}\right)^2}\right)=$$
$$\frac{k_B}{\left(k_BT\right)^2}\frac{\varepsilon_0^2 e^{-\beta\varepsilon_0}}{1+e^{-\beta\varepsilon_0}}\left(1-\frac{e^{-2\beta\varepsilon_0}}{1+e^{-\beta\varepsilon_0}}\right)=k_B\frac{\beta^2\varepsilon_0^2 e^{-\beta\varepsilon_0}}{1+e^{-\beta\varepsilon_0}}\left(1-\frac{e^{-2\beta\varepsilon_0}}{1+e^{-\beta\varepsilon_0}}\right)$$

עבור $k_BT \gg \epsilon_{ex}$ או $\beta\epsilon_0 \gg 1$

$$\lim_{\beta\varepsilon_0\to\infty} C=k_B\beta^2\varepsilon_0^2 e^{-\beta\varepsilon_0}$$

כלומר, C שואף לאפס בגבול הזה. תשובות א' וב' מתאימות.

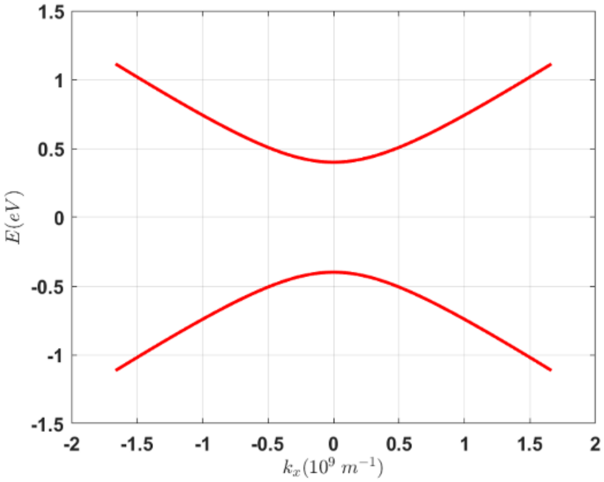
בגבול השני, $\beta\epsilon_0 \ll 1$ (T שואף לאינסוף) נקבל שוב $\lim_{\beta\varepsilon_0\to 0} C\propto k_B\beta^2\varepsilon_0^2$ ומי שמתאים היא תשובה ב'. אפשר לראות כי המעבר בין שני התחומים צפוי להתרחש עבור $\beta\epsilon_0 \approx 1$ כפי שמשורטט באיור ב'.

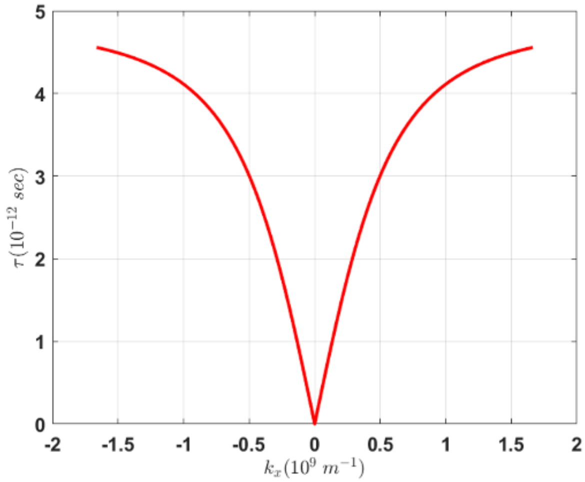
שאלה 4 (6 נקודות):

נתונה צינורית פחמן חד מימדית מסוג מוליך למחצה עם יחס דיספרסיה מהצורה הבאה:

$E(k_x) = \pm\sqrt{\Delta^2 + (\hbar v_0 k_x)^2}$ כאשר $\Delta = 0.4eV$, $v_0 = 10^6\ m/\sec$ (איור שמאלי).

כתוצאה מאי-סדר לאורך הצינורית זמן הפיזור הממוצע (τ) בטמפרטורות נמוכות מרמת פרמי מוצג באיור הימני.





בנוסף נתון כי צפיפות נושאי המטען של האלקטרונים היא $n = 6.35 \cdot 10^8\ m^{-1}$ ושהניוון של כל רמת אנרגיה הוא 4 (שני ספינים ושני תתי שריגים). בהנחה שהטמפרטורה נמוכה מאד יחסית לרמת פרמי, מהי רמת פרמי של צינורית הפחמן:

א. $E_F = 2\Delta$

ב. $E_F = 1eV$

ג. $E_F = 0.5eV$

ד. $E_F = \Delta$

פתרון: על מנת למצוא את רמת פרמי צריך למצוא את k_F. מכיוון שהצינורית היא חד מימדית מתקיים הקשר:

$$n = 4\frac{2k_F}{2\pi} = \frac{4k_F}{\pi} \quad \Rightarrow \quad k_F = \frac{1}{4}\pi n = \frac{1}{4}\pi \cdot 6.35 \cdot 10^8 = 0.5 \cdot 10^9 m^{-1}$$

אחרי ש k_F ידוע ניתן לחלץ את רמת פרמי מהגרף של יחס הדיספרסיה -> $E_F = 0.5eV$

ולכן, תשובה ג' היא הנכונה.

שאלה 5 (6 נקודות):

מרחק הפיזור הממוצע (l_{mfp}) בטמפרטורות נמוכות יחסית לרמת פרמי של צינורית הפחמן המתוארת בשאלה הקודמת, נתון ע״י הערך הבא:

א. $l_{mfp} = 230\ nm$

ב. $l_{mfp} = 1.2\ \mu m$

ג. $l_{mfp} = 1.95\ \mu m$

ד. $l_{mfp} = 512\ nm$

פתרון: מרחק הפיזור הממוצע נתון ע״י הקשר הבא:

$$l_{mfp} = v_F \tau$$

את זמן הפיזור הממוצע מחלצים מהגרף הימני של השאלה הקודמת עבור $k_F = 0.5\cdot 10^9 m^{-1}$

ונקבל $\tau = 3\cdot 10^{-12}\sec$.

את מהירות פרמי עבור התנע המדובר נחלץ באמצעות הקשר הבא:

$$v_F = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial}{\partial k_x}E(k_x) = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial}{\partial k_x}\sqrt{\Delta^2 + (\hbar v_0 k_x)^2} = \frac{1}{\hbar}\frac{(\hbar v_0)^2 k_x}{\sqrt{\Delta^2 + (\hbar v_0 k_x)^2}} = \frac{\hbar v_0^2 k_x}{E(k_x)}$$

עבור ריכוז נושאי המטען שנתון בשאלה נציב את הערכים המתאימים ונקבל את מהירות פרמי:

$$v_F = \frac{\hbar v_0^2 k_x}{E(k_x)} = \frac{\hbar (10^6)^2 0.5\cdot 10^9}{0.5eV} = \frac{1.05\cdot 10^{-34}(10^6)^2 0.5\cdot 10^9}{0.5\cdot 1.6\cdot 10^{-19}} = 6.5\cdot 10^5\ m/\sec$$

מרחק הפיזור הממוצע הינו

$$l_{mph} = v_f \tau = 6.5\times 10^5 \times 3\times 10^{-12} = 1.95\mu m$$

התשובה הנכונה – ג׳.

חלק 2 (70 נקודות + 10 נקודות בונוס)

שאלה 6 (35 נקודות + 5 נקודות בונוס)

נתונות 2 מערכות מוליכות דו-ממדיות עם שטח זהה A. יחסי הדיספרסיה של האלקטרונים במערכת הראשונה והשנייה נתונים ע״י הביטויים הבאים, בהתאמה:

$$\varepsilon_1(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m}k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m}k_y^2$$

$$\varepsilon_2(\vec{k}) = \hbar c|\vec{k}|^{1/\alpha}$$

כאשר c ו- α הם מספרים ממשיים וחיוביים.

(א) חשבו את צפיפות המצבים ליחידת שטח עבור כל אחת מהמערכות . (10 נקודות)

פתרון: עבור מערכת דו-ממדית עם יחס דיספרסיה כמו של מערכת 1, ראינו שצפיפות המצבים היא: $g_1(\varepsilon) = \frac{m}{\pi\hbar^2}$.

נחשב עבור המערכת השנייה: רדיוס עקום שווה אנרגיה = $(\frac{\varepsilon}{\hbar c})^\alpha$

מכאן:
$$g_2(\varepsilon) = \frac{d}{d\varepsilon}\left(\pi\left(\frac{\varepsilon}{\hbar c}\right)^{2\alpha}\frac{1}{(2\pi)^2/A}\,\frac{1}{A}\,2\right)$$

$$g_2(\varepsilon) = \frac{\alpha}{\pi(\hbar c)^{2\alpha}}\varepsilon^{2\alpha-1}$$

בסעיפים הבאים שומרים על טמפרטורה השואפת לאפס בשתי המערכות.

(ב) נתון שמספר האלקטרונים הכולל של שתי המערכות הוא N.
מחברים את שתי המערכות בעזרת תייל מוליך. אחרי זמן ארוך מאוד, מודדים את צפיפות האלקטרונים בשתי המערכות ומוצאים שהצפיפויות שוות. מה צריך להיות הערך של c במקרה הזה?
בטאו את תשובתכם בעזרת $A, N, m, \alpha, \hbar$ וקבועים מספריים. (12 נקודות)

פתרון: אחרי זמן ארוך מאוד, שתי המערכות נמצאות בשיווי משקל אחת עם השנייה. לפי הצבר הגרנד קנוני, צריך להתקיים שוויון בין הפוטנציאלים הכימיים. בטמפרטורה השואפת לאפס זה אומר שוויון בין אנרגיות פרמי.
נחשב את אנרגיות פרמי, עבור מערכת 1:

$$n = \int_0^{\varepsilon_F^{(1)}} g_1(\varepsilon)d\varepsilon \;= \frac{m}{\pi\hbar^2}\varepsilon_F^{(1)}$$

$$\varepsilon_F^{(1)} = \frac{\pi\hbar^2}{m}n$$

עבור מערכת 2:

$$n=\int_0^{\varepsilon_F^{(2)}} g_2(\varepsilon)d\varepsilon \ =\frac{\alpha}{\pi(\hbar c)^{2\alpha}}\int_0^{\varepsilon_F^{(2)}} \varepsilon^{2\alpha-1}d\varepsilon \ =\frac{1}{2\pi}(\frac{\varepsilon_F^{(2)}}{\hbar c})^{2\alpha}$$

$$\varepsilon_F^{(2)}=(2\pi n)^{1/2\alpha}\,\hbar c$$

נתון שצפיפות האלקטרונים זהה בכל אחת מהמערכות, לכן, הצפיפות בכל מערכת: $n=(\frac{N}{2})\frac{1}{A}$

שוויון בין אנרגיות פרמי מתקיים כאשר:

$$c=\frac{\pi\hbar N}{2mA}(\frac{A}{\pi N})^{1/2\alpha}$$

(ג) מהו גודל התנע הגדול ביותר של האלקטרונים בכל אחת מהמערכות? (7 נקודות)

פתרון: חישוב תנע פרמי עבור מערכת 1:

$$\varepsilon_F^{(1)}=\frac{\hbar^2}{2m}k_{F1}^2\rightarrow\ k_{F1}=(\frac{\pi N}{A})^{1/2}$$

עבור מערכת 2:

$$\varepsilon_F^{(2)}=\hbar c k_{F2}^{1/\alpha}\rightarrow\ k_{F2}=(\frac{\pi N}{A})^{1/2}$$

(ד) כעת מסירים את התייל שמחבר את שתי המערכות ולאחר מכן מוסיפים אלקטרונים למערכת 2, כך שנוצר מתח חשמלי בין המערכות.
כיצד אנרגיית פרמי משתנה במערכת 2 (גדלה\קטנה) והאם היא משתנה במערכת 1?
הסבירו בלי לעשות חישובים. (6 נקודות)

פתרון: כפי שרואים מהקשר בסעיף הקודם, אנרגיית פרמי תגדל עם הגדלת צפיפות האלקטרונים, לכן אנרגיית פרמי תגדל במערכת 2 ולא תשתנה במערכת 1.
אפשר להסתכל על זה בדרך אחרת ולהגיד שאחר הוספת אלקטרונים למערכת מסויימת, בגלל עקרון האיסור של פאולי, האלקטרונים לא יכולים לאכלס את המצבים שכבר מאוכלסים, ולכן הם יאכלסו את המצבים הריקים בעלי אנרגיות גדולות יותר, מה שמגדיל את האנרגיה המקסימלית שמגיעים אליה האלקטרונים ובכך אנרגית פרמי גדלה.

(ה) **בונוס** - לאחר מכן, מחברים את שתי המערכות באמצעות תייל מוליך. נתייחס לתייל כאל מערכת תלת ממדית של גליל שהציר הראשי שלו (ציר x) ארוך מאוד, והוא מחבר את שתי המערכות.
הדיספרסיה של האלקטרונים בתייל נתונה ע"י הביטוי הבא:

$$\varepsilon(\vec{k})=\frac{\hbar^2}{2m_x}k_x^2+\frac{\hbar^2}{2m_y}k_y^2+\frac{\hbar^2}{2m_z}k_z^2$$

צפיפות האלקטרונים בתייל היא n_0 וזמן הפיזור הממוצע הוא τ_0.
רשמו ביטוי למוליכות החשמלית שנמדדה בתייל. (5 נקודות)

פתרון : השדה החשמלי מצביע בכיוון שמחבר את 2 המערכות, כלומר לאורך ציר x, כלומר $\vec{E} = E\hat{x}$.
ממודל דרודה, המוליכות החשמלית היא : $\sigma = n_0 e^2 \tau_0 m^{-1}$, כאשר m^{-1} הוא טנזור המסה האפקטיבית ההופכית, שלפי יחס הדיספרסיה היא :

$$m^{-1} = \begin{pmatrix} 1/m_x & 0 & 0 \\ 0 & 1/m_y & 0 \\ 0 & 0 & 1/m_z \end{pmatrix}$$

, כלומר טנזור המוליכות הוא :

$$\sigma = n_0 e^2 \tau_0 \begin{pmatrix} 1/m_x & 0 & 0 \\ 0 & 1/m_y & 0 \\ 0 & 0 & 1/m_z \end{pmatrix}$$

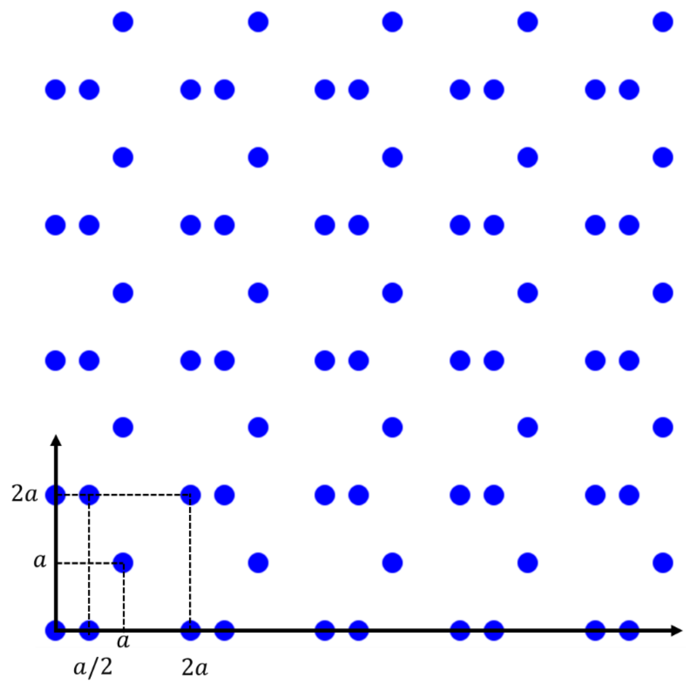
. לפי חוק אוהם, צפיפות הזרם היא :

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} = n_0 e^2 \tau_0 \begin{pmatrix} \frac{1}{m_x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{n_0 e^2 \tau_0}{m_x} E \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{n_0 e^2 \tau_0}{m_x} E\hat{x}$$

לכן, המוליכות בציר x היא זאת שנמדדת : $\sigma_{xx} = \frac{n_0 e^2 \tau_0}{m_x}$.

שאלה 7 (35 נקודות + 5 נקודות בונוס)

נתון הגביש הבא :



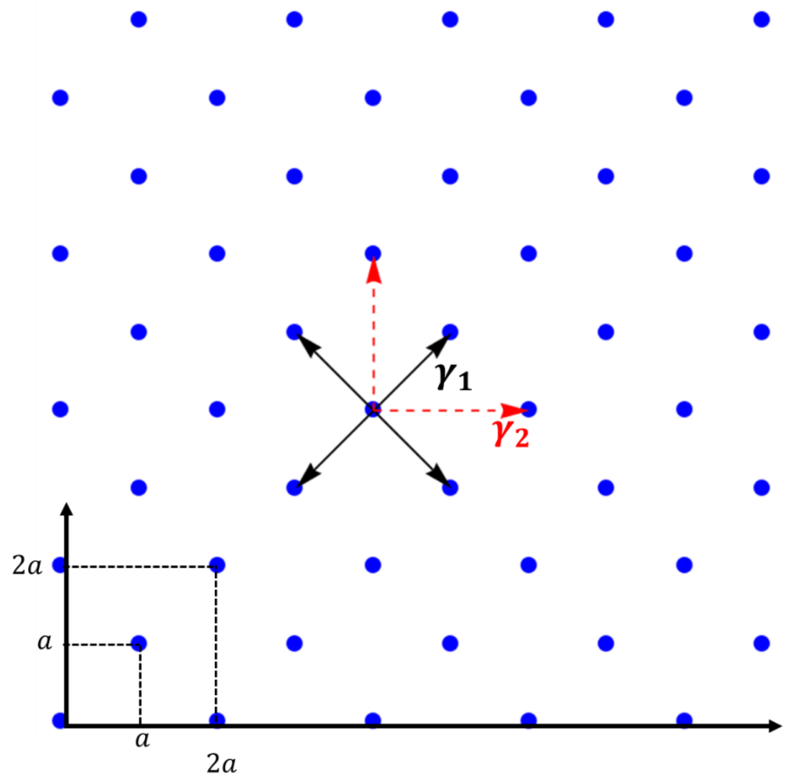
א. רשמו וקטורים ראשוניים ווקטורי הבסיס. (5 נקודות)

ב. ציירו (**באופן מדויק**) על גבי **השריג** שבחרתם את תא Wigner-Seitz . (5 נקודות)

ג. מצאו את הווקטורים של השריג ההופכי וציירו אותו. ציירו את איזור Brillouin הראשון. (5 נקודות)

ד. מבלי לפתור את הבעיה הסבירו מהו מספר פסי אנרגיה הצפוי להתקבל בהנחה שכל אטום תורם אורביטל אחד בלבד. הצדיקו את תשובתכם. (5 נקודות)

כעת נניח שנתון הגביש הבא:



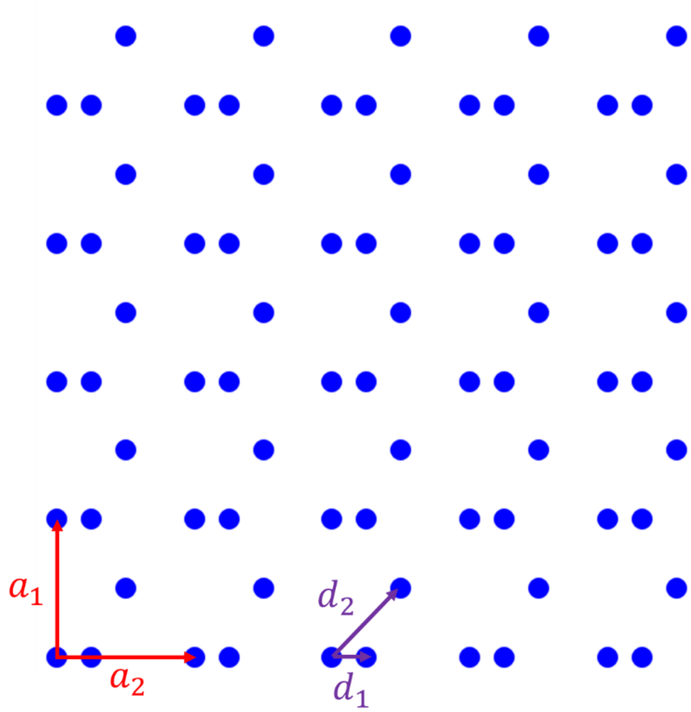
ה. מצאו את מבנה הפסים בעזרת שיטת הקשירה ההדוקה בהנחה שהצימוד בין השכנים הוא: $\gamma_1 = \gamma, \gamma_2 = 0$ והאנרגיה של האורביטלים הינה E_0. **בסעיף זה התייחסו רק לשכנים עם הצימוד $\boldsymbol{\gamma_1}$.** (8 נקודות)

ו. קבלו ביטוי M^{-1} (הטנזור ההופכי של המסה האפקטיבית) במינימום המוחלט של האנרגיה. (7 נקודות)

ז. **בונוס -** לו היינו לוקחים בחשבון גם צימוד לשכנים עם קבוע צימוד γ_2 מהו מספר פסי אנרגיה שהיינו מקבלים? (5 נקודות)

פתרון :

א +ב. דוגמא לווקטורים ראשוניים ווקטורי בסיס

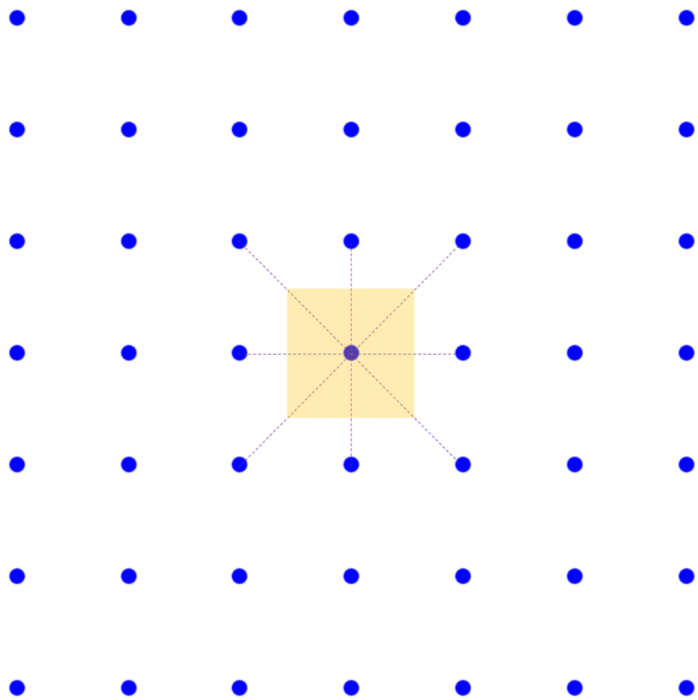


$$\vec{a}_1 = 2a\hat{y}$$
$$\vec{a}_2 = 2a\hat{x}$$

$$\vec{d}_1 = \frac{a}{2}\hat{x}$$
$$\vec{d}_2 = a\hat{x} + a\hat{y}$$
$$\vec{d}_3 = 0$$

השריג המתקבל הינו מהצורה

כאשר תא Wigner Seitz הינו מהצורה



ג. תחילה נמצא את שטחו של תא היחידה הנפרש על ידי וקטורים ראשוניים

$$S = |\vec{a}_1 \times \vec{a}_2| = |2a\hat{x} \times 2a\hat{y}| = 4a^2$$

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \hat{z}}{S} = 2\pi \frac{2a\hat{y} \times \hat{z}}{4a^2} = -\frac{\pi}{a}\hat{x}$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\hat{z} \times \vec{a}_1}{S} = 2\pi \frac{\hat{z} \times 2a\hat{x}}{4a^2} = \frac{\pi}{a}\hat{y}$$

השריג המתקבל הינו שריג ריבועי

תא *Wigner Seitz* יהיה דומה למה שקיבלנו עבור שריג הישיר רק מסובבת ב-90 מעלות.

ד. מכיוון שתא היחידה המינימאלי מכיל שלושה אטומים נצפה לקבל שלושה פסי אנרגיה.

ה. תחילה נכתוב את הווקטורים לשכנים קרובים

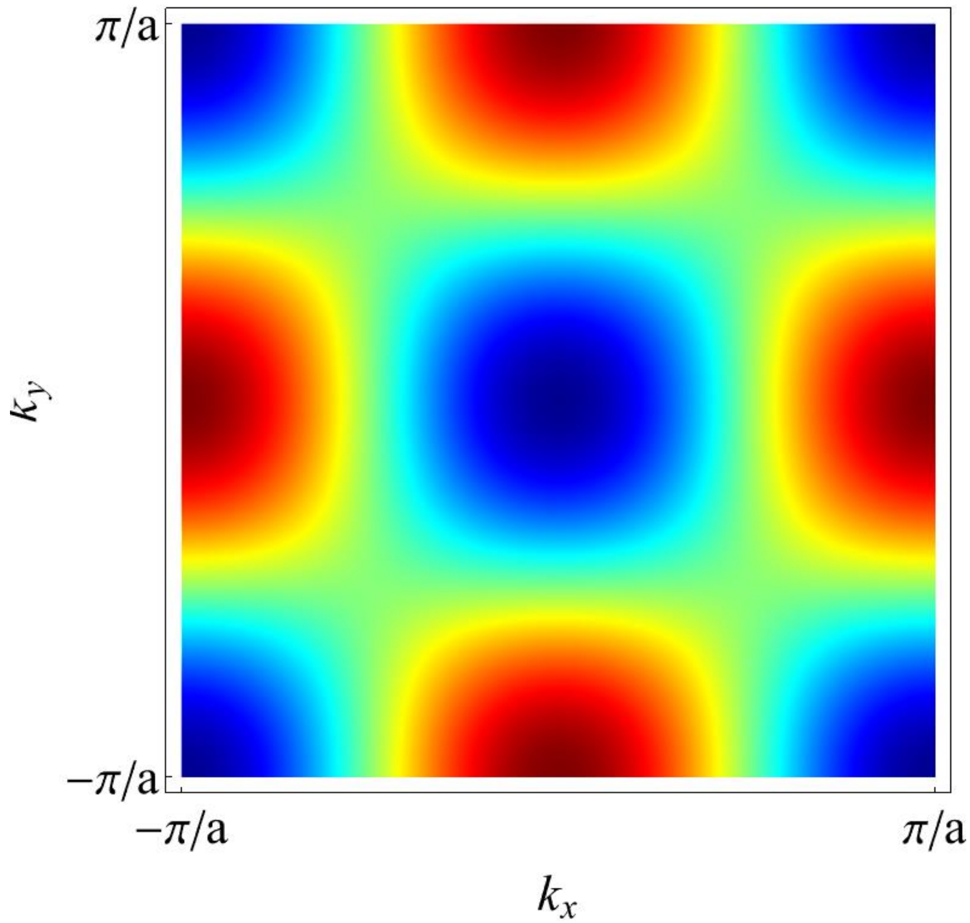
שימו לב! בבחינה נפלה טעות בסימון הזווית. עבור הזווית של 60 מעלות הציור המתקבל שונה מהציור המוצג בגוף השאלה. הציור הנכון אמור להתקבל כמוצג מטה.

מצורף הפתרון עבור ציור המדויק השוני היחיד בין הפתרון המדויק לבין הפתרון השגוי הינו מינוס בווקטור לשכן הקרוב.

$$\delta_1 = a(1,1)$$
$$\delta_2 = a(-1,-1)$$
$$\delta_3 = a(1,-1)$$
$$\delta_4 = a(-1,1)$$

$$\Omega = \gamma_1 \sum_{n.n.} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_{nn}} = 4\gamma_1 \cos(k_x a)\cos(k_y a)$$

$$E(k_x, k_y) = E_0 - 4\gamma_1 \cos(k_x a) \cos(k_y a)$$



בלבן מוצג תא ראשוני שאינו איזור Brillouin הראשון.

ו. מכיוון שהמינימום המוחלט של אנרגיה מתקבל ב- $k_x = k_y = 0$ נקבל ש-

$$M_{xx}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2}{\partial k_x^2} = \frac{4\gamma_1 a^2}{\hbar^2}$$
$$M_{yy}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2}{\partial k_y^2} = \frac{4\gamma_1 a^2}{\hbar^2}$$
$$M_{xy}^{-1} = M_{yx}^{-1} = 0$$

ז. מספר פסי אנרגיה יישאר זהה לזה שקיבלנו בסעיף הקודם, השכנים הנוספים היה משנים את $\Omega(\boldsymbol{k})$ **בלבד.**

טבלת נוסחאות שימושיות:

גדלים פיזיקליים שימושיים:

Atomic Weight Conversion	$1amu = 1.661 \times 10^{-27} kg$
Plank's Constant	$h = 6.626 \times 10^{-34}\ J \cdot sec$
Reduced Plank's Constant	$\hbar = 1.055 \times 10^{-34} J \cdot sec$
Avogadro Constant	$N_A = 6.022 \times 10^{23}$
Gas Constant	$R = 8.314\ J\ K^{-1} mol^{-1}$
Boltzmann's Constant	$k_b = 1.381 \times 10^{-23} J/K$
Electron Mass	$m_e = 9.109 \times 10^{-31} kg$
Electron Charge	$q = 1.602 \times 10^{-19}$
Bohr Radius	$a_0 = 5.292 \times 10^{-11} m$
Speed of Light	$c = 2.997 \times 10^{8} m/sec$

זהויות אלגבריות/טריגונומטריות שימושיות:

Trigonometric Identities
$\cos(a)\cos(b) = 1/2(\cos(a+b) + \cos(a-b))$
$\sin(a)\sin(b) = 1/2(\cos(a-b) - \cos(a+b))$
$\sin(a)\cos(b) = 1/2(\sin(a+b) + \sin(a-b))$
$\sin(2a) = 2\sin(a)\cos(b)$
$\cos(2a) = \cos^2 a - \sin^2 b$
$\sin^2 a = 1/2(1 - \cos(2a))$
$\cos^2 a = 1/2(1 + \cos(2a))$
$\sin(\pi - a) = \sin(a)$
$\cos(\pi - a) - \cos(a)$
$\sin(\pi/2 - a) = \cos(a)$
$\cos(\pi/2 - a) = \sin(a)$
$\sin(-a) = -\sin(a)$
$\cos(-a) = \cos(a)$
$\cos(a) = 1/2\left(e^{ia} + e^{-ia}\right)$
$\sin(a) = 1/(2i)\left(e^{ia} - e^{-ia}\right)$
$\cosh(a) = \frac{1}{2}(e^{a} + e^{-a})$
$\sinh(a) = \frac{1}{2}(e^{a} - e^{-a})$

אינטגרליים שימושיים:

Gaussian Distribution
$f(x)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}}$ μתוחלת σסטיית תקן

Gaussian Integral $\alpha>0$
$\int_{a}^{b}e^{-\alpha(x+b)^2}dx=\sqrt{\pi/\alpha}$

Gamma Function

$$\Gamma(n)\equiv\int_0^\infty x^{n-1}e^{-x}dx=n-1!$$

$$\Gamma(n)=(n-1)\Gamma(n-1)$$

3	5/2	2	3/2	1	1/2	$\boldsymbol{n}$
2	$3\sqrt{\pi}/4$	1	$\sqrt{\pi}/2$	1	$\sqrt{\pi}$	$\boldsymbol{\Gamma(n)}$

More Gaussian Integrals $\alpha>0,n\geq0$

$$I(n)\equiv\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x^2}dx=\frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)\alpha^{-\frac{n+1}{2}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}x^n e^{-\alpha x^2}dx=\begin{cases}2I(n) & n\in Even\\ 0 & n\in Odd\end{cases}$$

5	4	3	2	1	0	$\boldsymbol{n}$
$\frac{1}{\alpha^3}$	$\frac{3}{8}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^5}}$	$\frac{1}{2\alpha^2}$	$\frac{1}{4}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}$	$\frac{1}{2\alpha}$	$\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$	$\boldsymbol{I(n)}$