אלקטרוניקה פיזיקלית 044124

סמסטר חורף 2020-2021

מועד א' - זום

הנחיות

1. משך הבחינה ־ שלוש שעות.

2. בבחינה 3 שאלות. בידקו כי ברשותכם 5 עמודים כולל עמוד זה.

3. מותר השימוש בכל חומר פתוח (בפרט ניתן לכתוב את הבחינה על גבי טאבלט או להשתמש בטאבלט/שני מסכים).

4. בכל מקרה יש להעלות את הבחינה (הסרוקה) למטלה המוגדרת באתר המודל של הקורס.

5. כיתבו בכתב יד ברור.

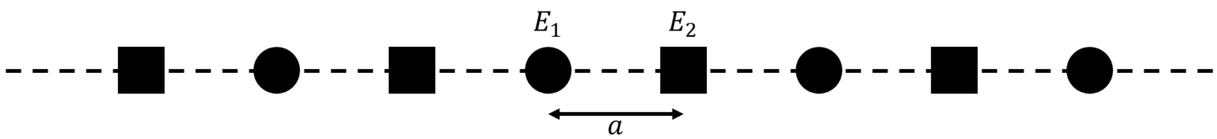
6. תשובות לא מנומקות לא תתקבלנה.

7. אנא ודאו שרשמתם את מספר תעודת הזהות על מחברת הבחינה (לצורך העניין הדפים בהם השתמשתם).

8. סך הניקוד במבחן הוא 110 נקודות (10 נק׳ בונוס בשאלה 3).

שאלה מספר 1 (30 נקודות):

נתונה שרשרת מחזורית אינסופית של אטומים משני סוגים (עיגול/ריבוע) שהמרחק בינהם הינו a כלשהוא. כל אטום מכיל רמת אנרגיה אחת בלבד (ניתן להניח ש- $E_1, E_2 > 0$). נתון כי אנרגיית הצימוד בין שני סוגים שונים של אטומים הינה $E_{12} = E_{21} > 0$ כלשהיא.



א. **(5 נק') -** כזכור, במקרה של סריג עם בסיס מסדר 2, נקבל מטריצה 2 על 2, שאברי האלכסון הראשי שלה הינם האנרגיות העצמיות ואברי האלכסון המשני הינם קבועי הצימוד. כתבו כיצד תיראה המטריצה הנ"ל כתלות בפרמטרים הנתונים.
הדרכה: השתמשו בשיטה שראינו בתרגול 12. אין צורך לחשב את אברי המטריצה!

כפי שראינו בתרגול על קשירה הדוקה עם בסיס בגודל 2, נקבל מטריצה מהצורה:

$$\begin{pmatrix} E_1 & E_{k_{12}} \\ E_{k_{12}}^* & E_2 \end{pmatrix}$$

ב. **(10 נק') -** חשבו את איברי המטריצה שכתבתם בסעיף הקודם. מצאו ביטוי אנליטי למבנה הפסים המתקבל. כמה פסים מצאתם? מהו רוחבו של אזור ברילואן? נמקו תשובתכם!
הדרכה: השתמשו בשיטה שראינו בתרגול 12.

שימו לב: באופן כללי מתקיים $|x| = \sqrt{x^2}$

ניתן לראות שמדובר בסריג עם בסיס המכיל 2 אטומים. נמצא כיצד כל אחד מהאטומים מושפע משכניו:

$$E_{k_{12}} = \sum_{m=1}^{N} e^{-i\vec{k}\cdot\overrightarrow{\Delta x_m}} \left\langle \psi(\vec{x}) \middle| H \middle| \psi(\vec{x} - \overrightarrow{\Delta x_m}) \right\rangle = E_{12}e^{-ika} + E_{12}e^{ika} = 2E_{12}\cos(ka)$$

האנרגיות העצמיות של כל אתר ידועות לנו ולכן אנו מקבלים את המטריצה הבאה:

$$\begin{pmatrix} E_1 & E_{k_{12}} \\ E_{k_{12}}^* & E_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_1 & 2E_{12}\cos(ka) \\ 2E_{12}\cos(ka) & E_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

נמצא את הערכים העצמיים עבור E:

$$\begin{vmatrix} E_1 - E & 2E_{12}\cos(ka) \\ 2E_{12}\cos(ka) & E_2 - E \end{vmatrix} = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow (E_1 - E)(E_2 - E) - 4E_{12}^2\cos^2(ka) = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow E^2 - E(E_1 + E_2) + E_1E_2 - 4E_{12}^2\cos^2(ka) = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow E(k) = \frac{E_1 + E_2}{2} \pm \frac{\sqrt{(E_1 + E_2)^2 - 4E_1E_2 + 16E_{12}^2\cos^2(ka)}}{2}$$

נשים לב שהתקבלו שני פסי אנרגיה, כמספר האטומים בתא היחידה שלנו. הדבר צפוי מכיוון שבשרשרת האטומים הנתונה יש אבחנה בין 2 סוגים שונים של אטומים ומצבים. נמצא את רוחבו של אזור ברילואן. נשים לב שהתלות היחידה בוקטור הגל מצויה בתוך הקוסינוס בריבוע. עבור קוסינוס זה יתקיים:

$$\cos^2(ka) = \frac{1}{2}[1+\cos(2ka)]$$

משמעות הדבר היא שרוחב אזור ברילואן הינו $\Delta k_{\text{Brillouin}} = \frac{2\pi}{2a} = \frac{\pi}{a}$, כלומר שרוחב אזור ברילואן קטן פי 2! הסיבה לכך היא שגודלו של תא היחידה הינו $2a$.

עבור הסעיף הבא נתון ש- $E_2 = 2E_1, E_1 = E_{12}$.

ג. **(10 נק')** - השתמשו בביטוי מסעיף א' ושרטטו את מבנה הפסים המתקבל בתוך אזור ברילואן הראשון. על גבי הגרף סמנו את ערכי האנרגיות השונות עבור מרכז וקצות אזור ברילואן. מהו עובי כל פס? מהו פער האנרגיה של החומר (אם הוא קיים)? נמקו תשובתכם!

נציב את הנתונים ביחס הנפיצה ונקבל:

$$E(k) = \frac{E_1+2E_1}{2} \pm \frac{\sqrt{(E_1+2E_1)^2 - 8E_1^2 + 16E_1^2\cos^2(ka)}}{2} = \frac{3E_1}{2} \pm \frac{\sqrt{E_1^2 + 16E_1^2\cos^2(ka)}}{2}$$

קיבלנו שישנם שני פסי אנרגיה:

$$\begin{cases} E(k) = \frac{3E_1}{2} + \frac{\sqrt{E_1^2 + 16E_1^2\cos^2(ka)}}{2} \\ E(k) = \frac{3E_1}{2} - \frac{\sqrt{E_1^2 + 16E_1^2\cos^2(ka)}}{2} \end{cases}$$

מכיוון שפונקציית הקוסינוס מקבלת ערך מקסימלי במרכז אזור ברילואן ($k=0$) פיצול הפסים שם יהיה מקסימלי שכן ההפרדה בין הפסים היא מקסימלית. ערכה המינימלי של הפונקציה יתקבל בקצה אזור ברילואן ($k = \pm\pi/2a$) כלומר ששם פיצול הפסים יהיה מינימלי.

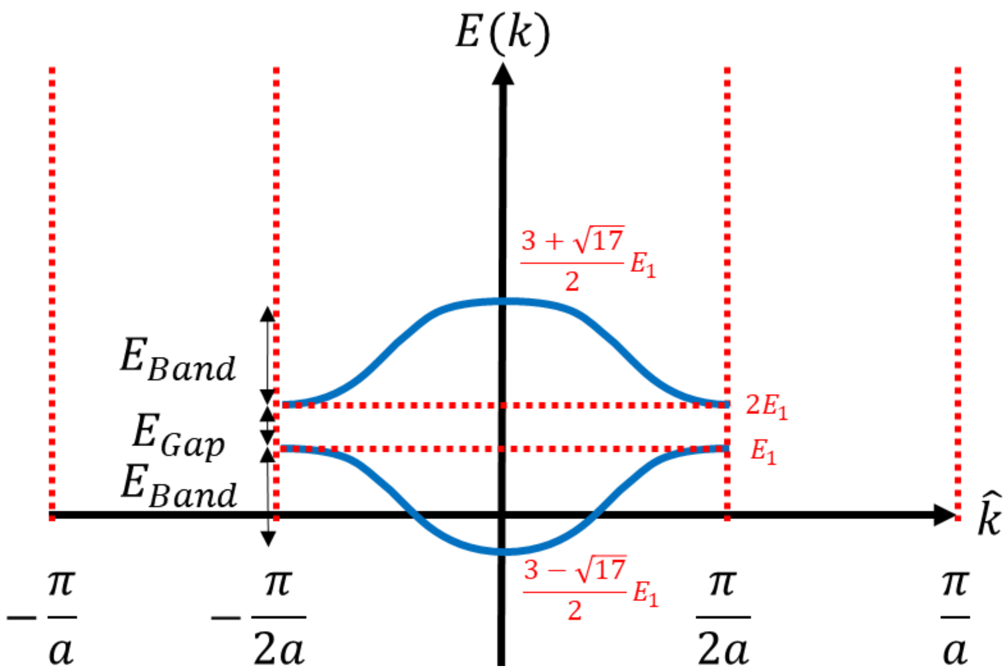
פער האנרגיה יתקבל בנקודה בה הפיצול מינימלי, כלומר היכן שהקוסינוס בריבוע שווה לאפס, כלומר שנקבל בסה"כ:

$$E_{Gap} = \sqrt{E_1^2} = |E_1|$$

ניתן לראות מהביטוי האנליטי למבנה הפסים שעובי כל פס יהיה זהה. עובי הפסים יקבע לפי ערכי האנרגיות עבורן הקוסינוס מתאפס או מקבל ערך מקסימלי של אחד:

$$E_{Band} = \frac{\sqrt{E_1^2+16E_1^2}}{2} - \frac{\sqrt{E_1^2}}{2} = \frac{\sqrt{17}-1}{2}E_1$$

נקבל את המבנה הבא:



עבור הסעיפים הבאים נתון ש- $E_2 = E_1$, כלומר שהאטום הריבועי זהה בכל מובן לאטום העגול.

כמו כן נתון ש- $E_1 = E_{12}$.

ד. **(7 נק')** - השתמשו בביטוי מסעיף א' ושרטטו את מבנה הפסים המתקבל בתוך אזור ברילואן הראשון. על גבי הגרף סמנו את ערכי האנרגיות השונות עבור מרכז וקצות אזור ברילואן. מהו עובי כל פס? מהו פער האנרגיה של החומר (אם הוא קיים)? נמקו תשובתכם!

נציב את הנתונים ביחס הנפיצה ונקבל:

$$E(k)=\frac{E_1+E_1}{2}\pm\frac{\sqrt{(E_1+E_1)^2-4E_1^2+16E_{12}^2\cos^2(ka)}}{2}=E_1\pm\frac{\sqrt{16E_1^2\cos^2(ka)}}{2}==E_1\pm 2E_1\sqrt{\cos^2(ka)}$$

קיבלנו שישנם שני פסי אנרגיה:

$$\begin{cases} E(k)=E_1+2E_1\sqrt{\cos^2(ka)} \\ E(k)=E_1-2E_1\sqrt{\cos^2(ka)} \end{cases}$$

מכיוון שפונקציית הקוסינוס מקבלת ערך מקסימלי במרכז אזור ברילואן ($k=0$) פיצול הפסים שם יהיה מקסימלי שכן ההפרדה בין הפסים היא מקסימלית. ערכה המינימלי של הפונקציה יתקבל בקצה אזור ברילואן ($k=\pm\pi/2a$) כלומר ששם פיצול הפסים יהיה מינימלי.

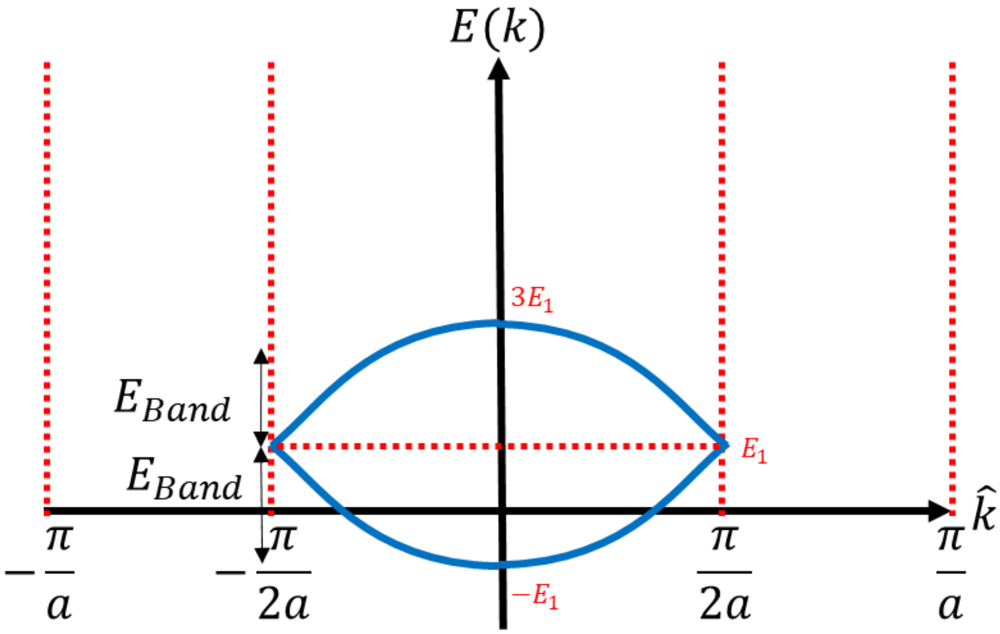
פער האנרגיה (אם הוא קיים) יתקבל בנקודה בה הפיצול מינימלי, כלומר היכן שהקוסינוס בריבוע שווה לאפס, כלומר שנקבל בסה"כ:

$$E_{Gap}=0$$

ניתן לראות מהביטוי האנליטי למבנה הפסים שעובי כל פס יהיה זהה. עובי הפסים יקבע לפי ערכי האנרגיות עבורן הקוסינוס מתאפס או מקבל ערך מקסימלי של אחד:

$$E_{Band}=2E_1$$

נקבל את המבנה הבא:



ה. **(8 נק׳) -** עבור מבנה הפסים מהסעיף הקודם, קבלו ביטוי למהירות החבורה בתוך אזור ברילואן הראשון. לאיזה ערך שווה מהירות זו בקצה האזור? כיצד הדבר מסתדר עם מה שלמדנו בקורס?

הביטוי שקיבלנו עבור מבנה הפסים הינו:

$$\begin{cases} E(k) = E_1 + 2E_1\sqrt{\cos^2(ka)} \\ E(k) = E_1 - 2E_1\sqrt{\cos^2(ka)} \end{cases}$$

נשים לב שהשורש על הקוסינוס בריבוע למעשה מניב ערך מוחלט, כלומר שהביטוי המתקבל הינו:

$$\begin{cases} E(k) = E_1 + 2E_1\left|\cos(ka)\right| \\ E(k) = E_1 - 2E_1\left|\cos(ka)\right| \end{cases}$$

בתוך אזור ברילואן הראשון אין בעיה לבצע גזירה של הפונקציה הנ״ל (ניתן להתעלם מהערך המוחלט). נקבל:

$$v_{group} \triangleq \frac{1}{\hbar}\frac{dE(k)}{dk} = \begin{cases} -\frac{2aE_1}{\hbar}\sin(ka) \\ \frac{2aE_1}{\hbar}\sin(ka) \end{cases}$$

בפרט, בקצה אזור ברילואן נקבל:

$$v_{group} = \begin{cases} -\frac{2aE_1}{\hbar} \\ \frac{2aE_1}{\hbar} \end{cases}$$

שימו לב שקיבלנו ערך שונה מאפס! שרטוט נכון של מבנה הפסים בסעיף הקודם גם היה מראה את התוצאה הנ"ל. נראה שהדבר עומד בסתירה לכך שבקצה אזור ברילואן על מהירות החבורה להתאפס.

אולם נשים לב שבסעיף הקודם ברגע שדרשנו ש- $E_1 = E_2$, למעשה יצרנו מצב בו שני האטומים בתא היחידה שלנו זהים לחלוטין! משמעות הדבר היא שבחרנו תא יחידה גדול מדי! אין צורך בבסיס! התוצאה של בחירה זו (שהיא טכנית חוקית לחלוטין) הינה קיפול של אזור ברילואן. למעשה במצב הנ"ל רוחבו של אזור ברילואן הינו $2\pi / a$ ולא π / a אולם מכיוון שבחרנו מלאכותית תא יחידה עם בסיס, קיבלנו את הקיפול הנ"ל. שימו לב שלמעשה שני הפסים שקיבלנו הם פס אחד ומהירות החבורה שלכאורה לא התאפסה בקצה אזור ברילואן מוכיחה זאת (מדובר בקצה מזוייף ולא בקצה האמיתי!).

שאלה מספר 2 (30 נקודות):

נתונים אלקטרונים בעלי ספין $3/2$ (כלומר ש- $s=\pm\frac{1}{2},\pm\frac{3}{2}$) אשר נמצאים במוצק דו-מימדי. עוד נתון שהאלקטרונים מצייתים ליחס נפיצה (דיספרסיה) פרבולי. צפיפות האלקטרונים הכוללת במוצק הינה n ומסתו של כל אלקטרון היא m כלשהיא.

על מנת לפתור את הסעיפים הבאים, ניעזר בקשר הבא:

$$\int_0^\infty \frac{1}{e^{a(x-b)}+1}dx=\frac{1}{a}\ln(1+e^{a\cdot b})$$

א. **(10 נק')** - חשבו את ערכו של הפוטנציאל הכימי של האלקטרונים כתלות בטמפרטורה.

ראינו בתרגול שצפיפות המצבים המתקבלת מיחס נפיצה פרבולי בדו-מימד היא

$$g_{2D}(E)=\frac{m}{\pi\hbar^2}$$

נזכור שצפיפות זו התקבלה עבור אלקטרונים עם ספין חצי. במקרה שלנו, ישנם 4 מצבי ספין מותרים, כלומר שעלינו להכפיל את צפיפות המצבים שקיבלנו בעבר פי 2 על מנת שהיא תיקח בחשבון 4 מצבי ספין אפשריים ולא שניים. נקבל:

$$g(E)=\frac{2m}{\pi\hbar^2}$$

נשתמש באינטגרל שקיבלנו בתחילת השאלה כאשר עלינו להשתמש בהתפלגות פרמי-דיראק שכן מדובר בפרמיונים:

$$n=\int g(E)f(E)dE=\int_0^\infty \frac{2m}{\pi\hbar^2}\frac{1}{e^{\beta(E-\mu)}+1}dE=\frac{2m}{\pi\hbar^2}\int_0^\infty \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)}+1}dE=\frac{2m}{\pi\hbar^2}\frac{1}{\beta}\ln(1+e^{\beta\mu})$$

נחלץ את הפוטנציאל הכימי מהביטוי שקיבלנו:

$$n=\frac{2m}{\pi\hbar^2}\frac{1}{\beta}\ln(1+e^{\beta\mu})\Rightarrow \ln(1+e^{\beta\mu})=\frac{\pi\hbar^2\beta n}{2m}\Rightarrow 1+e^{\beta\mu}=e^{\frac{\pi\hbar^2\beta n}{2m}}\Rightarrow e^{\beta\mu}=e^{\frac{\pi\hbar^2\beta n}{2m}}-1\Rightarrow \beta\mu=\ln(e^{\frac{\pi\hbar^2\beta n}{2m}}-1)\Rightarrow$$

$$\Rightarrow \mu=\frac{1}{\beta}\ln(e^{\frac{\pi\hbar^2\beta n}{2m}}-1)$$

ב. **(5 נק')** - מצאו את אנרגיית פרמי של האלקטרונים.

רמז: כיצד אנרגיית פרמי קשורה לפוטנציאל הכימי?

ראינו בקורס שהקשר בין הפוטנציאל הכימי לבין אנרגיית פרמי הוא ששני הגדלים הנ"ל שווים בטמפרטורה $T=0$. עלינו להשאיף את הביטוי שקיבלנו בסעיף הקודם לטמפרטורה זו. מכיוון ש- β פרופורציוני ל-1 חלקי הטמפרטורה, עבור טמפרטורות נמוכות נקבל שהאקספוננט בתוך הלוגריתם הטבעי הוא הדומיננטי, כלומר שנקבל:

$$\lim_{T\to 0}\mu(T)\approx\frac{1}{\beta}\ln(e^{\frac{\pi\hbar^2\beta n}{2m}})=\frac{1}{\beta}\frac{\pi\hbar^2\beta n}{2m}=\frac{\pi\hbar^2 n}{2m}=E_{Fermi}$$

ניתן להגיע לפתרון זה גם מחישוב ישיר על מספר המצבים. צפיפות המצבים ליחידת שטח בדו-מימד היא (תרגול 7):

$$G(k)=\frac{k^2}{\pi}$$

לתוצאה זו ניתן להגיע אם היינו מחליפים את האנרגיה בתנע הרדיאלי (דרך יחס הנפיצה). בפרט ידוע לנו שבטמפרטורת האפס המוחלט יתקיים הקשר הבא:

$$G(k_{Fermi})=\frac{k_{Fermi}^2}{\pi}=n$$

כאשר k_f הינו וקטור הגל של פרמי. קשר זה נכון כי אנו מצפים שכל צפיפות המצבים (ליח' שטח) תהיה שווה לצפיפות החלקיקים הנתונה בשאלה. נוכל לקשר בין וקטור הגל של פרמי לבין אנרגיית פרמי דרך יחס הנפיצה:

$$E_{Fermi}=\frac{\hbar^2k_{Fermi}^2}{2m}$$

הצבת קשר זה לתוך הביטוי שקיבלנו למעלה תיתן:

$$\frac{k_{Fermi}^2}{\pi}=\frac{2mE_{Fermi}}{\pi\hbar^2}=n\Rightarrow E_{Fermi}=\frac{\pi\hbar^2n}{2m}$$

ג. **(5 נק') -** מה קורה לפוטנציאל הכימי בגבול של טמפרטורות נמוכות? מהו התנאי לגבול זה? תנו הסבר לתוצאה.
רמז: השתמשו בביטוי שקיבלתם בסעיף הקודם לאנרגיית פרמי בתוך הביטוי לפוטנציאל הכימי.
נכניס את אנרגיית פרמי לתוך הביטוי של הפוטנציאל הכימי:

$$\mu=\frac{1}{\beta}\ln(e^{\frac{\pi\hbar^2\beta n}{2m}}-1)=\frac{1}{\beta}\ln(e^{\beta E_{Fermi}}-1)$$

תחת הצגה זו התנאי הופך לברור: $E_{Fermi}\gg k_BT$. תחת תנאי זה נקבל שהפוטנציאל הכימי משתווה לערכה של אנרגיית פרמי, כלומר שהאנרגיה שצריך להשקיע על מנת להוסיף חלקיק למערכת (ההגדרה של הפוטנציאל הכימי) היא בדיוק רמת פרמי.

ד. **(10 נק') -** מה קורה לפוטנציאל הכימי בגבול של טמפרטורות גבוהות? מה התנאי לגבול זה? כיצד מתנהגים האלקטרונים בגבול זה? נמקו!

בטמפרטורות גבוהות מאוד, כלומר תחת התנאי $E_{Fermi}\ll k_BT$, נצטרך לבצע קירוב לטור טיילור מסדר ראשון עבור האקספוננט:

$$\mu=\frac{1}{\beta}\ln(e^{\beta E_{Fermi}}-1)\approx\frac{1}{\beta}\ln(1+\beta E_{Fermi}-1)=\frac{1}{\beta}\ln(\beta E_{Fermi})=k_BT\ln(\frac{E_{Fermi}}{k_BT})$$

נשים לב לכך שהביטוי בתוך הלוגריתם הטבעי קטן מ-1, כלומר שהפוטנציאל הכימי שלילי! משמעות הדבר היא שהמערכת מסוגלת לקבל לתוכה חלקיקים. האנרגיה התרמית של החלקיקים גדולה הרבה יותר מאנרגיית פרמי. ראינו דוגמאות למצב זה במוליכים למחצה – החלקיקים מתנהגים כחלקיקים קלאסיים (התפלגות מקסוול-בולצמן).

הרחבה למהדרין:

כאשר הטמפרטורה הרבה יותר גבוהה מרמת פרמי אז האלקטרונים מתנהגים כמו גז חלקיקים אידיאלי קלסי. במקרה כזה הפוטנציאל הכימי הוא שלילי כי כאשר אנחנו מוסיפים חלקיק אנחנו מרוויחים אנטרופיה, האנרגיה החופשית יורדת ומכאן שהפוטנציאל הכימי הוא שלילי. במקרה של גז אידיאלי בשני מימדים נקבל:

$$\mu = k_B T \cdot \ln\left(n\lambda^2\right) \quad ; \quad \lambda = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mk_B T}}$$

כאשר הטמפרטורה גבוהה אורך הגל התרמי הרבה יותר קטן מהמרחק בין החלקיקים, כלומר $n\lambda^2 \ll 1$ ונקבל

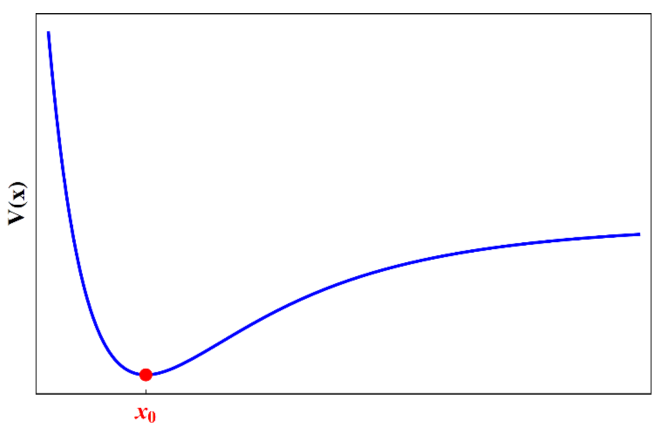
$$\mu = -k_B T \cdot \ln\left(\frac{1}{n\lambda^2}\right) = -k_B T \cdot \ln\left(\frac{2mk_B T}{n\hbar^2}\right)$$

שעד כדי פקטור π התוצאה הזו משחזרת את התוצאה הקודמת שקיבלנו.

<u>שאלה מספר 3 (40 נקודות):</u>

נתונה שרשרת אטומים **חד-ממדית** כך שכל אטום נמצא בפוטנציאל $V(x)$ כפי שמצויר באיור. נקודת המינימום של הפוטנציאל מסומנת ב-x_0 בנוסף נניח ש-$V(x_0) = 0$. ידועים מספר פרמטרים של הפוטנציאל:

$$V(x_0) = 0, \qquad \frac{d^2V(x_0)}{dx^2} \equiv \kappa, \qquad \frac{d^3V(x_0)}{dx^3} = -\kappa_3, \quad \kappa, \kappa_3 > 0$$



מרחק בין האטומים

בשאלה נקבל ביטוי עבור מקדם התפשטות התרמי של שרשרת האטומים (מוצק בחד ממד) המוגדר כ-$\alpha \equiv \frac{1}{x_0}\frac{d\langle x_{atom}\rangle}{dT}$.

הדרכה כללית: עבור כל הסעיפים בהם תתבקשו לחשב מיקום הממוצע הניחו גבולות האינטגרציה $-\infty$ עד ∞

א. **(8 נק׳) -** הסבירו את המשמעות של מקדם התפשטות התרמי בהתבסס על ההגדרה שלו. מהן היחידות של המקדם הנ״ל?

ההגדרה מרמזת לנו שמקדם ההתפשטות התרמית מבטא את השינוי של מיקום הממוצע של אטום כתלות בטמפרטורה. (ביחס למיקום הממוצע שהתקבל בטמפרטורה נתונה כלשהי)

$$[\alpha] = K^{-1}$$

ב. **(8 נק׳) -** כעת נניח שהאטומים יכולים להחליף חום בינהם ועם הסביבה (אמבט חום חיצוני). כתבו את הביטוי **<u>הכללי</u>** לפונקציית החלוקה עבור אטום בודד בשרשרת וכן כתבו ביטוי עבור המיקום הממוצע של האטום הנ״ל.

מדובר בצבר קנוני של חלקיקים לכן ביטוי עבור פונקציה חלוקה (בדומה לתרגול 4) הינו

$$Z = = \underbrace{\int e^{-\beta p^2/2m} dp}_{\sqrt{2m\pi/k_bT}} \int e^{-\beta V(x)} dx$$

כמובן שלא ניתן להעריך עדיין מהו גודל של החלק המרחבי (לא חובה לחשב את החלק של תנע, הוא גם ככה יצטמצם בביטוי עבור מיקום הממוצע)
ביטוי עבור המיקום הממוצע של החלקיק הינו

$$\langle x \rangle = \frac{\int e^{-\beta p^2/2m} dp \int x e^{-\beta V(x)} dx}{Z} = \frac{\int x e^{-\beta V(x)} dx}{\int e^{-\beta V(x)} dx}$$

ג. **(8 נק׳) -** כתבו את קירוב טיילור לפוטנציאל $V(x)$ עד **<u>לסדר שלישי</u>** מסביב לנקודת המינימום x_0. הסבירו את המשמעות של כל אחד ממקדמי הפולינום וכתבו את היחידות שלהם. מהו הגודל של האיבר מהסדר ראשון? נמקו!

נעזר בסימונים שנתנו בהגדרת השאלה

$$V(x) \approx \underbrace{V(x_0)}_{0} + \underbrace{\left.\frac{dV(x)}{dx}\right|_{x=x_0}}_{0} (x-x_0) + \frac{1}{2!}\underbrace{\left.\frac{d^2V(x)}{dx^2}\right|_{x=x_0}}_{\kappa} (x-x_0)^2 + \frac{1}{3!}\underbrace{\left.\frac{d^3V(x)}{dx^3}\right|_{x=x_0}}_{-\kappa_3} (x-x_0)^3$$

$$V(x) = \frac{\kappa}{2}(x-x_0)^2 - \frac{\kappa_3}{6}(x-x_0)^3$$

סדר אפס- ערך של אנרגיה פוטנציאלית בנקודת מינימום (יחידות : אנרגיה)

סדר ראשון – מתאפס בנקודת המינימום בהגדרה, משמעות היא כוח שפועל על החלקיק בשיווי משקל (יחידות : אנרגיה למרחק, ניוטון)

סדר שני – קירוב של פוטנציאל למתנד הרמוני, מקדמם מסמן גודל של קבוע קפיץ (יחידות : כוח למרחק, ניוטון למטר)

סדר שלישי – סטייה של פוטנציאל מצורה הרמונית (יחידות : כוח למרחק בריבוע, ניוטון למטר בריבוע)

ד. **(8 נק׳) -** בסעיף זה בלבד, קחו את הקירוב עד לסדר שני וחשבו מהו **המיקום הממוצע** של האטום **ומקדם התפשטות התרמי**. הסבירו למה קירוב לסדר שני אינו מספיק בשביל לקבל את התפשטות התרמית של האטומים.

למעשה לא צריכים לחשב את האינטגרל, כי עבור קירוב מסדר שני ההתפלגות נתונה על ידי התפלגות גאוסית עם מיקום הממוצע של x_0. הסבר פיסיקאלי יותר הוא שעבור סדר שני אנו תארנו את תנועת האטום כמתנד הרמוני שמתנדנד בסיס נקודת שיווי משקל x_0

מקדם התפשטות התרמי הינו

$$\alpha = \frac{1}{x_0}\frac{dx_0}{dT} = 0$$

בעזרת קירוב לסדר שני לא הצלחנו לקבל ביטוי לא טריוויאלי עבור מקדם התפשטות תרמי, הסיבה לך היא שמתנד הרמוני עם עליית הטמפרטורה רק משנה את אמפליטודת התנודה אך המיקום ממוצע נשאר ללא שינוי (מכיוון שפוטנציאל סימטרי ביחס לנקודת המינימום).

בקירוב לסדר שני נקבל $V(x) = \frac{\kappa}{2}(x-x_0)^2$ לפיכך נקבל מיקום הממוצע

$$\langle x_0 \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\beta V(x)} dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta V(x)} dx} \approx \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\beta\kappa(x-x_0)^2/2} dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\kappa(x-x_0)^2/2} dx} = x_0$$

$$(1)\ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\kappa(x-x_0)^2/2} dx = \sqrt{\frac{2\pi}{\kappa\beta}}$$

$$(2)\ \int_{-\infty}^{\infty} x e^{-\beta\kappa(x-x_0)^2/2} dx = \sqrt{\frac{2}{\kappa\beta}} \int_{-\infty}^{\infty} \left(y\sqrt{\frac{2}{\beta\kappa}} + x_0 \right) e^{-y^2} dy = \sqrt{\frac{2}{\beta\kappa}} x_0$$

$$y \equiv \sqrt{\beta\kappa/2}(x-x_0) \to x = y\sqrt{\frac{2}{\beta\kappa}} + x_0 \to dx = \sqrt{\frac{2}{\beta\kappa}} dy$$

ה. **(8 נק')** - כעת ניקח את הקירוב של הפוטנציאל עד לסדר שלישי בטור טיילור. בשביל להקל על החישובים נשתמש בקירוב הבא:

$$e^{f(x)} \approx e^{f(x_0) + \frac{df(x_0)}{dx}(x-x_0) + \frac{d^2 f(x_0)}{2!\,dx^2}(x-x_0)^2} \times \left(1 + \frac{d^3 f(x_0)}{3!\,dx^3}(x-x_0)^3 \right)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-x^2} dx = 3\sqrt{\pi}/4$$

היעזרו בקירוב ובאינטגרל הנתון וחשבו את **המיקום הממוצע** של האטום ואת **מקדם ההתפשטות התרמי.**

נשתמש בקירוב שהציעו לנו ונקבל

$$e^{-\beta V(x)} \approx e^{-\beta\kappa(x-x_0)^2/2} \left(1 + \frac{\beta\kappa_3}{6}(x-x_0)^3 \right)$$

חישוב מחנה (באדום מסומנים דברים שחושבו בסעיף הקודם)

$$(1)\ \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\kappa(x-x_0)^2/2} dx + \underbrace{\frac{\beta\kappa_3}{6}\int_{-\infty}^{\infty} (x-x_0)^3 e^{-\beta\kappa(x-x_0)^2/2} dx}_{odd\ function=0} = \sqrt{\frac{2\pi}{\beta\kappa}}$$

חישוב חלק של מונה

$$(2)\int_{-\infty}^{\infty} xe^{-\beta\kappa(x-x_0)^2/2}dx=\sqrt{\frac{2\pi}{\beta\kappa}}x_0$$

$$(3)\int_{-\infty}^{\infty} x(x-x_0)^3e^{-\beta\kappa(x-x_0)^2/2}dx$$

$$=\left(\sqrt{\frac{2}{\beta\kappa}}\right)^5\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} y^4e^{-y^2}dx}_{3\sqrt{\pi}/4}+x_0\left(\sqrt{\frac{2}{\beta\kappa}}\right)^4\underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} y^3e^{-y^2}dx}_{0}$$

$$=\frac{3\sqrt{\pi}}{4}\left(\sqrt{\frac{2}{\beta\kappa}}\right)^5$$

$$y\equiv\sqrt{\beta\kappa/2}(x-x_0)\to x=y\sqrt{\frac{2}{\beta\kappa}}+x_0\to dx=\sqrt{\frac{2}{\beta\kappa}}dy$$

$$\langle x\rangle=\frac{\int_{-\infty}^{\infty} xe^{-\beta\kappa(x-x_0)^2/2}\left(1+\frac{\beta\kappa_3}{6}(x-x_0)^3\right)dx}{\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta\kappa(x-x_0)^2/2}\left(1+\frac{\beta\kappa_3}{6}(x-x_0)^3\right)dx}=x_0+\frac{\beta\kappa_3}{6}\frac{\frac{3\sqrt{\pi}}{4}\left(\sqrt{\frac{2}{\beta\kappa}}\right)^5}{\sqrt{\frac{2\pi}{\beta\kappa}}}$$

$$\langle x\rangle=x_0+\frac{\kappa_3}{2\kappa^2}\times k_bT$$

חישוב של מקדם התפשטות טרמי

$$\alpha=\frac{\kappa_3}{2\kappa^2}\times k_b$$

ו. **(10 נק') - סעיף בונוס:** הסבירו את הקירוב בו השתמשנו בסעיף ה'. כתבו מהו תנאי עבור טמפרטורה כך שהקירוב יהיה תקף, הביטו את התשובה בעזרת k_b,κ,κ_3 **בלבד**. **רמז**: השתמשו במשפט החלוקה השווה בשביל להעריך את גודל של $(x-x_0)$.

נשים לב שבקירוב שביצענו הסתמכנו על זה שאיבר הריבועי הרבה יותר גדול מהאיבר בחזקת שלוש (כי את האיבר הריבוע נשאר באקספוננט ואת שלישי פיתחנו לטור טיילור). לכן מתקיים

$$\frac{\kappa}{2}(x-x_0)^2\gg\frac{\kappa_3}{6}(x-x_0)^3$$
$$\frac{3\kappa}{\kappa_3}\gg|x-x_0|$$

כעת נרצה להיפתר מ-$x-x_0$ מכיוון שבקירוב שני האנרגיה הינה

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{\kappa|x - x_0|^2}{2}$$

ניתן להשתמש במשפט החלוקה השווה ולהקצות לחלק של פוטנציאל $\frac{1}{2}k_bT$

לפיכך נקבל ש- $\frac{k_bT}{\kappa} \approx |x - x_0|^2$

לבסוף נקבל ש-

$$\frac{3\kappa}{\kappa_3} \gg |x - x_0| = \sqrt{\frac{k_bT}{\kappa}}$$

$$\frac{9\kappa^3}{\kappa_3^2} \gg k_bT$$

<u>טבלת נוסחאות שימושיות:</u>

<u>גדלים פיזיקליים שימושיים:</u>

$$m_e = 9.1 \cdot 10^{-31}[kg]$$

$$k_B = 1.38 \cdot 10^{-23}[J/K]$$

$$h = 6.626 \cdot 10^{-34}[J \cdot s]$$

<u>זהויות וקטוריות שימושיות:</u>

$$a \cdot b \triangleq |a||b|\cos(\theta_{ab}) = \sum_i a_i b_i$$

$$x \times y = \hat{z}$$

$$y \times \hat{z} = x$$

$$\hat{z} \times x = y$$

<u>זהויות אלגבריות/טריגונומטריות שימושיות:</u>

$$\cos(a)\cos(b) = \frac{1}{2}[\cos(a+b) + \cos(a-b)]$$

$$\sin(a)\sin(b) = \frac{1}{2}[\cos(a-b) - \cos(a+b)]$$

$$\sin(a)\cos(b) = \frac{1}{2}[\sin(a+b) + \sin(a-b)]$$

$$\sin(2a) = 2\sin(a)\cos(a)$$

$$\cos(2a) = \cos^2(a) - \sin^2(a)$$

$$\sin^2(a) = \frac{1}{2}[1 - \cos(2a)]$$

$$\cos^2(a) = \frac{1}{2}[1 + \cos(2a)]$$

$$\sin(\pi - a) = \sin(a)$$

$$\cos(\pi - a) = -\cos(a)$$

$$\sin(\frac{\pi}{2} - a) = \cos(a)$$

$$\cos(\frac{\pi}{2} - a) = \sin(a)$$

$$\sin(-a) = -\sin(a)$$

$$\cos(-a) = \cos(a)$$

$$\cos(a) = \frac{1}{2}[e^{ia} + e^{-ia}]$$

$$\sin(a) = \frac{1}{2i}[e^{ia} - e^{-ia}]$$

$$\cosh(a) = \frac{1}{2}[e^{a} + e^{-a}]$$

$$\sinh(a) = \frac{1}{2}[e^{a} - e^{-a}]$$

$$|x| = \sqrt{x^2}$$

<u>חישובי דטרמיננטות 2 על 2 ו-3 על 3:</u>

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} = ad - bc$$

$$\begin{vmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{vmatrix} = a(ei - fh) - b(di - fg) + c(dh - eg)$$

אינטגרלים שימושיים:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-a(x+b)^2}dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

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

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

$$I(n) \equiv \int_0^{\infty} x^n e^{-\alpha x^2}dx = \frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)\alpha^{-\frac{n+1}{2}} \quad \alpha > 0 \; and \; n \geq 0$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x^n e^{-\alpha x^2}dx = \begin{cases} \Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)\alpha^{-\frac{n+1}{2}} & n \in Even \\ 0 & n \in Odd \end{cases}$$

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