אלקטרוניקה פיסיקאלית 044124
סמסטר אביב 2022
מועד א

הנחיות

- **משך הבחינה – שלוש שעות**
- **במבחן ישנן 2 שאלות פתוחות ו-5 שאלות רב-ברירה**
- **בדקו שברשותכם x עמודים**
- **ניתן להשתמש במחשבון ו- 6 דפי נוסחאות דו-צדדיים**

בהצלחה!

שאלה 1 (6 נקודות):

יעל בוגרת אלקטרוניקה פיסיקאלית ניגשה לבעיה הבאה. נתון אלקטרון בגביש חד-ממדי הנע תחת השפעה של השדה חשמלי קבוע - $\mathcal{E}_0\hat{x}$. הגביש מכיל פס אנרגיה בודד מהצורה

$$E(k) = E_0[\cos(ak) + \cos(2ak)]$$

קבוע השריג הינו a ומסת האלקטרון בריק הינה m_0.

נניח שבזמן $t_0 = 0$ האלקטרון נמצא ב- $k_0 = 0$ במרחב ההופכי וב- $x_0 = 0$ במרחב הישיר. איפה יהיה האלקטרון בזמן $t_f = \frac{2\pi\hbar}{ae\mathcal{E}_0}$ ומה תהיה מהירותו בנקודה הזאת?

א. $x_f = -\frac{1}{\mathcal{E}_0 m_0}\left(\frac{2\pi\hbar}{ae}\right)^2, v_f = -\frac{2\pi\hbar}{ae}\frac{1}{m_0}$

ב. $x_f = -\frac{1}{\mathcal{E}_0 m_0}\left(\frac{\pi\hbar}{ae}\right)^2, v_f = -\frac{\pi\hbar}{ae}\frac{1}{m_0}$

ג. $x_f = -\frac{2}{\mathcal{E}_0 m_0}\left(\frac{\pi\hbar}{ae}\right)^2, v_f = -\frac{\pi\hbar}{2ae}\frac{1}{m_0}$

ד. $x_f = 0, v_f = 0$

ה. $x_f = \frac{2\pi}{a}, v_f = -\frac{2E_0}{\hbar}$

פתרון

תשובה: ד

ניעזר במשוואה הסמי-קלאסית המתארת את תנועת האלקטרון תחת ההשפעה של הכוח החיצוני

$$\hbar\frac{dk(t)}{dt} = F = -e\mathcal{E}_0$$

$$k(t) = k(0) - \frac{e}{\hbar}\mathcal{E}_0 t = -\frac{e}{\hbar}\mathcal{E}_0 t \equiv -\omega_0 t$$

$$v_g(t) = \frac{1}{\hbar}\frac{dE(t)}{dk} = a\frac{E_0}{\hbar}(\sin(\omega_0 at) + \sin(2\omega_0 at))$$

$$x(t) = x(0) - \frac{E_0}{\omega_0\hbar}(\cos(\omega_0 at) + \cos(2\omega_0 at))$$

כעת נחשב את מיקומו ומהירותו של האלקטרון בזמן הנתון

$$v_g(t_f) = a\frac{E_0}{\hbar}\left(\sin\left(\omega_0 a \times \frac{2\pi}{a\omega_0}\right) + \sin\left(2\omega_0 a \times \frac{2\pi}{a\omega_0}\right)\right) = 0$$

$$x(t_f) = 0$$

שאלה 2 (6 נקודות):

סטודנטים בקורס אלקטרוניקה פיסיקאלית מנסים להעריך את התדר המקסימאלי של האופן האקוסטי של מתכת חד ממדית (ללא בסיס) בעלת מהירות קול של $v_s = 2260m/sec$, מסה אטומית של $29amu$ ומרחק בין אטומים של 3.61Å. מהו הערך של התדר הזוויתי המקסימאלי של האופן?

א. $\omega_{max} = 12.5 \times 10^{12} rad/sec$

ב. $\omega_{max} = 21.5 \times 10^{16} rad/sec$

ג. $\omega_{max} = 1.25 \times 10^{6} rad/sec$

ד. $\omega_{max} = 51.2 \times 10^{9} rad/sec$

ה. $\omega_{max} = 22.5 \times 10^{13} rad/sec$

פתרון

תשובה: א

כזכור מיחס הנפיצה של האופן האקוסטי התדר המקסימאלי הינו

$$\omega_{max} = 2\sqrt{\kappa/m}$$

מצד שני מהירות הקול נתונה ע"י

$$v_s = a\sqrt{\kappa/m}$$

$$\omega_{max} = 2v_s/a = \frac{2 \times 2260m/sec}{0.361 \times 10^{-9}m} = 12.5 \times 10^{12} rad/sec$$

<u>שאלה 3 (6 נקודות):</u>

נתון מוצק חד ממדי בעל שני פסי אנרגיה מהצורה

$$E_A(k) = -2t_A \cos(ka)\,, t_A > 0$$

$$E_B(k) = -t_B \cos(ka)\,, t_B > 0$$

$$t_A > t_B$$

נתון שכל תא יחידה במוצק תורם שני אלקטרונים. מהו התנאי שהמוצק יהיה מבודד ב- $T = 0$

א. $t_A - 2t_B > 0$

ב. $t_A - t_B < 0$

ג. $2t_A + t_B < 0$

ד. מוצק תמיד מבודד

ה. המוצק תמיד מוליך

פתרון

תשובה: ה

תמיד תהיה חפיפה בין שני הפסים ולכן החומר תמיד יהיה מוליך

שאלה 4 (6 נקודות):

נתון גז המורכב מ N פרמיונים חופשיים (יחס דיספרסיה פרבולי) ללא אינטראקציה ביניהם. כל פרמיון הוא בעל מסה m וספין 3/2. הפרמיונים נמצאים בקופסא דו-מימדית ששטחה A ($A = L \times L$).

מהו הפוטנציאל הכימי μ בטמפרטורה השואפת לאפס קלווין? (n הוא צפיפות האלקטרונים $n = \frac{N}{A}$).

א. $\mu = 0$

ב. $\mu = \frac{n\pi\hbar^2}{2m}$

ג. $\mu = k_B T$

ד. $\mu = \frac{2}{3}\frac{m}{\pi\hbar^2 n}$

ה. $\mu = \frac{n\pi\hbar^2}{m}$

פתרון:

צפיפות המצבים במקרה זה היא:

$$G = 4 \cdot \frac{1}{L^2} \cdot \frac{1}{4} \cdot \frac{\pi k^2}{\left(\frac{\pi}{L}\right)^2} = \frac{k^2}{\pi}$$

נתון שהפרמיונים חופשיים ובעלי מסה m ולכן יחס הנפיצה שלהם הוא פרבולי:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \to k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

$$g(\varepsilon) = \frac{dG(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \frac{dG(k)}{dk}\frac{dk}{d\varepsilon} = \frac{2k}{\pi}\frac{m}{\hbar^2 k} = \frac{2m}{\pi\hbar^2}$$

או:

$$G(E) = \frac{2mE}{\hbar^2\pi} \to g(\varepsilon) = \frac{dG}{d\varepsilon} = \frac{2m}{\hbar^2\pi}$$

בטמפרטורה אפס μ זהה ל אנרגית פרמי לכן

$$n = \frac{N}{A} = \frac{2m}{\pi\hbar^2}\int_0^{\mu} d\varepsilon = \frac{2m\mu}{\pi\hbar^2}$$

$$\mu = \frac{n\pi\hbar^2}{2m}$$

שאלה 5 (6 נקודות):

נתונות שתי מערכות מצומדות תרמית לאמבטי חום שונים בטמפרטורות $T_1^0 = T \gg 0$ ו $T_2^0 = 2T \gg 0$ ומבודדות אחת מהשניה בהתחלה:

מערכת I: גז אידאלי דו-מימדי המורכב מ $N_1 = N \gg 1$ חלקיקים חופשיים עם המילטוניאן שנתון ע״י הביטוי הבא:

$$E_1 = \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{P}^2}{2m}$$

מערכת II: מכילה $N_2 = 2.5N \gg 1$ אוסצילטורים הרמונים קלאסיים דו-מימדיים עם המילטוניאן שנתון ע״י הביטוי הבא:

$$E_2 = \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{P}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \vec{r}^2$$

כעת מנתקים את שתי המערכות מאמבטי החום שלהן ולאחר מכן מצמדים לאמבט נוסף בטמפרטורה $T_3^0 = 1.5T \gg 0$. מה יהיה הפרש האנרגיות בין המצב הסופי למצב ההתחלתי של שתי המערכות.

א. $-2Nk_BT$

ב. $-4Nk_BT$

ג. $-2.5Nk_BT$

ד. $-Nk_BT$

ה. 0

פתרון:

נשתמש במשפט החלוקה השווה ושימור אנרגיה:

לפני ההצמדה האנרגיה הכוללת של f מערכת היא:

מערכת (1): דרגת חופש ריבועית אחת בכל מימד, יש 2 מימדים: $E_1 = 2 \cdot \frac{1}{2} N_1 k_B T_1^0 = N_1 k_B T_1^0$

מערכת (2): שתי דרגות חופש ריבועית אחת בכל מימד, יש 2 מימדים: $E_2 = 4 \cdot \frac{1}{2} N_2 k_B T_2^0 = 2N_2 k_B T_2^0$

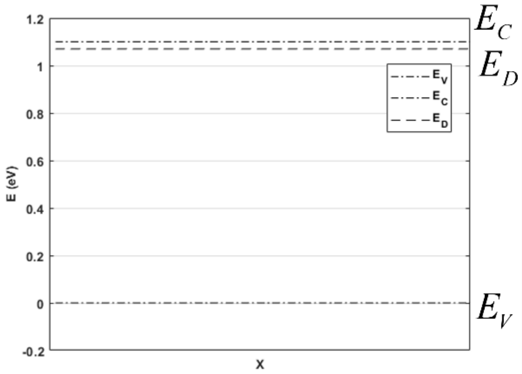
אחרי הצימוד: $E_{f\,total} = (N_1 + 2N_2) k_B T_3^0$

$$E_{final} - E_{initial}$$
$$= (N_1 + 2N_2) k_B T_3^0 - N_1 k_B T_1^0 - 2N_2 k_B T_2^0$$
$$= (N + 2 \cdot 2.5N) k_B \cdot 1.5T - Nk_BT - 2 \cdot 2.5N \cdot k_B \cdot 2T$$
$$9Nk_BT - Nk_BT - 10Nk_BT = -2Nk_{BT}$$

שאלות פתוחות

שאלה 6 (35 נקודות):

נתונה פיסה דו-מימדית של מוליך למחצה עם פער אנרגיה ישיר של E_g=1.1eV. יחס הדיספרסיה של החורים ושל האלקטרונים הוא פרבולי עם מסה אפקטיבית זהה וכמו של אלקטרון חופשי ($E = \pm\frac{\hbar^2k^2}{2m_0}$).
מסממים את המל״מ בתורמים בריכוז של $N_D = 10^{12}\ cm^{-2}$ עם רמת אנרגיה של $E_D = E_g - \Delta$ כאשר $\Delta = 30\ meV$. הניחו כי פס הערכיות של המל״מ נמצא באנרגיה אפס (ראו ציור מצורף).



התורם יכול להיות מאוכלס עם אלקטרון אחד עם ספין UP או עם אלקטרון אחד עם ספין DOWN או ללא אף אלקטרון. בלתי אפשרי לשני אלקטרונים להיות בו-זמנית על האטום התורם.

למצב שבו יש אלקטרון יחיד על התורם אנו קוראים מצב לא מיונן (ניטרלי חשמלית). למצב שבו אין אף אלקטרון על התורם אנו קוראים מצב מיונן (חיובי חשמלית).

מטרת השאלה הינה למצוא את כמות נושאי המטען במל״מ כפונקציה של הטמפרטורה. לשם כך, נחשב שלב אחר שלב את הגדלים הרלוונטים לשם מציאת התשובה ששאלנו. הניחו תחילה שהפוטנציאל הכימי (μ) של המל״מ ידוע. במרוצת הסעיפים נמצא משוואה שמחלצת אותו.

א. (7 נקי) מהי צפיפות המצבים ליחידת אנרגיה ליחידת שטח של האלקטרונים והחורים במל״מ הדו-מימדי?

פיתרון: המל״מ הוא דו-מימדי עם יחס דיספרסיה פרבולי. המסה האפקטיבית היא כשל אלקטרון חופשי והיא זהה לאלקטרונים ולחורים. לכן צפיפות המצבים תהיה זהה עבור אלקטרונים וחורים ונתונה ע״י הביטוי הבא:

$$\nu_0 = \frac{m}{\pi\hbar^2}$$

ב. (7 נקי) חשבו את ריכוז האלקטרונים והחורים בפס ההולכה והערכיות במל״מ כפונקציה של T בהנחה שהפוטנציאל הכימי (μ) ידוע. רמז: רשמו עבור אלקטרונים וחורים את הסיכוי לאכלס רמת אנרגיה כלשהי. לאחר מכן השתמשו באינפורמציה שהסיכוי לאכלס מצב אנרגטי כלשהו בפס ההולכה או הערכיות הוא נמוך מאד ביחס לאחד (הפוטנציאל הכימי נמצא בתוך פער האנרגיה). רשמו מה התנאי הזה אומר מבחינה אנרגטית? לאחר קבלת הביטוי המתאים (של הסיכוי לאכלוס) בצעו אינטגרציה על האנרגיה בגבולות האנרגיה המתאימים. אתם צריכים לקבל אינטגרלים פשוטים שאין כל בעיה לבצעם. בכדי לא להיגרר עם קבועים רבים ניתן להשתמש ב ν_0 עבור צפיפות המצבים.

הסיכוי לאכלס אלקטרון בפס ההולכה ברמה כלשהי נתון ע״י:

$$f_{FD}(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}$$

אם הסיכוי לאכלס קטן מאד מאחד, מיד ברור כי $\beta(\varepsilon-\mu) \gg 1$ ונקבל כי פרמי דיראק נהפכת למקסוול-בולצמן :

$$f_{MB}(\varepsilon) = e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}$$

הסיכוי לאכלס חור בפס הערכיות הינו :

$$f_{FD}^{p}(\varepsilon) = 1 - f_{FD}(\varepsilon) = 1 - \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} = \frac{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} = \frac{1}{e^{\beta(\mu-\varepsilon)}+1}$$

אם הסיכוי לאכלס קטן מאד מאחד, מיד ברור כי $\beta(\mu-\varepsilon) \gg 1$ ונקבל כי פרמי דיראק נהפכת למקסוול-בולצמן :

$$f_{MB}^{p}(\varepsilon) = e^{-\beta(\mu-\varepsilon)}$$

עתה אפשר לחשב את ריכוז האלקטרונים (n) והחורים (p) :

האנרגיות בבעיה הוגדרו כך שהקצה העליון של פס הערכיות נמצא באנרגיה אפס, ותחתית פס ההולכה באנרגיה E_g. לכן נקבל עבור אלקטרונים :

$$n = \int_{E_g}^{\infty} \nu_0 e^{\beta(\mu-\varepsilon)} d\varepsilon = \nu_0 k_B T e^{-\beta E_g} e^{\beta\mu}$$

$$p = \int_{\infty}^{0} \nu_0 e^{\beta(\varepsilon-\mu)} d\varepsilon = \nu_0 k_B T e^{-\beta\mu}$$

ג. (7 נקי) מהו ריכוז התורמים שאינם מיוננים (תורמים שלא תרמו את האלקטרון הנוסף שלהם)? רמז : הניחו שהפוטנציאל הכימי (μ) ידוע והתייחסו לבעיה של רמת אנרגיה מנוונת אחת המצומדת לאמבט תרמי ולאמבט חלקיקים. מצאו את הביטוי כפונקציה של הטמפרטורה (T), רמת האנרגיה של התורם (E_D) ו μ.

פיתרון : נחשב את הריכוז באמצעות הצבר הגרנד-קנוני. מכיוון שאין אינטראקציה בין המפזרים ניתן לחשב עבור רמה בודדת ולכפול בריכוז התורמים. פונקציית החלוקה תהיה :

$$Z(T,\mu) = \sum_{N=0}^{1} e^{\beta\mu N - \beta E_D N} = 1 + 2e^{\beta(\mu-E_D)}$$

כאשר הפקטור 2 נובע בגלל הניוון של התורם. ריכוז התורמים הממוצע שיהיו לא מיוננים (האלקטרון נמצא על התורם) יהיה נתון ע״י הביטוי הבא :

$$N_D(neutral) = N_D \frac{0\cdot 1 + 1\cdot 2e^{\beta(\mu-E_D)}}{Z(T,\mu)} = N_D \frac{1\cdot 2e^{\beta(\mu-E_D)}}{1+1\cdot 2e^{\beta(\mu-E_D)}} = N_D \frac{1}{1+\frac{1}{2}e^{-\beta(\mu-E_D)}}$$

ד. (7 נקי) רשמו משוואה שבאמצעותה ניתן יהיה לחלץ את הפוטנציאל הכימי. רמז : השתמשו במשוואת הניטרליות החשמלית של סך כל המטענים בבעיה (מטען (אלקטרונים) + מטען (חורים) + מטען (**תורמים מיוננים**) = 0).

פיתרון : המטען של האלקטרונים – שלילי. המטען של החורים – חיובי. המטען של התורמים המיוננים – חיובי. ראשית נמצא ביטוי לריכוז התורמים המיוננים. מקודם חישבנו את ריכוז התורמים שאינם מיוננים, ולכן ריכוז התורמים המיוננים (N^+_D) נתון ע״י :

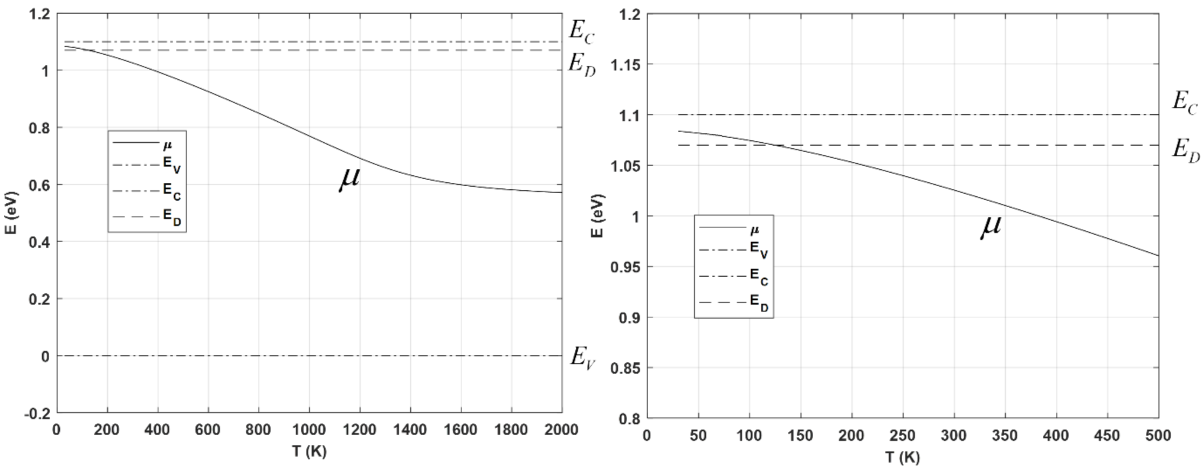
$$N_D^+ = N_D - N_D(neutral) = N_D - N_D\frac{1}{1+\frac{1}{2}e^{-\beta(\mu-E_D)}} = N_D\frac{\frac{1}{2}e^{-\beta(\mu-E_D)}}{1+\frac{1}{2}e^{-\beta(\mu-E_D)}} = N_D\frac{1}{2e^{\beta(\mu-E_D)}+1}$$

עתה אפשר לרשום את משוואת הנייטרליות :

$$N_D^+ + p = n$$
$$N_D\frac{1}{2e^{\beta(\mu-E_D)}+1} + \nu_0 k_B T e^{-\beta\mu} = \nu_0 k_B T e^{\beta\mu} e^{-\beta E_g}$$

זוהי משוואה עבור המשתנה μ. אחרי שמקבלים אותו אפשר לחשב את כל שאר הריכוזים בבעיה.

ה. (7 נקי) הפיתרון של μ כפונקציה של T נתון ע״י הגרפים הבאים (הגרף הימני הוא זום של הגרף השמאלי) :



בהינתן הגרפים האלו, ציירו את הסיכוי לתורם להיות מיונן כפונקציה של T בטווח שבין 50 ל 2000 קלווין. רמז : בחרו 4 טמפרטורות שונות (בטווח המדובר בצורה נבונה (אפשר לקחת יותר נקודות על מנת להיות בטוחים בציור)), העריכו את μ (לא חייב להיות מדוייק לחלוטין) וחשבו את הסיכוי להיות מיונן על פי הנוסחא שכבר חישבתם קודם לכן. הסבירו את התוצאות שקיבלתם מטמפרטורות נמוכות מאד עד 2000 קלווין.

עבור טמפרטורות מאד גבוהות $(k_B T \gg E_g)$ חשבו את הסיכוי לתורם להיות מיונן (על סמך אותה נוסחא שחישבתם קודם לכן). הסבירו את התוצאות שקיבלתם.

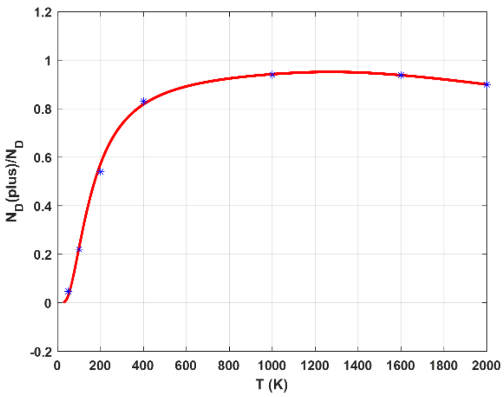
פיתרון : הסיכוי לתורם להיות מיונן נתון ע״י הביטוי הבא :

$$\frac{N_D^+}{N_D} = \frac{1}{2e^{\beta(\mu-E_D)}+1}$$

לכן נעשה טבלה על פי הגרפים המצורפים :

T	μ	N_D^+/N_D
50	1.08	0.047
100	1.075	0.22
200	1.055	0.54
400	0.99	0.83
1000	0.77	0.94
1600	0.6	0.938
2000	0.57	0.9

ונצייר (הגרף האדום הוא פיתרון מדוייק והכוכביות הכחולות הן על פי הטבלה לעיל) :



בטמפרטורות נמוכות, אין מספיק אנרגיה תרמית על מנת ליינן את האלקטרון מהתורם ולכן הסיכוי להיות מיונן שואף לאפס.

ככל שהטמפרטורות עולות הסיכוי של אלקטרון לעזוב את האטום התורם ולעבור לפס ההולכה גדל משום שיש יותר אנרגיה תרמית הזמינה לעירור. מכיוון שההפרש האנרגטי בין פס ההולכה לאנרגית התורם היא 30meV השקולה בערך ל 300 קלווין נצפה לעליה משמעותית בטווח הטמפרטורות הזה.

כאשר הטמפרטורה עולה עד 2000 קלווין הסיכוי ליינון הוא גבוה ולא משתנה הרבה מכיוון שיש מספיק אנרגיה תרמית לעירור התורם אבל לא מספיק בכדי לעורר נושאי מטען מפס הערכיות לפס ההולכה או לתורם עצמו.

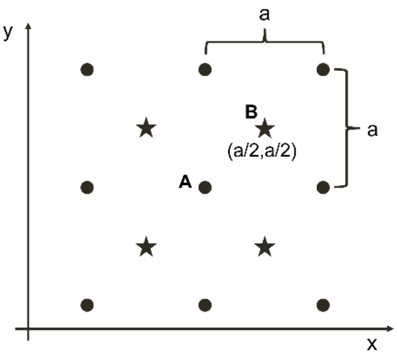
בגבול של טמפרטורות גבוהות $(k_B T \gg E_g)$, רואים כי הפוטנציאל הכימי שואף לאמצע הפס. במקרה כזה יש עירורי אלקטרון – חור בין פס ההולכה ופס הערכיות ורואים כי הסיכוי להיות מיונן (על פי הנוסחא) שואף ל :

$$\frac{N_D^+}{N_D} = \frac{1}{2e^{\beta(\mu-E_D)}+1} \to \frac{1}{2\cdot 1+1} = \frac{1}{3}$$

מכיוון שהאנרגיה התרמית מאד גבוהה יש 3 אפשרויות לאכלוס האטום התורם : או לאכלס את האטום ברמה 1 עם ספין UP. או לאכלס את האטום ברמה 1 עם ספין DOWN. או לא לאכלס בכלל את הרמה. ומכיוון שהטמפרטורה מספיק גבוהה, הסיכויים לכל מצב זהים ולכן הסיכוי להיות מיונן יהיה 1 חלקי שלוש, כלומר 1/3.

שאלה 7 (36 נקודות) :

נתון שריג ריבועי דו-מימדי עם מרחק שריג a ובסיס כמצוייר באיור המצורף. אטומי A (עיגול) הינם בעלי אורביטל $|\varphi_A\rangle$ ואנרגיה ε_A ואטומי B (כוכב) בעלי אורביטל $|\varphi_B\rangle$ ואנרגיה ε_B. כל אינטגרלי החפיפה בין שכנים קרובים זהים והינם $(-\gamma)$ כאשר $\gamma > 0$. הניחו מודל הקשירה ההדוקה וענו על הסעיפים הבאים:



א. (9 נקי) רשמו את המטריצה הסקולרית במודל הקשירה ההדוקה.

השכנים הקרובים של אטום A המסומן (נניח שהוא בראשית) הם אטומי B והם נמצאים בקואורדינטות:

$$\vec{\delta}_i = \pm a\hat{x} \pm a\hat{y}$$

איבר הפאזה של A עם השכנים הקרובים (אטומי B) יהיה:

$$\Omega(\vec{k}) = \sum_{\delta_i} e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_i} = e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_2} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_3} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{\delta}_4} = e^{ik_x\frac{a}{2}+ik_y\frac{a}{2}} + e^{ik_x\frac{a}{2}-ik_y\frac{a}{2}} + e^{-ik_x\frac{a}{2}+ik_y\frac{a}{2}} + e^{-ik_x\frac{a}{2}-ik_y\frac{a}{2}} =$$

$$e^{ik_x\frac{a}{2}}\left(e^{ik_y\frac{a}{2}} + e^{-ik_y\frac{a}{2}}\right) + e^{-ik_x\frac{a}{2}}\left(e^{ik_y\frac{a}{2}} + e^{-ik_y\frac{a}{2}}\right) = 2\cos(k_y\frac{a}{2})\left(e^{ik_x\frac{a}{2}} + e^{-ik_x\frac{a}{2}}\right) = 4\cos(k_y\frac{a}{2})\cos(k_x\frac{a}{2})$$

והמטריצה הסקולרית תהיה:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_A - \varepsilon & -\gamma\Omega \\ -\gamma\Omega^* & \varepsilon_B - \varepsilon \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \varepsilon_A - \varepsilon & -4\gamma\cos(k_y\frac{a}{2})\cos(k_x\frac{a}{2}) \\ -4\gamma\cos(k_y\frac{a}{2})\cos(k_x\frac{a}{2}) & \varepsilon_B - \varepsilon \end{pmatrix}$$

ב. (9 נקי) מצאו את פסי האנרגיה מהמטריצה הסקולרית.

צריך לדרוש שהדטרמיננטה של המטריצה מתאפסת ומכאן נמצא את הערכים העצמיים שהם פסי האנרגיה של הגביש הנחקר.

$$(\varepsilon_A - \varepsilon)(\varepsilon_B - \varepsilon) - 16\gamma^2\cos^2(k_y\frac{a}{2})\cos^2(k_x\frac{a}{2}) = 0$$

$$\varepsilon^2 - \varepsilon(\varepsilon_A + \varepsilon_B) + \varepsilon_A\varepsilon_B - 16\gamma^2\cos^2(k_y\frac{a}{2})\cos^2(k_x\frac{a}{2}) = 0$$

$$\varepsilon_{1,2} = \frac{1}{2}\left((\varepsilon_A + \varepsilon_B) \pm \sqrt{(\varepsilon_A + \varepsilon_B)^2 - 4\left(\varepsilon_A\varepsilon_B - 16\gamma^2\cos^2(k_y\frac{a}{2})\cos^2(k_x\frac{a}{2})\right)}\right)$$

$$\varepsilon_{1,2}=\frac{1}{2}\left(\left(\varepsilon_A+\varepsilon_B\right)\pm\sqrt{\left(\varepsilon_A-\varepsilon_B\right)^2+64\gamma^2\cos^2(k_y\frac{a}{2})\cos^2(k_x\frac{a}{2})}\right)$$

ג. (9 נקי) הניחו כי $\varepsilon_A > \varepsilon_B$ ובנוסף $\varepsilon_A - \varepsilon_B \gg \gamma$ ובצעו פיתוח טיילור של השורש עד סדר ראשון. קבלו ביטוי לפסי האנרגיה בקירוב שקיבלתם. ציירו את פסי האנרגיה שקיבלתם עבור $k_y = 0$ באזור ברילואן הראשון. סמנו את הערכים המינימליים והמקסימליים של הפסים עבור $k_y = 0$. סמנו בברור מהו אזור ברילואן הראשון עבור $k_y = 0$ וחשבו מהי מהירות החבורה בכיוון ציר x בקצה אזור ברילואן של הפסים שקיבלתם עבור $k_y = 0$. הסבירו את התוצאות.

רמז: השתמשו בקשרים הבאים: $\sqrt{1+x^2} \approx 1 + x^2/2$, $\cos(2\alpha) = 2\cos^2(\alpha) - 1$.

נשתמש בקשרים האלו בכדי לפתח את הערכים העצמיים:

$$\varepsilon_{1,2}=\frac{1}{2}\left(\left(\varepsilon_A+\varepsilon_B\right)\pm\sqrt{\left(\varepsilon_A-\varepsilon_B\right)^2+64\gamma^2\cos^2(k_y\frac{a}{2})\cos^2(k_x\frac{a}{2})}\right)=$$

$$\frac{1}{2}\left(\left(\varepsilon_A+\varepsilon_B\right)\pm\left(\varepsilon_A-\varepsilon_B\right)\sqrt{1+64\frac{\gamma^2}{\left(\varepsilon_A-\varepsilon_B\right)^2}\cos^2(k_y\frac{a}{2})\cos^2(k_x\frac{a}{2})}\right)\approx$$

$$\frac{1}{2}\left(\left(\varepsilon_A+\varepsilon_B\right)\pm\left(\varepsilon_A-\varepsilon_B\right)\left(1+\frac{1}{2}64\frac{\gamma^2}{\left(\varepsilon_A-\varepsilon_B\right)^2}\cos^2(k_y\frac{a}{2})\cos^2(k_x\frac{a}{2})\right)\right)=$$

$$\frac{1}{2}\left(\left(\varepsilon_A+\varepsilon_B\right)\pm\left(\varepsilon_A-\varepsilon_B\right)\left(1+\frac{1}{2}64\frac{\gamma^2}{\left(\varepsilon_A-\varepsilon_B\right)^2}\frac{1}{2}(1+\cos(k_ya))\frac{1}{2}(1+\cos(k_xa))\right)\right)=$$

$$\frac{1}{2}\left(\left(\varepsilon_A+\varepsilon_B\right)\pm\left(\varepsilon_A-\varepsilon_B\right)\right)\pm\frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}64\frac{\gamma^2}{\left(\varepsilon_A-\varepsilon_B\right)}\frac{1}{2}(1+\cos(k_ya))\frac{1}{2}(1+\cos(k_xa))\right)=$$

$$\frac{1}{2}\left(\left(\varepsilon_A+\varepsilon_B\right)\pm\left(\varepsilon_A-\varepsilon_B\right)\right)\pm\frac{1}{4}\frac{\gamma^2}{\left(\varepsilon_A-\varepsilon_B\right)}\left(1+\cos(k_xa)+\cos(k_ya)+\cos(k_xa)\cos(k_ya)\right)$$

$$\varepsilon_+=\varepsilon_A+\frac{1}{4}\frac{\gamma^2}{\left(\varepsilon_A-\varepsilon_B\right)}\left(1+\cos(k_xa)+\cos(k_ya)+\cos(k_xa)\cos(k_ya)\right)$$

$$\varepsilon_-=\varepsilon_B-\frac{1}{4}\frac{\gamma^2}{\left(\varepsilon_A-\varepsilon_B\right)}\left(1+\cos(k_xa)+\cos(k_ya)+\cos(k_xa)\cos(k_ya)\right)$$

עבור $k_y = 0$ נקבל:

$$\varepsilon_+=\varepsilon_A+\frac{1}{2}\frac{\gamma^2}{\left(\varepsilon_A-\varepsilon_B\right)}\left(1+\cos(k_xa)\right)$$

$$\varepsilon_-=\varepsilon_B-\frac{1}{2}\frac{\gamma^2}{\left(\varepsilon_A-\varepsilon_B\right)}\left(1+\cos(k_xa)\right)$$

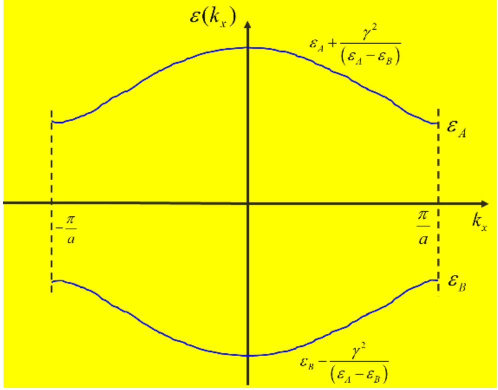
עבור $k_x = 0$ נקבל מקסימום של הפס העליון ומינימום של הפס התחתון.

$$\varepsilon_+(\max) = \varepsilon_A + \frac{1}{2}\frac{\gamma^2}{(\varepsilon_A-\varepsilon_B)}(1+1) = \varepsilon_A + \frac{\gamma^2}{(\varepsilon_A-\varepsilon_B)}$$
$$\varepsilon_-(\min) = \varepsilon_B - \frac{1}{2}\frac{\gamma^2}{(\varepsilon_A-\varepsilon_B)}(1+1) = \varepsilon_B - \frac{\gamma^2}{(\varepsilon_A-\varepsilon_B)}$$

עבור $k_x = \pm\pi/a$ (שהוא קצה אזור ברילואן הראשון) נקבל מינימום של הפס העליון ומקסימום של הפס התחתון:

$$\varepsilon_+(\min) = \varepsilon_A + \frac{1}{2}\frac{\gamma^2}{(\varepsilon_A-\varepsilon_B)}(1-1) = \varepsilon_A$$
$$\varepsilon_-(\max) = \varepsilon_B - \frac{1}{2}\frac{\gamma^2}{(\varepsilon_A-\varepsilon_B)}(1-1) = \varepsilon_B$$

ולכן ציור הפסים יראה כך:



מהירות החבורה בכיוון ציר x עבור $k_y = 0$ נתונה ע"י הביטוי הבא: $v_g^x = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial\varepsilon}{\partial k_x}$ לכן נקבל:

$$v_g^+(\pm\frac{\pi}{a}) \propto \sin(k_x a)\Big|_{\pm\frac{\pi}{a}} = 0$$
$$v_g^-(\pm\frac{\pi}{a}) \propto \sin(k_x a)\Big|_{\pm\frac{\pi}{a}} = 0$$

כצפוי, בקצה אזור ברילואן הראשון מהירות החבורה של האלקטרונים מתאפסת.

ד. (9 נק') הניחו כי פסי האנרגיה של הבעיה נתונים ע"י הקשרים הבאים:

$$\varepsilon_+ = \varepsilon_A + \alpha\left(1+\cos(k_x a)+\cos(k_y a)+\cos(k_x a)\cos(k_y a)\right)$$
$$\varepsilon_- = \varepsilon_B - \alpha\left(1+\cos(k_x a)+\cos(k_y a)+\cos(k_x a)\cos(k_y a)\right)$$

חשבו את המסות האפקטיביות של הפסים בכיוונים השונים. האם המסות זהות? האם הן חיוביות או שליליות. מה המשמעות הנובעת מכך? האם המסות בכיוון x ובכיוון y זהות? ציירו במישור $k_x - k_y$ עקומות שוות אנרגיה (energy contours) של שני פסי האנרגיה שמצאתם אחרי הקרוב שעשיתם למסה האפקטיבית.

רמז: השתמשו בקשר הבא $\left(\text{for } \beta \ll 1 \ \rightarrow\ \cos(\beta) \approx 1 - \frac{1}{2}\beta^2\right)$ ופתחו את האנרגיות ליד נקודות האקסטרימום שלהן.

נשתמש בקרוב על מנת לפתח את פסי האנרגיות ליד נקודות הקצה:

$$\varepsilon_+ = \varepsilon_A + \alpha\left(1+\cos(k_x a)+\cos(k_y a)+\cos(k_x a)\cos(k_y a)\right) =$$
$$= \varepsilon_A + \alpha\left(1+(1-\frac{1}{2}(k_x a)^2)+(1-\frac{1}{2}(k_y a)^2)+(1-\frac{1}{2}(k_x a)^2)(1-\frac{1}{2}(k_y a)^2)\right) =$$
$$\varepsilon_A + 4\alpha + \alpha\left(-\frac{1}{2}(k_x a)^2 - \frac{1}{2}(k_y a)^2 - \frac{1}{2}(k_x a)^2 - \frac{1}{2}(k_y a)^2 + \frac{1}{4}(k_x a)^2(k_y a)^2\right) =$$
$$\varepsilon_+ = \varepsilon_A + 4\alpha - \alpha\left((k_x a)^2 + (k_y a)^2 - \frac{1}{4}(k_x a)^2(k_y a)^2\right)$$

באותו אופן נקבל עבור הפס השני:

$$\varepsilon_- = \varepsilon_B - \alpha\left(1+\cos(k_x a)+\cos(k_y a)+\cos(k_x a)\cos(k_y a)\right) =$$
$$\varepsilon_- = \varepsilon_B - 4\alpha + \alpha\left((k_x a)^2 + (k_y a)^2 - \frac{1}{4}(k_x a)^2(k_y a)^2\right)$$

ולכן המסות האפקטיביות תהיינה:

עבור הפס העליון:

$$\frac{1}{m_{xy}^+} = \frac{1}{\hbar^2}\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \varepsilon_+}{\partial k_x \partial k_x} & \frac{\partial^2 \varepsilon_+}{\partial k_x \partial k_y} \\ \frac{\partial^2 \varepsilon_+}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 \varepsilon_+}{\partial k_y \partial k_y} \end{pmatrix}\Bigg|_{k_x=k_y=0} = \frac{1}{\hbar^2}\begin{pmatrix} -2\alpha a^2 & 0 \\ 0 & -2\alpha a^2 \end{pmatrix}$$

ועבור הפס התחתון:

$$\frac{1}{m_{xy}^-} = \frac{1}{\hbar^2}\begin{pmatrix} \frac{\partial^2 \varepsilon_-}{\partial k_x \partial k_x} & \frac{\partial^2 \varepsilon_-}{\partial k_x \partial k_y} \\ \frac{\partial^2 \varepsilon_-}{\partial k_y \partial k_x} & \frac{\partial^2 \varepsilon_-}{\partial k_y \partial k_y} \end{pmatrix}\Bigg|_{k_x=k_y=0} = \frac{1}{\hbar^2}\begin{pmatrix} 2\alpha a^2 & 0 \\ 0 & 2\alpha a^2 \end{pmatrix}$$

כלומר קיבלנו מסות זהות בכיוון x ו y ובערך מוחלט זהות לשני הפסים. עבור הפס העליון קיבלנו מסה אפקטיבית שלילית – כלומר מדובר על חורים. עבור הפס התחתון קיבלנו מסה אפקטיבית חיובית – כלומר מדובר על אלקטרונים. תוצאה זו תואמת את הציור של פסי האנרגיה שציירנו בסעיף הקודם.

עקומות שוות אנרגיה במישור $k_x - k_y$ נתונות ע״י עיגולים קונצנטריים של שני הפסים מכיוון שהפסים איזוטרופיים.

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

אינטגרלים שימושיים:

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

תוחלת μ
סטיית תקן σ

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 $\alpha > 0, n \geq 0$

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

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

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