אלקטרוניקה פיזיקלית 044124

סמסטר אביב 2018

מועד א'

<u>הנחיות</u>

1. <u>משך הבחינה ־ שלוש שעות.</u>

2. <u>בבחינה 4 שאלות. בידקו כי ברשותכם 5 עמודים כולל עמוד זה.</u>

3. <u>ניתן להשתמש בחומר עזר מכל סוג שהוא פרט לציוד תקשורת אלקטרוני (מחשב, טאבלט, טלפון וכו׳).</u>

5. <u>יש להגיש את מחברת הבחינה בלבד.</u>

6. <u>כיתבו בכתב יד ברור.</u>

7. <u>תשובות לא מנומקות לא תתקבלנה.</u>

8. <u>אנא ודאו שרשמתם את מספר תעודת הזהות על מחברת הבחינה.</u>

שאלה מספר 1 (35 נקודות):

בחומר מסוים נתונה הדיספרסיה של פס ההולכה:

$$\varepsilon_C(k)=\varepsilon_0+\frac{\hbar^2}{2}\left[\left(\frac{k_x^4}{\alpha}-k_x^2\right)\frac{1}{m_1}+\left(\frac{k_y^4}{\alpha}-k_y^2\right)\frac{1}{m_1}+\frac{k_z^2}{m_e}\right]$$

נתון: $m_1=3m_e$, $\hbar^2\alpha/2m_1=1eV$ ו- $\varepsilon_0=1[ev]$ והוא נמדד מהמקסימום של פס הערכיות הנמצא במרכז אזור ברילואין הראשון באנרגיה $\varepsilon_V=0$

א. (4 נקי) – מצאו את המינימום של פס ההולכה (אנרגיה ותנע גבישי).

ב. (4 נקי) - מהו גודל פער האנרגיה של החומר?

ג. (6 נקי) - האם החומר הנ"ל יכול לשמש לרכיבים פולטי אור כגון LED? מדוע?

ד. (7 נקי) – מצאו את הביטוי לצפיפות המצבים בתחתית פס ההולכה.

ה. (7 נקי) - מצאו את הביטוי לטנזור המסה האפקטיבית של פס ההולכה.

צפיפות האלקטרונים בפס זה היא $1\times10^{18}cm^{-3}$. נתון שהפס איננו מלא, ושכל שאר פסי האנרגיה בגביש מלאים או ריקים לחלוטין.

ו. (7 נקי) - חשבו את אנרגיית פרמי של החומר.

רמז: היזכרו בהגדרות של רמת פרמי והפוטנציאל הכימי. מתי הן מתלכדות? השתמשו בנתון זה כדי לפשט את האינטגרל שעליכם לחשב.

על מנת להקל על עצמנו, נציב את הקשר $m_1=3m_e$ ונקבל:

$$\varepsilon_C(k)=\varepsilon_0+\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{1}{3}\left(\frac{k_x^4}{\alpha}-k_x^2\right)+\frac{1}{3}\left(\frac{k_y^4}{\alpha}-k_y^2\right)+k_z^2\right]$$

נשים לב שלפס ההולכה אין תלות פרבולית מובהקת ולכן לא ברור היכן נמצאת המינימה. נחשב את הגרדיאנט של הפונקי הנ"ל ונמצא היכן הוא מתאפס:

$$\nabla\varepsilon_C(k)=\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{1}{3}\left(\frac{4k_x^3}{\alpha}-2k_x\right)x+\frac{1}{3}\left(\frac{4k_y^3}{\alpha}-2k_y\right)y+2k_z\hat{z}\right]$$

נשים לב שישנה מינימה עבור $\vec{k}=(0,0,0)$ אולם זו אינה המינימה היחידה. נקבל 4 מינימות נוספות עבור:

$$\vec{k}=(\pm\sqrt{\frac{\alpha}{2}},\pm\sqrt{\frac{\alpha}{2}},0)$$

לחילופין ניתן לקבל גם את הסט הבא של 4 מינימות:

$$\vec{k}=(\pm\sqrt{\frac{\alpha}{2}},0,0),(0,\pm\sqrt{\frac{\alpha}{2}},0)$$

4 המינימות הנ"ל יתנו את אותו ערך של האנרגיה ולכן נבדוק האם אחת מהן גדולה או קטנה יותר מהמינימה במרכז (פער האנרגיה נקבע לפי המרחק האנכי הקטן ביותר בין פס ההולכה לפס הערכיות ללא קשר לוקטור הגל).

עבור $\vec{k}=(0,0,0)$ נקבל:

$$\varepsilon_C(k)=\varepsilon_0$$

עבור $\vec{k}=(\pm\sqrt{\frac{\alpha}{2}},0,0),(0,\pm\sqrt{\frac{\alpha}{2}},0)$ נקבל:

$$\varepsilon_C(k)=\varepsilon_0+\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{1}{3}\left(\frac{k_x^4}{\alpha}-k_x^2\right)+\frac{1}{3}\left(\frac{k_y^4}{\alpha}-k_y^2\right)+k_z^2\right]=$$
$$=\varepsilon_0+\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{1}{3}\left(\frac{\alpha^2}{4\alpha}-\frac{\alpha}{2}\right)=\varepsilon_0-\frac{\hbar^2\alpha}{24m_e}$$

עבור $\vec{k}=(\pm\sqrt{\frac{\alpha}{2}},\pm\sqrt{\frac{\alpha}{2}},0)$ נקבל:

$$\varepsilon_C(k)=\varepsilon_0+\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{1}{3}\left(\frac{k_x^4}{\alpha}-k_x^2\right)+\frac{1}{3}\left(\frac{k_y^4}{\alpha}-k_y^2\right)+k_z^2\right]=$$
$$=\varepsilon_0+\frac{\hbar^2}{2m_e}\left[\frac{1}{3}\left(\frac{\alpha^2}{4\alpha}-\frac{\alpha}{2}\right)+\frac{1}{3}\left(\frac{\alpha^2}{4\alpha}-\frac{\alpha}{2}\right)\right]=\varepsilon_0-\frac{\hbar^2\alpha}{12m_e}$$

נתון ש- $\hbar^2\alpha/2m_1=1eV$ כלומר שבהגדרה α הינו גודל חיובי! משמעות הדבר היא שהמינימות הלא-טריויאליות (כלומר שאינן ב-0) הן נמוכות יותר וכן סט המינימות המשני גם הוא גבוה יותר באנרגיה! לכן נקודות המינימום של פס ההולכה הן $\vec{k}=(\pm\sqrt{\frac{\alpha}{2}},\pm\sqrt{\frac{\alpha}{2}},0)$.

מכיוון שנתון שהמקסימום של פס הערכיות הוא בעל אנרגיה 0, פער האנרגיה יהיה:

$$E_{gap}=E_{c\_\min}-E_{v\_\max}=\varepsilon_0-\frac{\hbar^2\alpha}{12m_e}=\varepsilon_0-\frac{\hbar^2\alpha}{4m_1}=1[eV]-0.5[eV]=0.5[eV]$$

היות וקיבלנו שפער האנרגיה אינו ישיר, החומר הנ"ל אינו יכול לשמש עבור רכיבים פולטי אור כגון LEDים מהסיבה שפוטונים מהווים מעברים כמעט אנכיים בדיאגרמת פסי האנרגיה (עקב זאת שהתנע שלהם קטן הרבה יותר מהתנע השריגי הטיפוסי) ומכיוון שרק קצות הפסים מאוכלסים, לא תוכל להתקיים פליטת פוטונים).

כעת נרצה למצוא את צפיפות המצבים בתחתית פס ההולכה. היות ומדובר בתחתית פס, נרצה לבצע קירוב פרבולי לפס האנרגיה בנקודה הנ"ל. נשים לב שהצירים הבעייתיים הם צירים x,y שכן ציר $\hat{z}$ הינו פרבולי לחלוטין. נבצע את תהליך הקירוב עבור ציר x כאשר מטעמי סימטריה החישוב יהיה זהה גם ציר y. באופן כללי יתקיים (טור טיילור מסדר שני סביב נקודה כלשהיא):

$$f(x)|_{x=a} \approx f(a) + \frac{df}{dx}|_{x=a}(x-a) + \frac{d^2 f}{2dx^2}|_{x=a}(x-a)^2$$

במקרה שלנו הנקודה היא נק' המינימום אותה נציב לאחר מכן. נקבל (עבור ציר x בלבד):

$$\varepsilon_C(k_x)|_{k_{x\min}} = \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2}{6m_e}\left(\frac{k_{x\min}^4}{\alpha} - k_{x\min}^2\right) + \frac{\hbar^2}{6m_e}\left(\frac{4k_{x\min}^3}{\alpha} - 2\,\mathrm{k}_{x\min}\right)(\mathrm{k}_x - k_{\min}) + \frac{\hbar^2}{12m_e}\left(\frac{12k_{x\min}^2}{\alpha} - 2\right)(\mathrm{k}_x - k_{\min})^2 =$$

$$= E_{gap} + \frac{\hbar^2}{12m_e}\left(\frac{12\frac{\alpha}{2}}{\alpha} - 2\right)(\mathrm{k}_x - \sqrt{\frac{\alpha}{2}})^2 = E_{gap} + \frac{4\hbar^2}{12m_e}(\mathrm{k}_x - \sqrt{\frac{\alpha}{2}})^2 = E_{gap} + \frac{\hbar^2}{3m_e}(\mathrm{k}_x - \sqrt{\frac{\alpha}{2}})^2$$

שימו לב שהנגזרת הראשונה התאפסה שכן מדובר בנקודת מינימום. עבור כל הצירים נקבל בסה"כ:

$$\varepsilon_C(k)|_{k\min} = \varepsilon_C(k_x)|_{k_{x\min}} = E_{gap} + \frac{\hbar^2}{3m_e}(\mathrm{k}_x - \sqrt{\frac{\alpha}{2}})^2 + \frac{\hbar^2}{3m_e}(\mathrm{k}_y - \sqrt{\frac{\alpha}{2}})^2 + \frac{\hbar^2}{2m_e}k_z^2$$

הערה: ברמת העיקרון הפיתוח לטור טיילור צריך להיעשות בשני הצירים בו"ז שכן יש איברי נגזרות מעורבים, אולם מכיוון שהפיתוח שלנו הוא עד סדר שני, האיבר המעורב היחיד מכיל נגזרות מסדר ראשון אשר מתאפסות בכל מקרה ולכן ההפרדה לצירים עדיין עובדת.

הערה: יש 4 נק' מינימה והפיתוח הנ"ל מתאים לאחת מהן. הביטויים עבור שאר הנקודות זהים עד כדי הסימן של ההזזות בצירים x, y. אנו רוצים למצוא את צפיפות המצבים בתחתית הפס. יחס הנפיצה הוא פרבולי אולם נשים לב שהמסות האפקטיביות בצירים x, y שונות מהמסה האפקטיבית בציר $\hat{z}$. על מנת לקבל בכל זאת צפיפות מצבים, נשתמש בקירוב של צפיפות המצבים להולכה אותו ראינו בתרגול. נתחיל מלמצוא את טנזור המסה האפקטיבית, כאשר הטנזור מתקבל באופן מיידי שכן ניתן לראות שהמסה בציר $\hat{z}$ היא פשוט מסת האלקטרון בואקום ואילו המסה בצירים x, y היא פי 1.5 מסת האלקטרון בואקום. נקבל אם כן את הטנזור הבא:

$$\frac{1}{m^*} = \begin{pmatrix} \frac{1}{1.5m_e} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{1.5m_e} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_e} \end{pmatrix}$$

בתרגול ראינו שמתקיים:

$$g(E) = \frac{\sqrt{2}m_{DOS}^{3/2}\sqrt{E - E_C}}{\pi^2\hbar^3}, m_{DOS} = g_V^{2/3}(m_1 m_2 m_3)^{1/3}$$

במקרה שלנו יש 4 מינימות ולכן פרמטר הניוון הוא 4, כאשר נקבל:

$$m_{DOS} = 4^{2/3}(2.25)^{1/3}m_e$$

כעת נתונה לנו צפיפות האלקטרונים בפס והיא $1\times10^{18}cm^{-3}$. נתון שהפס אינו מלא ולכן רמת פרמי שוכנת בתוך הפס! ידוע שמתקיים:

$$n = \int_{E_C}^{\infty} g(E)\cdot \mathrm{f}_{FD}(\mathrm{E})\,\mathrm{dE}$$

על מנת לחשב את מיקומה של רמת פרמי בלי לפתור את האינטגרל הנ"ל, נניח שהחומר שלנו מצוי ב-0 מעלות קלווין כך שהתפלגות פרמי דיראק הופכת למדרגה. משמעות הדבר היא שהאינטגרל הופך ל:

$$n=\int_{E_C}^{\infty} g(E)\cdot \mathrm{f}_{FD}(\mathrm{E})\,\mathrm{dE}\approx\int_{E_C}^{E_f} g(E)\,\mathrm{dE}$$

נציב את צפיפות המצבים בתוך האינטגרל ונחשב:

$$n=\int_{E_C}^{E_f} g(E)\,\mathrm{dE}=\int_{0}^{E_f}\frac{\sqrt{2}m_{DOS}^{3/2}\sqrt{E}}{\pi^2\hbar^3}\mathrm{dE}=\frac{\sqrt{2}m_{DOS}^{3/2}}{\pi^2\hbar^3}\int_{0}^{E_f}\sqrt{E}\,\mathrm{dE}=\frac{\sqrt{2}m_{DOS}^{3/2}}{\pi^2\hbar^3}\cdot\frac{2}{3}E_f^{3/2}\Rightarrow$$

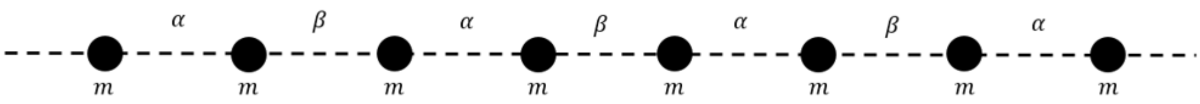
$$\Rightarrow E_f^{3/2}=\frac{3n\pi^2\hbar^3}{2\sqrt{2}m_{DOS}^{3/2}}\Rightarrow E_f=\left(\frac{3n\pi^2\hbar^3}{2\sqrt{2}m_{DOS}^{3/2}}\right)^{2/3}=\left(\frac{3n\pi^2}{2\sqrt{2}}\right)^{2/3}\frac{\hbar^2}{m_{DOS}}=\left(\frac{3n\pi^2}{2\sqrt{2}}\right)^{2/3}\frac{\hbar^2}{4^{2/3}(2.25)^{1/3}m_e}=$$

$$=(10.468n)^{2/3}\frac{\hbar^2}{3.301m_e}=4.78\cdot10^{16}\cdot3.702\cdot10^{-39}=1.7696\cdot10^{-22}[J]=1.106[meV]$$

שימו לב לשימוש ביחידות. תמיד תעבדו עם אותו סט של יחידות, רצוי SI. כך למשל, הצפיפות נתונה ביחידות של סנטימטרים אולם יש לעבור למטרים.

שאלה מספר 2 (35 נקודות):

נתונה שרשרת חד-מימדית של אטומים בעלי מסה m במרחק d זה מזה. קבוע הכוח (הקפיץ) בין שני אטומים סמוכים משתנה לסירוגין בין הערכים α,β (כפי שמתואר בציור).



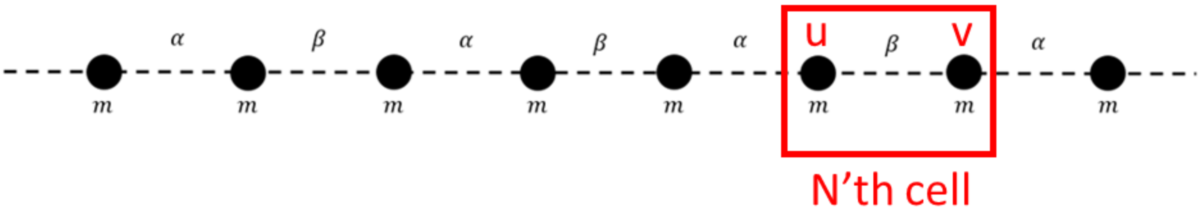
מצאו את:

1. (17 נק') – מצאו את התלות של תדירות התנודות ω בוקטור הגל k עבור האופנים האקוסטים והאופטיים.

2. (8 נק') - עבור $k=0$, הסבירו וציירו כיצד יראו התנודות העצמיות של האטומים בתא היחידה (אין צורך בחישוב מפורש). כמה סוגי תנודות כאלה קיימים בבעיה? הסבירו איזה אופן (אקוסטי/אופטי) שייך לכל תנודה.

3. (10 נק') – עבור הסעיף הקודם, חשבו מפורשות את הוקטורים העצמיים של כל אחת מהתנודות עבור $k=0$.

קיומם של שני קבועי קפיץ שונים משמעו שישנו תא יחידה כלשהוא. נבחר את תא היחידה כנראה באיור למטה. שימו לב שניתן היה גם לבחור תא עם הקפיץ האחר במרכז, התוצאות יהיו זהות עד כדי הגדרה שונה של הע"ע והו"ע.



נכתוב את משוואת האנרגיה עבור הקפיצים באותו תא יחידה. היות וישנם 3 קפיצים, נצפה ל-3 איברים בביטוי לפוטנציאל:

$$U=\frac{\alpha}{2}(u_n-v_{n-1})^2+\frac{\alpha}{2}(u_{n+1}-v_n)^2+\frac{\beta}{2}(v_n-u_n)^2$$

נגזור את הכוח מהפוטנציאל:

$$F=-\frac{dU}{dx}=\begin{cases} u_n: -\alpha(u_n-v_{n-1})+\beta(v_n-u_n) \\ v_n: \alpha(u_{n+1}-v_n)-\beta(v_n-u_n) \end{cases}$$

שימו לב שלכל אטום בתא יש 2 כוחות הפועלים עליו מ-2 הקפיצים והדבר הגיוני לנו (כל אטום מחובר רק ל-2 קפיצים).

נגדיר גל מישורי כללי:

$$\begin{cases} u_n=Ae^{iknd-i\omega t} \\ v_n=Be^{iknd-ikd-i\omega t} \end{cases}$$

שימו לב לכך שהגל המישורי השני מוזז קדימה ביחידת מרחק אחת!

כעת נציב את הגל בביטוי שקיבלנו תוך כדי שאנו לוקחים את החוק השני של ניוטון בחשבון:

$$\begin{cases} m\ddot{u}_n = -\alpha(u_n - v_{n-1}) + \beta(v_n - u_n) \\ m\ddot{v}_n = \alpha(u_{n+1} - v_n) - \beta(v_n - u_n) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} -m\omega^2 Ae^{iknd-i\omega t} = -\alpha(Ae^{iknd-i\omega t} - Be^{ik(n-1)d-ikd-i\omega t}) + \beta(Be^{iknd-ikd-i\omega t} - Ae^{iknd-i\omega t}) \\ -m\omega^2 Be^{iknd-ikd-i\omega t} = \alpha(Ae^{ik(n+1)d-i\omega t} - Be^{iknd-ikd-i\omega t}) - \beta(Be^{iknd-ikd-i\omega t} - Ae^{iknd-i\omega t}) \end{cases} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \begin{cases} -m\omega^2 A = -\alpha(A - Be^{-2ikd}) + \beta(Be^{-ikd} - A) \\ -m\omega^2 B = \alpha(Ae^{2ikd} - B) - \beta(B - Ae^{ikd}) \end{cases}$$

נסדר את האיברים ונקבל את המטריצה האופיינית ממנה נגזור את אופני התנועה:

$$\begin{cases} -m\omega^2 A = -\alpha(A - Be^{-2ikd}) + \beta(Be^{-ikd} - A) \\ -m\omega^2 B = \alpha(Ae^{2ikd} - B) - \beta(B - Ae^{ikd}) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} m\omega^2 A - \alpha(A - Be^{-2ikd}) + \beta(Be^{-ikd} - A) = 0 \\ m\omega^2 B + \alpha(Ae^{2ikd} - B) - \beta(B - Ae^{ikd}) = 0 \end{cases} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \begin{cases} A[m\omega^2 - \alpha - \beta] + B[\alpha e^{-2ikd} + \beta e^{-ikd}] = 0 \\ A[\alpha e^{2ikd} + \beta e^{ikd}] + B[m\omega^2 - \alpha - \beta] = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{pmatrix} m\omega^2 - \alpha - \beta & \alpha e^{-2ikd} + \beta e^{-ikd} \\ \alpha e^{2ikd} + \beta e^{ikd} & m\omega^2 - \alpha - \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

כעת נחשב את הדטרמיננטה ונשווה לאפס שכן איננו מחפשים פתרון טריויאלי:

$$[m\omega^2 - \alpha - \beta]^2 - [\alpha e^{-2ikd} + \beta e^{-ikd}][\alpha e^{2ikd} + \beta e^{ikd}] = 0 \Rightarrow m^2\omega^4 - 2m\omega^2(\alpha+\beta) + [\alpha+\beta]^2 - \alpha^2 - \alpha\beta e^{-ikd} - \alpha\beta e^{-ikd} - \beta^2 = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow m^2\omega^4 - 2m\omega^2(\alpha+\beta) + 2\alpha\beta - 2\alpha\beta\cos(kd) = 0 \Rightarrow m^2\omega^4 - 2m\omega^2(\alpha+\beta) + 4\alpha\beta[\frac{1-\cos(kd)}{2}] = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow m^2\omega^4 - 2m\omega^2(\alpha+\beta) + 4\alpha\beta\sin^2(\mathrm{kd}/2) = 0 \Rightarrow \omega^4 - \frac{2\omega^2(\alpha+\beta)}{m} + \frac{4\alpha\beta}{m^2}\sin^2(\mathrm{kd}/2) = 0 \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \omega_{1,2}^2 = \frac{(\alpha+\beta)}{m} \pm \frac{1}{2}\sqrt{\frac{4(\alpha+\beta)^2}{m^2} - \frac{16\alpha\beta}{m^2}\sin^2(\mathrm{kd}/2)} = \frac{(\alpha+\beta)}{m} \pm \frac{1}{m}\sqrt{(\alpha+\beta)^2 - 4\alpha\beta\sin^2(\mathrm{kd}/2)} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \omega_{1,2} = \left|\sqrt{\frac{(\alpha+\beta)}{m} \pm \frac{1}{m}\sqrt{(\alpha+\beta)^2 - 4\alpha\beta\sin^2(\mathrm{kd}/2)}}\right|$$

קיבלנו שני אופנים כאשר הדבר אינו מפתיע אותנו, כאשר האופן עם סימן הפלוס יהיה האופן האופטי והאופן עם סימן המינוס יהיה האופן האקוסטי.

כעת נתבקשנו להציב $k = 0$ ולחפש ע״ע + ו״ע. יתקיים:

$$\omega_{1,2}(\mathrm{k}=0) = \left|\sqrt{\frac{(\alpha+\beta)}{m} \pm \frac{1}{m}\sqrt{(\alpha+\beta)^2}}\right| = \left|\sqrt{\frac{(\alpha+\beta)}{m} \pm \frac{(\alpha+\beta)}{m}}\right| = 0, \sqrt{\frac{2(\alpha+\beta)}{m}}$$

לא מפתיע שקיבלנו תדר אחד שהוא אפס. זהו התדר של האופנים האקוסטים ונראה זאת גם ע״י צורת הוקטור העצמי. נציב את הערך הנ״ל במטריצה ונמצא את הו״ע התואם:

$$\begin{pmatrix} -\alpha-\beta & \alpha+\beta \\ \alpha+\beta & -\alpha-\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} A(-\alpha-\beta) + B(\alpha+\beta) = 0 \\ A(\alpha+\beta) + B(-\alpha-\beta) = 0 \end{cases} \Rightarrow A = B \Rightarrow \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

שימו לב שהו״ע מנורמל. עוד שימו לב ששתי האמפליטודות זהות בסימנן, כלומר שכל תא היחידה נע ביחד. הדבר תואם למוד אקוסטי כמצופה.

כעת נציב את המוד האופטי:

$$\begin{pmatrix} \alpha+\beta & \alpha+\beta \\ \alpha+\beta & \alpha+\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} A(\alpha+\beta) + B(\alpha+\beta) = 0 \\ A(\alpha+\beta) + B(\alpha+\beta) = 0 \end{cases} \Rightarrow A = -B \Rightarrow \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

הדבר שוב אינו מפתיע שכן עבור מוד אופטי אנו מצפים שהרכיבים של תא היחידה יהיו בעלי כיווני תנועה מנוגדים!

שאלה מספר 3 (10 נקודות):

נתונה מערכת בת שלוש רמות, הרמה ראשונה בעלת אנרגיה 0, הרמה השנייה בעלת אנרגיה ε והרמה השלישית בעלת אנרגיה 50ε.

1. (3 נק') - מהן פונקציית החלוקה והאנרגיה הממוצעת עבור כל חלקיק במערכת?

פונקציית החלוקה היא:

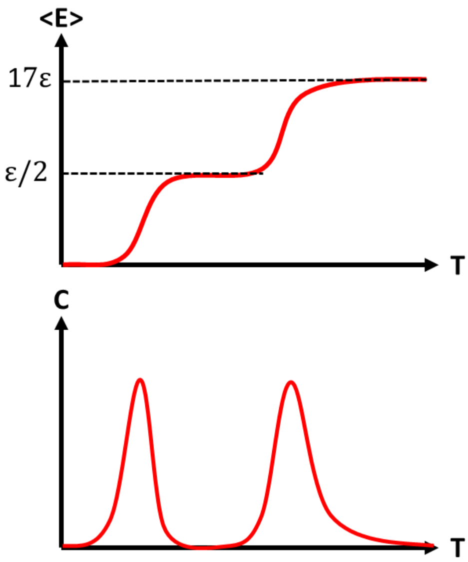
$$Z \triangleq \sum_n e^{-\beta E_n} = 1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-50\beta\varepsilon}$$

האנרגיה הממוצעת היא ממוצע משוקלל:

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z}[\varepsilon e^{-\beta\varepsilon} + 50\varepsilon e^{-50\beta\varepsilon}] = \frac{\varepsilon e^{-\beta\varepsilon} + 50\varepsilon e^{-50\beta\varepsilon}}{1 + e^{-\beta\varepsilon} + e^{-50\beta\varepsilon}}$$

2. (7 נק') - שרטטו **איכותית** את קיבול החום של המערכת כתלות בטמפרטורה, ציינו אזורים שונים על גבי הגרף והסבירו את תשובתכם!

לנוחיותכם מצורפים שני גרפים, הראשון (עליון) הוא של האנרגיה הממוצעת של חלקיק בודד כתלות בטמפרטורה והשני (תחתון – מה שהיה צריך לצייר) הוא של קיבול החום כתלות בטמפרטורה (שהוא למעשה הנגזרת של הגרף הראשון.



בטמפרטורות נמוכות רק האנרגיה הראשונה מאוכלסת בחלקיקים וקיבול החום אפסי שכן אין לחלקיקים מספיק אנרגיה כדי לעבור לרמה השנייה ($E_{Therm} = k_B T \ll \varepsilon$). הדבר תואם לחוק השלישי של התרמודינמיקה שכן על קיבול החום לשאוף ל-0 בטמפרטורות השואפות ל-0.

כאשר $E_{Therm} \sim \varepsilon$, מתאפשר מעבר בין 2 הרמות התחתונות ביותר וקיבול החום מקבל ערך שאינו אפס. שימו לב שמכיוון שרק-9+מת האנרגיה הגבוהה ביותר רחוקה מאוד מ-2 הרמות התחתונות, היא עדיין לא משחקת תפקיד כלשהוא. עבור $\varepsilon \ll E_{Therm} \ll 50\varepsilon$, שתי הרמות התחתונות מאוכלסות בצורה שווה ולכן האנרגיה הממוצעת מתקבעת על הערך הממוצע של האנרגיה של שתיהן בלבד! מכיוון ששתי הרמות מאוכלסות שווה בשווה, קיבול החום שוב דועך לאפס שכן לא ניתן לעבור בין המצבים. עבור $E_{Therm} \sim 50\varepsilon$ מתאפשר מעבר לרמה העליונה ביותר ושוב אנו רואים שינוי בקיבול החום. לבסוף, עבור $E_{Therm} \gg 50\varepsilon$ כל הרמות הופכות למאוכלסות שווה בשווה וקיבול החום שוב שואף לאפס. שימו לב לאופן פעולתו של משפט החלוקה השווה! הוא עובד רק עבור דרגות חופש הפתוחות לנו! נעיר שיכול להיות מצב שבו שני השיאים בעלי חפיפה מסויימת ואכן תשובות בעלות התיאור הנ"ל התקבלו גם כן.

<u>שאלה מספר 4 (20 נקודות):</u>

ענו על הסעיפים הבאים בקצרה – עד 4-5 משפטים לכל סעיף **(הסעיפים אינם קשורים זה לזה)**. נמקו את תשובותיכם היטב. באם יש צורך, השתמשו בנוסחאות אותן ראינו בקורס :

1. (2 נק') - עבור מחסום פוטנציאל ריבועי, הסבירו : מדוע ישנן אנרגיות אשר בהן מתקבל שיא בהסתברות למנהור?

כפי שראיתם בתרגול, עבור אנרגיות הגבוהות מערכו של המחסום, מתקבלים שיאים בהסתברות למנהור החלקיק. הסיבה לכך היא שאורך הגל של החלקיק תואם לרוחב המחסום ואנו מקבלים מצב רזונטיבי. תופעה זו מתקיימת באופן הרבה יותר חזק עבור 2 מחסומים בעלי מרווח כלשהוא בינהם. גם הטיעון של התאבכות בונה נכון (למעשה זהו אותו הטיעון של אורך הגל).

2. (2 נק') - הצדיקו את השימוש בקירוב יחס הנפיצה הפרבולי עבור צפיפות המצבים במוליכים למחצה.

עבור מוליכים למחצה, רמת פרמי נמצאת בתוך הפס האסור במיקום כלשהוא. הן פס ההולכה והן פס הערכיות רואים רק את הזנבות של ההתפלגות, כלומר שרק קצות הפסים הקרובים לפער האסור יכילו חלקיקים (זכרו שהרוחב הטיפוסי של כל פס הוא כאלקטרון-וולט אולם התפלגות פרמי-דיראק משתנה על סקאלה של מיליאלקטרון-וולטים (או כמה עשרות שלהם לכל היותר), ולכן מסתכלים רק על קצות הפסים בהם הקירוב הפרבולי תופס.

3. (2 נק') - בד"כ המסה האפקטיבית של אלקטרון במתכת גדולה יותר ממסתו בואקום (m_e). הצדיקו את הטיעון הנ"ל.

מתכות הן חומרים אשר בהן רמת פרמי נמצאת יחסית עמוק בתוך אחד מהפסים המותרים. ראינו שבעומק הפסים הנ"ל קרוב למרכזם, מסת האלקטרון שואפת לאינסוף (או מינוס אינסוף) ולכן נצפה למסה גדולה הרבה יותר ממסת האלקטרון בואקום.

4. (2 נק') - מהי המשמעות הפיזיקלית של קירוב התפלגויות בוזה-איינשטיין ופרמי-דיראק להתפלגות מקסוול-בולצמן מבחינת האופי של החלקיקים?

הן התפלגות בוזה-איינשטיין והתפלגות פרמי-דיראק הן התפלגויות המאפיינות חלקיקים קוונטים ואשר נובעות מהיותם בוזונים או פרמיונים. כאשר אנו מבצעים קירוב להתפלגות מקסוול-בולצמן הקלאסית, אנו מזניחים את האופי הקוונטי של החלקיקים בבעיה והופכים אותם לחלקיקים קלאסים - יש מעט חלקיקים והמון מצבי אנרגיה פנויים כך שהחלקיקים אינם חשים זה בזה ואופיים הקוונטי אינו בא לידי ביטוי.

5. (2 נק') - ראינו שעבור שריג כלשהוא, ניתן לתאר פוננים ואלקטרונים ע"י דיאגרמות פסי אנרגיה. בכל זאת ישנם מספר הבדלים בין הדיאגרמות של שני החלקיקים. ציינו שניים מהם והסבירו את מקורם הפיזיקלי.

ישנם מספר הבדלים :

- דיאגרמות הפסים של האלקטרונים מכילות מספר אינסופי של פסים בעוד שמספר הפסים עבור פוננים מוגבל אינהרנטית (כתלות במורכבות תא היחידה). הדבר נובע מהפוטנציאל של כל אטום אשר מהווה בור פוטנציאל אינסופי הגורר אינסוף מצבי אנרגיה.
- סקאלות האנרגיה של שתי הדיאגרמות שונות משמעותית. עבור אלקטרונים מדובר באלקטרון-וולטים בעוד שעבור פוננים מדובר במילי-אלקטרון-וולטים. המקור הפיזיקלי במקרה הנ"ל הוא הכוח אותו מפעילים האטומים זה על זה (מה שמניב עבורנו

את קבוע הקפיץ), לעומת רמות האנרגיה הטיפוסיות של האטום שהן בסקאלות של אלקטרון-וולטים.

- הפסים האלקטרונים נובעים ממצבים אטומיים ממוקמים (אורביטלים) בעוד שהפונונים מבוססים על תנודות בכלל הגביש, שאינן נובעות רק מתא היחידה הבודד.
- יחס הנפיצה הפונוני תמיד מכיל מקטע ליניארי סביב k=0 (היכן שאנו מחשבים את מהירות הקול).

מה לא היה נכון לרשום: פונונים הם בוזונים לעומת האלקטרונים שהם פרמיונים. מבני הפסים השונים לא מבוססים על היותם של החלקיקים פרמיונים/בוזונים!

6. (2 נק') - עבור בור פוטנציאל בעל רוחב כלשהוא, נתון שישנו חלקיק הנמצא ברמת האנרגיה הראשונה (הנמוכה ביותר) של הבור. מה יקרה לרמת האנרגיה הנ"ל כאשר נתחיל להרחיב את הבור?

הרחבה של הבור תנמיך את רמת האנרגיה קרוב יותר לתחתית הבור. הסיבה לכך היא שהחלקיק נפרש על פני מרחב גדול יותר, לכן לפי עקרון אי-הודאות התנע שלו קטן ומכאן גם האנרגיה. התקבלו גם תשובות המכילות את הנוסחה לבור הפוטנציאלים

7. (2 נק') - במוליכים למחצה, לרוב מוסיפים מסממים מסוגים שונים על מנת להגדיל את כמות נושאי המטען (אלקטרונים או חורים). האטומים המסממים הם לרוב בריכוז של כ- $10^{14} - 10^{17}[cm^{-3}]$. מדוע על אף נוכחות האטומים הזרים (שסידורם יכול להיות רנדומלי לחלוטין) אנו עדיין מתייחסים לשריג שלנו כאל מבנה מחזורי מסודר?

זכרו שמספר האטומים הטיפוסי בחומר מאקרוסקופי הוא בערך מספר אבוגדרו. מספר זה גדול בכמה סדרי גודל מרמת המסממים שאנו מחדירים בד"כ ולכן בקירוב טוב מאוד ניתן להתעלם מהשפעתם המסממים על המבנה השריגי. הערה: אם תגדילו את כמות המסממים, בשלב מסויים האטומים הנ"ל יתחילו "להרגיש" זה את זה וליצור פס אנרגיה חדש משלהם (לתופעה זו קוראים גם היצרות פער האנרגיה והיא מתרחשת עבור סימום כבד של השריג).

8. (2 נק') - "פסי אנרגיה מלאים אינם תורמים להולכה החשמלית" – הצדיקו משפט זה.

היות ולכל פס, עבור מצב עם תנע כלשהוא יתקיים גם מצב עם התנע ההופכי לו (נובע מהסימטריה של השריג), והיות וכל הפס מאוכלס, סך התנע הכולל של כל החלקיקים המאכלסים את הפס הוא אפס. הרבה ציינו שהפס מלא ואין לאלקטרונים/חורים לאן ללכת. זהו רק חלק מהתשובה והדגש על סכום התנע חשוב.

9. (2 נק') - נתונים שני פתרונות לבור פוטנציאל כלשהוא – סימטרי ואנטי-סימטרי. מי מהם בעל האנרגיה הגדולה יותר?

כפי שראיתם בהרצאה, מצב אנטי-סימטרי מכיל חציה של האפס ולכן מכיל גם שיפועים "חדים" יותר. שיפוע חד יותר משמעו תנע גדול יותר ולכן גם אנרגיה גדולה יותר. מכאן שהמצב הסימטרי הוא הנמוך והמצב האנטי-סימטרי הוא הגבוה.

10. (2 נק') - נתונה מערכת תרמודינמית גרנד-קנונית המחולקת ל-2, כאשר שני החלקים בעלי אותה טמפרטורה ומצויים במגע תרמי ודיפוסיפי. האם האנטרופיה של המערכת בהכרח מקסימלית?

האנטרופיה אינה בהכרח מקסימלית מהסיבה שעל שני פרמטרים להגיע לש"מ: הטמפרטורה והפוטנציאל הכימי. היות ולא נתון אף מידע על הפוטנציאל הכימי, לא ניתן לומר שבהכרח האנטרופיה מקסימלית.