אלקטרוניקה פיסיקלית 044124

סמסטר אביב 2023

מועד א

פתרון

הנחיות

- **משך הבחינה – 3 שעות.**
- **במבחן ישנן 2 חלקים - חלק 1 : 5 שאלות רב ברירה**
  חלק 2 : 2 שאלות פתוחות
- **בדקו שברשותכם 9 עמודים .**
- **ניתן להשתמש במחשבון ו- 8 דפי נוסחאות דו-צדדיים.**

בהצלחה!

חלק 1 (30 נקודות)

<u>שאלה 1 (6 נקודות):</u>

נתון חומר תלת-ממדי עם יחס דיספרסיה הדומה לגרפן: $E = \hbar V_F \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$

הספין של האלקטרון בערך מוחלט הוא 3/2.

מספר המצבים ליחידת אנרגיה וליחידת נפח נתון ע"י הביטוי הבא:

א. $\frac{3}{\pi^2} \frac{\varepsilon^{1/2}}{(\hbar V_F)^{3/2}}$

ב. $\frac{6}{\pi^2} \frac{\varepsilon}{(\hbar V_F)^2}$

ג. $\frac{2}{\pi^2} \frac{\varepsilon^2}{(\hbar V_F)^3}$

ד. $\frac{3}{\pi^2} \frac{\varepsilon^{3/2}}{(\hbar V_F)^3}$

פתרון: בשלושה ממדים צפיפות נושאי המטען נתונה ע"י הביטוי הבא:

$$n = 4 \frac{\frac{4\pi}{3} K_F^3}{(2\pi)^3} = \frac{2K_F^3}{3\pi^2} = \frac{2}{3\pi^2} \frac{\varepsilon^3}{(\hbar V_F)^3}$$

ולכן צפיפות המצבים ליחידת אנרגיה ונפח תהיה:

$$DOS = \frac{\partial n}{\partial \varepsilon} = \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \frac{2}{3\pi^2} \frac{\varepsilon^3}{(\hbar V_F)^3} = \frac{2}{\pi^2} \frac{\varepsilon^2}{(\hbar V_F)^3}$$

ולכן ג' היא התשובה הנכונה.

שאלה 2 (6 נקודות):

נתון גז של N אטומים חופשיים קלסיים בשלושה ממדים בטמפרטורה T ונפח V. לכל אטום יש מסה m ויחס נפיצה פרבולי. האנטרופיה של הגז נתונה ע"י הביטוי הבא:

א. $\frac{3}{2}Nk_B$

ב. $Nk_B\left(\frac{3}{2}+\ln(N)\right)$

ג. $Nk_B\ln\left(V\left(\frac{2\pi mk_BT}{\hbar^2}\right)^3\right)$

ד. $k_BN\left(\frac{3}{2}+\ln\left(V\left(\frac{2\pi mk_BT}{\hbar^2}\right)^3\right)-\ln N+1\right)$

פתרון: החישוב יתבסס על צבר קנוני. מהקשר F=E-TS ניתן לחלץ S=(E-F)/T. את E ו F נמצא באמצעות פונקציית החלוקה:

$$F=-k_BT\ln(Z(T,N,V)),\quad E=-\frac{\partial}{\partial\beta}\ln(Z(T,N,V))$$

$$Z(T,N,V)=\frac{1}{N!\hbar^{3N}}\left(\iiint dxdydz\iiint dp_xdp_ydp_ze^{-\beta(p_x^2+p_y^2+p_z^2)/2m}\right)^N=\frac{V^N}{N!\hbar^{3N}}\left(\int dp_xe^{-\beta p_x^2/2m}\right)^{3N}$$

נשתמש בקשר: $\int_{-\infty}^{\infty}e^{-ax^2}dx=\sqrt{\frac{\pi}{a}}$ בשביל לקבל:

$$Z(T,N,V)=\frac{V^N}{N!\hbar^{3N}}\left(\sqrt{2\pi mk_BT}\right)^{3N}=\frac{V^N}{N!}\left(\sqrt{\frac{2\pi mk_BT}{\hbar^2}}\right)^{3N}$$

תחילה נחשב את האנרגיה הממוצעת:

$$E=-\frac{\partial}{\partial\beta}\ln(Z(T,N,V))=-\frac{\partial}{\partial\beta}\ln(Z(T,N,V))=\frac{3}{2}Nk_BT$$

כצפוי על פי תיאוריית החלוקה השווה. עתה נחשב את F:

$$F=-k_BT\ln(Z(T,N,V))=-k_BT\ln\left(\frac{V^N}{N!}\left(\sqrt{\frac{2\pi mk_BT}{\hbar^2}}\right)^{3N}\right)=$$

$$-k_BTN\left(\ln\left(V\left(\frac{2\pi mk_BT}{\hbar^2}\right)^3\right)-\ln N+1\right)$$

ניעזר בשתי התוצאות הקודמות על מנת לחשב את S :

$$S=(E-F)/T=k_BN\left(\frac{3}{2}+\ln\left(V\left(\frac{2\pi mk_BT}{\hbar^2}\right)^3\right)-\ln N+1\right)$$

ולכן ד' היא התשובה הנכונה.

<u>שאלה 3 (6 נקודות):</u>

מקררים את הגז שבשאלה הקודמת ומצמדים אותו בנוסף לאמבט חלקיקים עם פוטנציאל כימי μ. ידוע כי הספין בערכו המוחלט של כל אטום הוא 5/2. האנרגיה של הגז פרופורציונלית לביטוי הבא :

א. $V\int_0^\infty \varepsilon^{3/2}\frac{d\varepsilon}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_BT}+1}$

ב. $V\int_0^\infty \varepsilon^{3/2}\frac{d\varepsilon}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_BT}-1}$

ג. $V\int_0^\infty \varepsilon^{1/2}\frac{d\varepsilon}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_BT}+1}$

ד. $\frac{3}{2}Nk_BT$

פתרון : כאשר מקררים את הגז הוא הופך מגז קלסי לגז קוונטי. מכיוון שהספין של כל אטום הוא אי זוגי, הגז הוא גז פרמיוני המציית להתפלגות פרמי דיראק. מכיוון שנתון כי יחס הדיספרסיה הוא פרבולי בשלושה מימדים אנחנו מייד יודעים כי צפיפות המצבים מתכונתית לשורש האנרגיה ולנפח, ולכן האנרגיה הכוללת של הגז תהיה מתכונתית לביטוי הבא :

$$V\int_0^\infty DOS(\varepsilon)\cdot\varepsilon\frac{d\varepsilon}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_BT}+1}=V\int_0^\infty \varepsilon^{3/2}\frac{d\varepsilon}{e^{(\varepsilon-\mu)/k_BT}+1}$$

ולכן א׳ היא התשובה הנכונה.

<u>שאלה 4 (6 נקודות):</u>

נתונה שרשרת של N קפיצים הרמונים קוונטיים חד מימדיים הרוטטים בכיוון ציר X ללא אינטראקציה ביניהם. השרשרת מצומדת לאמבט חום בטמפרטורה T. לכל קפיץ יש מסה M וקבוע קפיץ K ($\omega=\sqrt{K/M}$). רשמו ביטוי לאנרגיה של שרשרת הקפיצים (אפשר להתייחס לכל קפיץ בודד כמו לפוטון):

א. $N\int_0^\infty \frac{\hbar d\omega}{e^{\hbar\omega/k_BT}-1}$

ב. $N\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_BT}-1}$

ג. $N\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_BT}+1}$

ד. Nk_BT

פתרון: מכיוון שאין אינטראקציה בין המתנדים, אפשר לחשב את הגדלים על אטום מסויים ולכפול ב N. מתנד הרמוני הוא חלקיק בוזוני המציית לסטטיסטיקת בוזה-אינשטיין (כמו פוטון) לכן מספר הבוזונים במתנד נתון ע״י הקשר הבא:

$$\langle n\rangle=\frac{1}{e^{\hbar\omega/k_BT}-1}$$

ולכן האנרגיה הממוצעת של כל מתנד תהיה:

$$\langle E_0\rangle=\hbar\omega\cdot\langle n\rangle=\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_BT}-1}$$

והאנרגיה של כל השרשרת תהיה:

$$\langle E\rangle=N\langle E_0\rangle=\frac{N\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_BT}-1}$$

ולכן, ב׳ היא התשובה הנכונה.

שאלה 5 (6 נקודות):

כעת מחממים את השרשרת שבבעיה הקודמת כך שהאנרגיה התרמית יותר גדולה מכל אנרגיה אחרת בבעיה.
רשמו ביטוי לממוצע המיקום בריבוע של כל קפיץ ($\langle X^2 \rangle$):

א. $\frac{\hbar\omega}{2K}\frac{1}{e^{\hbar\omega/k_BT}-1}$

ב. $\frac{k_BT}{K}$

ג. $\frac{1}{2K}\frac{\int_0^\infty \hbar\omega e^{-\hbar\omega/k_BT}d\omega}{\int_0^\infty e^{-\hbar\omega/k_BT}d\omega}$

ד. $\frac{2k_BT}{K}$

פתרון: יש שתי אנרגיות בבעיה. אנרגיה תרמית ואנרגיה פוטנציאלית. הביטוי לאנרגיה הוא הבא:

$$H = E_K + E_P = \frac{P_x^2}{2M} + \frac{1}{2}K\cdot X^2$$

אם האנרגיה התרמית יותר גבוהה מהאנרגיה הפוטנציאלית אזי מתקיים כי $k_BT \gg \hbar\omega$ ואז תיאוריית החלוקה השווה מתקיימת. מכיוון ששני האיברים של H ריבועיים בדרגות החופש, X ו P, נקבל כי:

$$\langle H \rangle = \langle E_K \rangle + \langle E_P \rangle = \frac{1}{2}k_BT + \frac{1}{2}k_BT$$

כלומר, $\langle E_P \rangle = \frac{1}{2}K\langle X^2 \rangle = \frac{1}{2}k_BT \Rightarrow \langle X^2 \rangle = \frac{k_BT}{K}$

ולכן, תשובה ב' היא הנכונה.

חלק 2 (70 נקודות + 10 נקודות בונוס)

שאלה 6 (35 נקודות + 5 נקודות בונוס)

נתונות 2 מערכות מוליכות, אחת תלת-ממדית והשנייה דו-ממדית המכילות אלקטרונים עם ספין $1/_2$. יחסי הדיספרסיה של האלקטרונים במערכת התלת-ממדית והדו-ממדית בהתאמה הם :

$$\varepsilon_{3D}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_x}k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m_y}k_y^2 + \frac{\hbar^2}{2m_z}k_z^2$$

$$\varepsilon_{2D}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_0}k_x^2 + \frac{\hbar^2}{2m_0}k_y^2$$

כאשר נתון שהמסות האפקטיביות מקיימות $m_x, m_y, m_y > 0$ ו- $m_0 > 0$.

(א) חשבו את צפיפות המצבים ליחידת נפח $g_{3D}(\varepsilon_{3D})$ של המערכת הראשונה ואת צפיפות המצבים ליחידת שטח $g_{2D}(\varepsilon_{2D})$ של המערכת השנייה. (8 נקודות)
כלי עזר – נפח אליפסואיד תלת ממדי שמתואר ע״י המשוואה $\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{b^2} + \frac{z^2}{c^2} = 1$ הוא $\frac{4}{3}\pi abc$.

(ב) נתון שצפיפות האלקטרונים במערכת הראשונה היא n_{3D} ובמערכת השנייה n_{2D}. חשבו את אנרגיית פרמי של כל אחת מהמערכות. (7 נקודות)

(ג) כעת מחברים את שתי המערכות בעזרת תיל מוליך המאפשר החלפת אלקטרונים. שומרים על $T = 0$ בשתי המערכות. מצאו את הקשר בין הצפיפויות n_{3D} ו- n_{2D} החדשות המתקבלות לאחר חיבור שתי המערכות (אין צורך למצוא את n_{3D} ו- n_{2D} בנפרד). (10 נקודות)

(ד) אחרי הגעה לשיווי משקל, מסירים את החיבור בין שתי המערכות. עכשיו נתמקד במערכת הראשונה (התלת-ממדית). נתון שצפיפות האלקטרונים היא n_{3D} והזמן האופייני לפיזור של האלקטרון בתוך החומר הוא τ. חשבו את מטריצת המוליכות החשמלית הנתונה לפי מודל דרודה $\sigma = n_{3D}e^2\tau m^{-1}$. (5 נקודות)

(ה) מפעילים שדה חשמלי $\vec{E} = E\hat{x}$ על המערכת מהסעיף הקודם וכתוצאה מכך מקבלים צפיפות זרם $\vec{J}$ בתוך החומר. מהי הזווית בין הזרם לשדה? (5 נקודות)

(ו) **בונוס** – מפעילים שדה מגנטי $\vec{B}$ בכיוון $\hat{z}$ על המערכת הדו-ממדית. יחס הדיספרסיה נתון ע״י הביטוי הבא (ללא אינטראקציית זימן):

$$\varepsilon_{2D}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_0}(k_x + \frac{e}{\hbar}A_x)^2 + \frac{\hbar^2}{2m_0}(k_y + \frac{e}{\hbar}A_y)^2$$

כאשר $\vec{A} = (A_x, A_y)$ הוא הפוטנציאל הוקטורי והשדה המגנטי הוא $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$.

מהו הקשר בין צפיפות המצבים כאשר $\vec{B}=0$ שחישבתם בסעיף א' לבין צפיפות המצבים כאשר $\vec{B}\neq 0$. תנו הסבר איכותי מבלי לעשות חישוב. (5 נקודות)

פתרון :

(א) נחשב את צפיפות המצבים עבור המערכת התלת-ממדית :

נסדר את המשוואה של יחס הדיפרסיה : $1=\frac{k_x^2}{(\frac{2m_x\varepsilon}{\hbar^2})}+\frac{k_y^2}{(\frac{2m_y\varepsilon}{\hbar^2})}+\frac{k_z^2}{(\frac{2m_z\varepsilon}{\hbar^2})}$

המשטחים שווה אנרגיה הם השפה של אלפסואיד עם הצירים הראשיים :

$$a=\sqrt{\frac{2m_x\varepsilon}{\hbar^2}},b=\sqrt{\frac{2m_y\varepsilon}{\hbar^2}},c=\sqrt{\frac{2m_z\varepsilon}{\hbar^2}}$$

לכן צפיפות המצבים ליחדת נפח תהיה :

$$g_{3D}(\varepsilon)=\frac{d}{d\varepsilon}\left(\frac{4}{3}\pi\sqrt{\frac{2m_x\varepsilon}{\hbar^2}}\sqrt{\frac{2m_y\varepsilon}{\hbar^2}}\sqrt{\frac{2m_z\varepsilon}{\hbar^2}}\right)2\frac{1}{(2\pi)^3}$$

כאשר גזרנו את נפח האליפסואיד לפי הנוסחה הנתונה, 2 זה הספין של אלקטרון וחילקנו ב $(2\pi)^3$ שזה נפח של מצב במרחב התנע כפול נפח המערכת.

מכאן : $g_{3D}(\varepsilon)=\frac{\sqrt{2m_xm_ym_z}}{\pi^2\hbar^3}\varepsilon^{1/2}$

צפיפות המצבים עבור מערכת דו-ממדית עם יחס דיפרסיה שבו המסות זהות עבור שני הצירים כבר חישבנו בכיתה : $g_{2D}(\varepsilon)=\frac{m}{\pi\hbar^2}$

(ב) אנרגית פרמי עבור כל מערכת כאשר צפיפויות האלקטרונים נתונות הן :

המערכת התלת-ממדית:

$$n_{3D}=\int_0^{\varepsilon_F^{3D}}g_{3D}(\varepsilon)\,d\varepsilon=\frac{\sqrt{2m_xm_ym_z}}{\pi^2\hbar^3}\int_0^{\varepsilon_F^{3D}}\varepsilon^{1/2}\,d\varepsilon=\frac{\sqrt{2m_xm_ym_z}}{\pi^2\hbar^3}\frac{(\varepsilon_F^{3D})^{3/2}}{(3/2)}$$

$$\varepsilon_F^{3D}=\frac{\hbar^2}{2(m_xm_ym_z)^{1/3}}(3\pi^2n_{3D})^{2/3}$$

שימו לב, שאם מציבים שהמסות בצירים השונים שוות $m_x = m_y = m_z = m$, אז נקבל בחזרה את צפיפות המצבים ואנרגית פרמי עבור יחס דיספרסיה פרבולי תלת-ממדי שראינו בכיתה :

$$\varepsilon_{3D}(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right) \xrightarrow{yields} g_{3D}(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2}m^{\frac{3}{2}}}{\pi^2\hbar^3}\varepsilon^{\frac{1}{2}}$$

$$\varepsilon_F^{3D} = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n_{3D})^{2/3}$$

המערכת הדו-ממדית :

$$n_{2D} = \int_0^{\varepsilon_F^{2D}} g_{2D}(\varepsilon)\, d\varepsilon = \frac{m}{\pi\hbar^2}\int_0^{\varepsilon_F^{2D}} d\varepsilon = \frac{m}{\pi\hbar^2}\varepsilon_F^{2D}$$

$$\varepsilon_F^{2D} = \frac{\pi\hbar^2}{m} n_{2D}$$

(ג) במצב של שיווי משקל תרמודינמי, לפי הצבר הגרנד קנוני (כאשר 2 מערכות יכולות להחליף חלקיקים ביניהן), יש שוויון בין הטמפרטורות והפוטנציאלים הכימיים של שתי המערכות.
כאשר הטמפרטורה היא אפס, זה אומר שיש שוויון בין אנרגיות פרמי של שתי המערכות :

$$\varepsilon_F^{2D} = \varepsilon_F^{3D}$$

$$\frac{\pi\hbar^2}{m} n_{2D} = \frac{\hbar^2}{2(m_x m_y m_z)^{1/3}}(3\pi^2 n_{3D})^{2/3}$$

$$n_{2D} = \frac{m}{2\pi(m_x m_y m_z)^{1/3}}(3\pi^2 n_{3D})^{2/3}$$

(ד) נחשב את מטריצת המסה האפקטיבית של יחס הדיספרסיה התלת-ממדי :

$$m_{ij}^{-1} = \frac{\partial^2 \varepsilon(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j}$$

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

מכאן, מטריצת המוליכות החשמלית לפי מודל דרודה היא :

$$\sigma = ne^2\tau m^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{ne^2\tau}{m_x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{ne^2\tau}{m_y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{ne^2\tau}{m_z} \end{pmatrix}$$

(ה) כאשר נתון שדה חשמלי $\vec{E} = E\hat{x}$ שמופעל על המערכת, לפי חוק אוהם המיקרוסקופי, צפיפות הזרם היא:

$$\vec{J} = \sigma\vec{E}$$

$$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \\ J_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{ne^2\tau}{m_x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{ne^2\tau}{m_y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{ne^2\tau}{m_z} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{ne^2\tau}{m_x}E \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

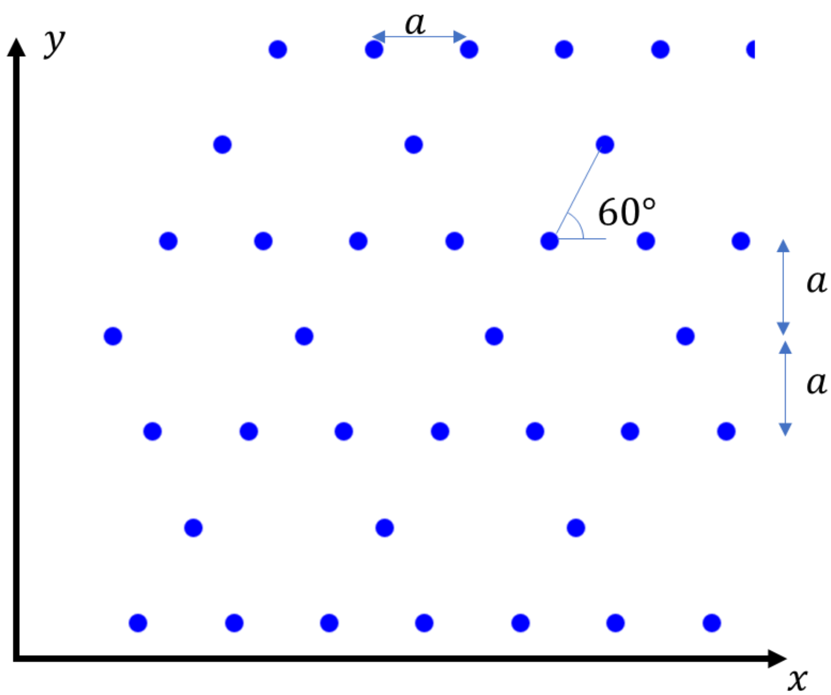
$$\vec{J} = \frac{ne^2\tau}{m_x}E\hat{x} = \frac{ne^2\tau}{m_x}\vec{E}$$

כאשר נתון שכל המסות האפקטיביות הן חיוביות, לכן הזרם מושרה באותו כיוון של השדה והזווית ביניהם היא אפס.

(ו) מה שהשדה המגנטי עושה ליחס הדיספרסיה הדו-ממדי זה הזזה של מרכז המעגלים שהם קווי שווה אנרגיה במישור $k_x - k_y$, בחישוב של צפיפות המצבים כל מה שמעניין אותנו זה השטח שנמצא בתוך קווי שווה. שטח זה לא משתנה עקב הזזה של מרכז המעגל, לכן צפיפות המצבים לא תשתנה מזאת שחישבנו בסיף א עבור היעדרות של שדה מגנטי.

<u>שאלה 7 (35 נקודות + 5 נקודות בונוס)</u>

נתון גביש הבא :



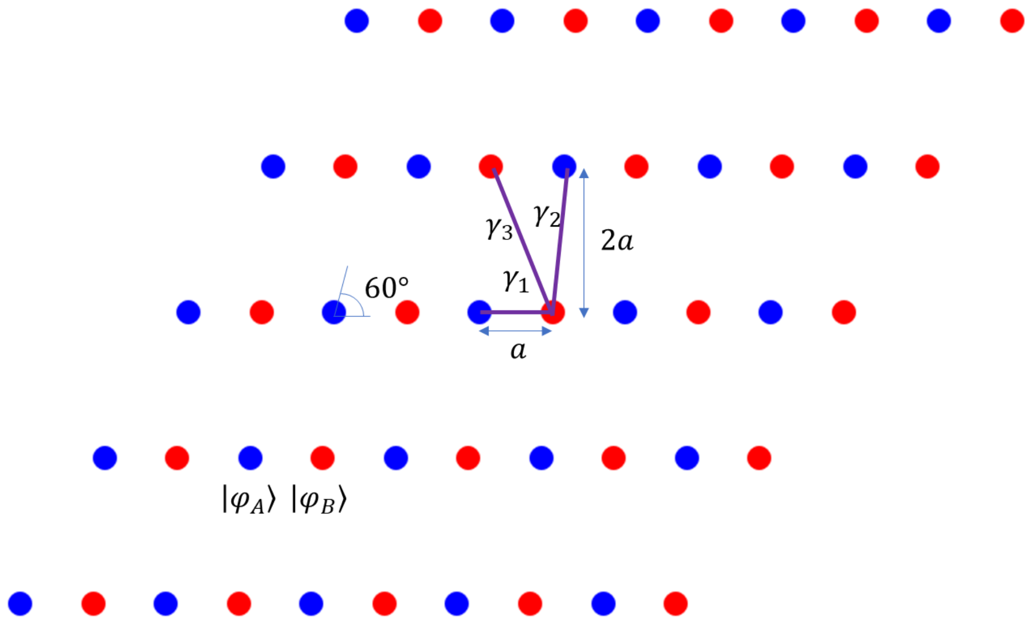
א. **(5 נק')** רשמו וקטורים ראשוניים ווקטורי הבסיס.

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

ג. **(5 נק')** מצאו את הווקטורים של שריג ההופכי וציירו אותו. ציירו את איזור Brillouin הראשון.

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

כעת נתון הגביש הבא :



ה. **(5 נק')** מצאו את מבנה הפסים בעזרת שיטת קשירה הדוקה בהנחה שהצימוד בין השכנים הוא $\gamma_1 = \gamma, \gamma_2 = 0.5\gamma, \gamma_3 = 0.25\gamma$ ואנרגיה של האורביטלים הינה $E_A = E_0$ ו-$E_B = E_A$ בהתאמה. **התייחסו רק לשכנים עם הצימוד γ_1 ו-γ_2.**

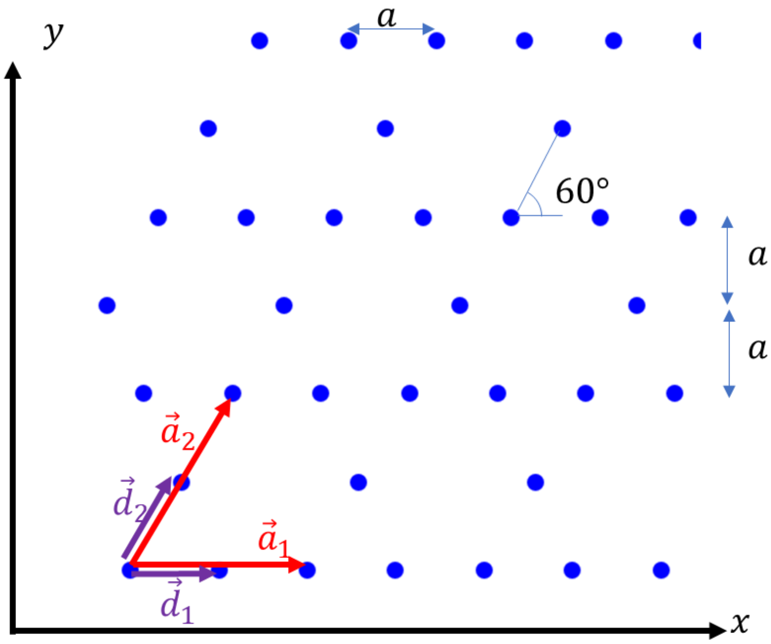
ו. **(5 נק')** קבלו ביטוי M^{-1} (טנזור ההופכי של המסה האפקטיבית) במינימום המוחלט של האנרגיה.

ז. **(5 נק')** לו היינו לוקחים בחשבון גם צימוד לשכנים עם קבוע צימוד γ_3 מהו מספר פסי אנרגיה שהיינו מקבלים?

ח. (בונוס **5 נק'**) כעת מפעילים שדה חשמלי מהצורה $\boldsymbol{E} = E_0\hat{x}$ כתבו ביטוי לווקטור גל $\boldsymbol{k}(t)$ והמהירות $\boldsymbol{v}(t)$ של האלקטרונים הנמצאים במינימום המוחלט של האנרגיה. הניחו שזמן קצר בהרבה מזמן בין הפיזורים $t \ll \tau$. בנוסף הניחו שהאלקטרונים לא סוטים מהותית המנוקדות מינימום של אנרגיה. כמו כן נתון ש-$\boldsymbol{v}(0) = 0, \boldsymbol{k}(0) = 0$

פתרון

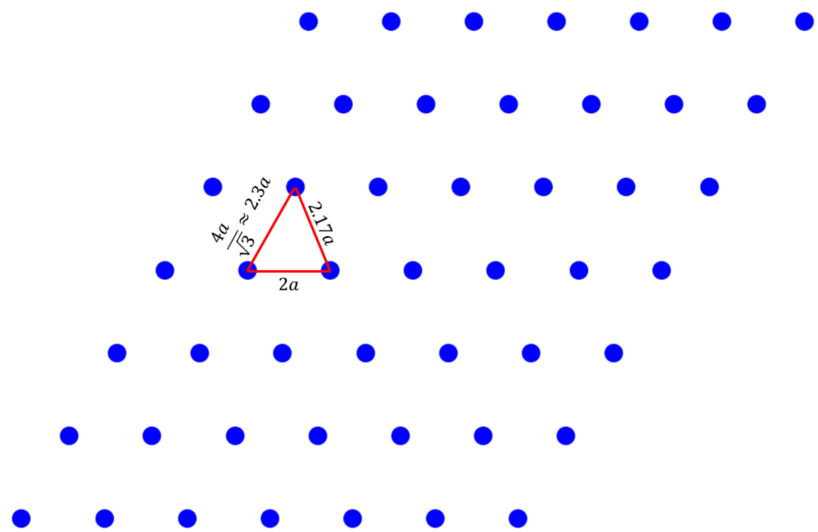
א. דוגמא לווקטורים ראשוניים ווקטורי בסיס :



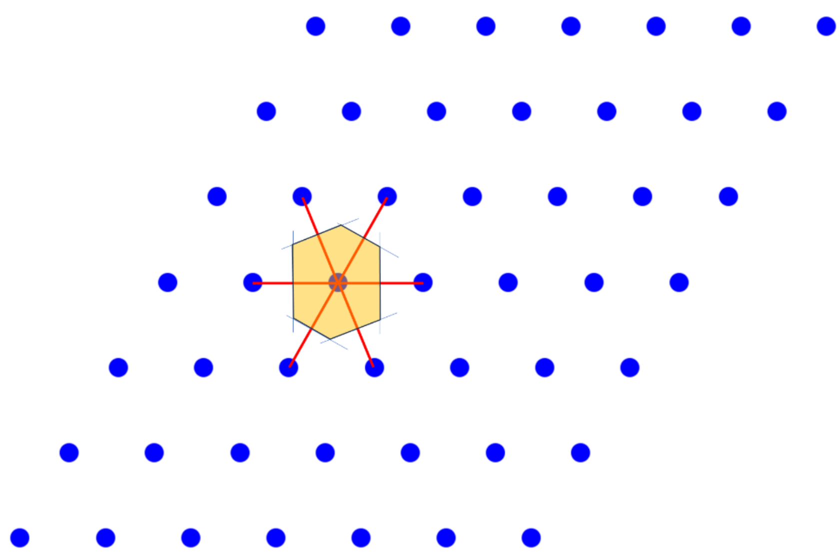
$$\vec{a}_1 = 2a\hat{x}$$
$$\vec{a}_2 = \frac{2a}{\sqrt{3}}\hat{x} + 2a\hat{y}$$

$$\vec{d}_1 = a\hat{x}$$
$$\vec{d}_2 = \frac{a}{\sqrt{3}}\hat{x} + a\hat{y}$$
$$\vec{d}_3 = 0$$

השריג המתקבל הינו מהצורה :



כאשר תא Wigner Seitz הינו מהצורה



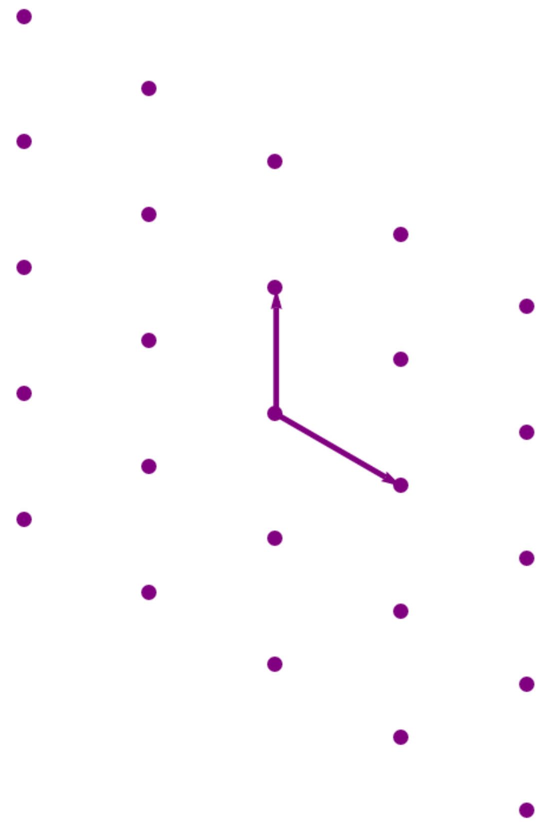
ב. תחילה נמצא את שטחו של תא היחידה הנפרש על ידי וקטורים ראשוניים

$$S = |\vec{a}_1 \times \vec{a}_2| = \left|2a\hat{x} \times \left(\frac{2a}{\sqrt{3}}\hat{x} + 2a\hat{y}\right)\right| = 4a^2$$

$$\vec{b}_1 = 2\pi\frac{\vec{a}_2 \times \hat{z}}{S} = 2\pi\frac{\left(\frac{2a}{\sqrt{3}}\hat{x} + 2a\hat{y}\right) \times \hat{z}}{4a^2} = \left(\frac{\pi}{a}\hat{x} - \frac{\pi}{\sqrt{3}a}\hat{y}\right)$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi\frac{\hat{z} \times \vec{a}_1}{S} = 2\pi\frac{\hat{z} \times 2a\hat{x}}{4a^2} = 2\pi\left(0\hat{x} + \frac{1}{2a}\hat{y}\right) = \frac{\pi}{a}\hat{y}$$

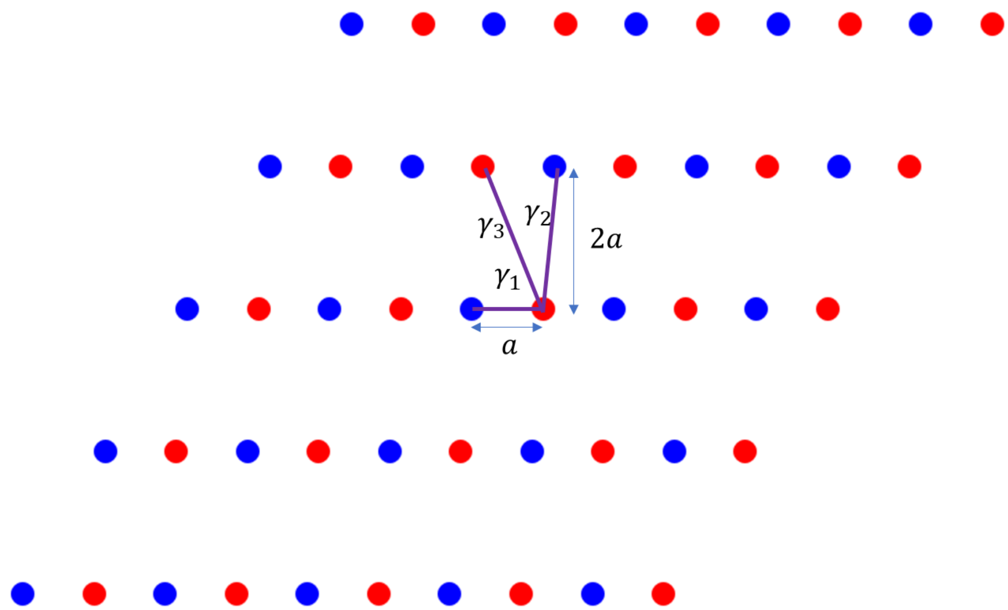
השריג המתקבל יחד עם תא יחידה הראשוני (שאוני תא WS מוצג באיור מטה



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

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

ג. 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.

$$\vec{\delta}_{1,2} = \pm a\hat{x}$$

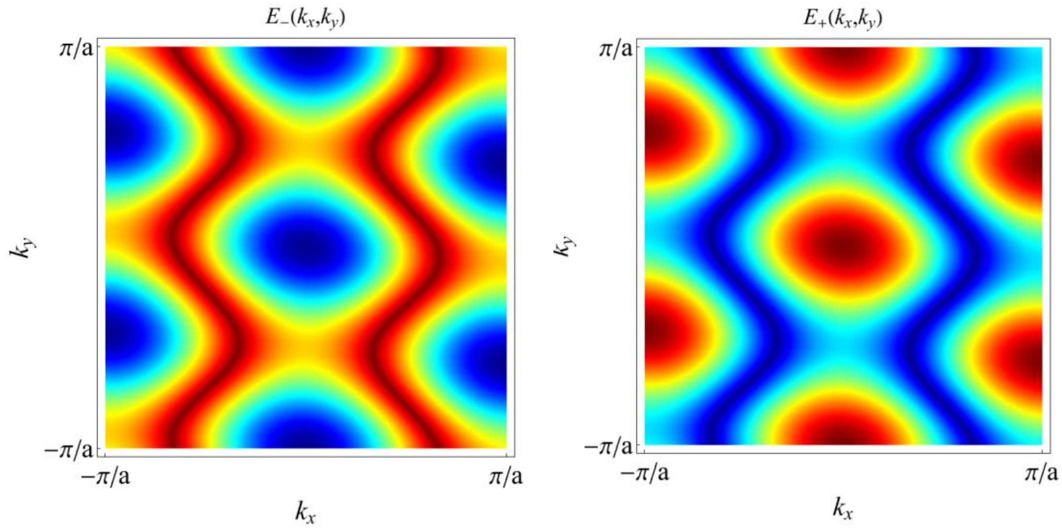
$$\vec{\delta}_3 = \left(\frac{2}{\sqrt{3}} - 1\right) a + 2a\hat{y}$$

$$\vec{\delta}_4 = -\left(\frac{2}{\sqrt{3}} - 1\right) a - 2a\hat{y}$$

$$\Omega = \sum_{n.n.} e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_{nn}} = 2\left(\gamma_1 \cos(k_x a) + \gamma_2 \cos\left(\left(\frac{2}{\sqrt{3}} - 1\right) k_x a - 2k_y a\right)\right)$$

$$= 2\gamma_0 \cos(k_x a) + \gamma_0 \cos\left(\left(\frac{2}{\sqrt{3}} - 1\right) k_x a - 2k_y a\right)$$

$$E_\pm(k_x, k_y) = E_0 \pm \gamma_0 \left|2\cos(k_x a) + \cos\left(\left(\frac{2}{\sqrt{3}} - 1\right) k_x a - 2k_y a\right)\right|$$



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

$$E_-(k_x,k_y) = E_0 - \gamma_0 \left| 2\cos(k_x a) + \cos\left(\left(\frac{2}{\sqrt{3}} - 1\right) k_x a - 2k_y a\right) \right|$$
$$= E_0 - 2\gamma_0 \cos(k_x a) - \gamma_0 \cos\left(\left(\frac{2}{\sqrt{3}} - 1\right) k_x a - 2k_y a\right)$$

$$M_{xx}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2}{\partial k_x^2} = \frac{\gamma_0 a^2}{\hbar^2}\left(2 + \left(\frac{2}{\sqrt{3}} - 1\right)^2\right)$$
$$M_{yy}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2}{\partial k_y^2} = \frac{4\gamma_0 a^2}{\hbar^2}$$
$$M_{xy}^{-1} = M_{yx}^{-1} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{\partial^2}{\partial k_x k_y} = \frac{\gamma_0 a^2}{\hbar^2}\left(\frac{4}{\sqrt{3}} - 2\right)$$

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

ו. מכיוון שמודבר בזמנים הרבה יותר קטנים מהזמן הפיזור הממוצע, נוכל להשתמש במשווה סמי-קלאסי מהצורה

$$\hbar\dot{\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{F} = -q\boldsymbol{E}$$
$$\boldsymbol{k}(t) = -\frac{q}{\hbar}\boldsymbol{E}t$$

בכדי לחשב את וקטור המהירות נוכל להשתמש בהנחה שאין סטייה מהותית מנקודת המינימום של האנרגיה שבה המסה האפקטיבית הינה קבועה.

$$\dot{\boldsymbol{v}} = M^{-1}\boldsymbol{F}$$

$$\boldsymbol{v}(t)=\begin{pmatrix} \frac{\gamma_0 a^2}{\hbar^2}\left(2+\left(1-\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2\right) & \frac{\gamma_0 a^2}{\hbar^2}\left(\frac{4}{\sqrt{3}}-2\right) \\ \frac{\gamma_0 a^2}{\hbar^2}\left(\frac{4}{\sqrt{3}}-2\right) & \frac{4\gamma_0 a^2}{\hbar^2} \end{pmatrix}\binom{1}{0} qE_0 t$$

$$=\begin{pmatrix} 2+\left(1-\frac{2}{\sqrt{3}}\right)^2 \\ \frac{4}{\sqrt{3}}-2 \end{pmatrix}\frac{\gamma_0 a^2}{\hbar^2} qE_0 t$$

מהביטוי נסיק שכיוון התנועה אינו זהה לכיוון בו מופעל הכוח!

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 $\alpha>0,n\geq 0$
$I(n)\equiv\int_0^\infty x^n e^{-\alpha x^2}dx=\frac{1}{2}\Gamma\left(\frac{n+1}{2}\right)\alpha^{-\frac{n+1}{2}}$ $\int_{-\infty}^{\infty}x^n e^{-\alpha x^2}dx=\begin{cases}2I(n) & n\in Even\\ 0 & n\in Odd\end{cases}$

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