אלקטרוניקה פיזיקלית 044124
סמסטר חורף 2020
מועד א' - פתרון

הנחיות

1. משך הבחינה ־ שלוש שעות.

2. בבחינה 3 שאלות. בידקו כי ברשותכם 6 עמודים כולל עמוד זה.

3. ניתן להשתמש בחומר עזר מכל סוג שהוא כולל מחשבונים פרט לציוד תקשורת אלקטרוני (מחשב, טאבלט, טלפון וכו').

4. יש להגיש את מחברת הבחינה בלבד.

5. כיתבו בכתב יד ברור.

6. תשובות לא מנומקות לא תתקבלנה.

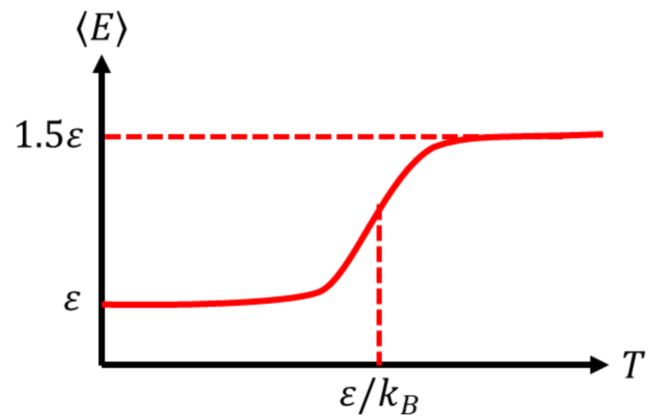
7. אנא ודאו שרשמתם את מספר תעודת הזהות על מחברת הבחינה.

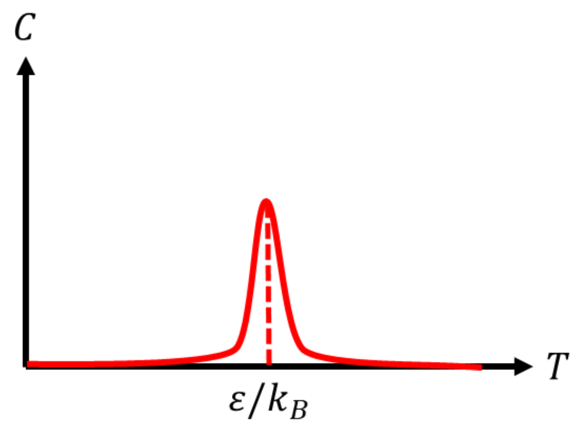
שאלה מספר 1 (25 נקודות):

(עבור סעיף 1 בלבד) נתונה מערכת בת 2 רמות, $E_1=\varepsilon, E_2=2\varepsilon$ וחלקיק יחיד.

א. **(4 נק')** - שרטטו גרף איכותי (אין צורך לחשב בסעיף זה) של האנרגיה הממוצעת וקיבול החום, כתלות בטמפרטורה והסבירו את הסיבות הפיסיקליות לגרפים שהתקבלו – כולל נקודות קיצון וגבול של $T\to 0$ ו- $T\to\infty$

להלן שרטוטים של הגרפים המתקבלים:





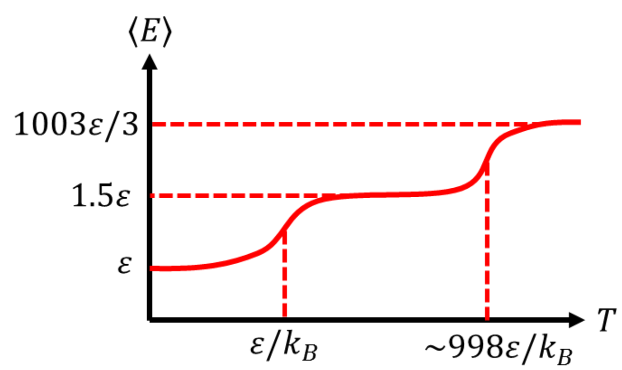
עבור האנרגיה הממוצעת, בטמפרטורות נמוכות מאוד המערכת תימצא ברמה הנמוכה ביותר בעוד שבטמפרטורות גבוהות נצפה להסתברות שווה להימצא בכל אחת מהרמות ולכן האנרגיה הממוצעת תשאף לממוצע של שתי הרמות הקיימות. קיבול החום מתקבל מגזירה של הגרף של האנרגיה הממוצעת לפי הטמפרטורה, אולם גם אותו אנו יודעים לפרש: בטמפרטורות נמוכות קיבול החום חייב לשאוף לאפס לפי החוק השלישי בעוד שבטמפרטורות גבוהות המערכת לא מסוגלת לאגור יותר אנרגיה ולכן גם שם הוא שואף לאפס, כאשר בין לבין נצפה לקיומו של קיבול חום השונה מאפס עקב מעבר בין שתי רמות האנרגיה.

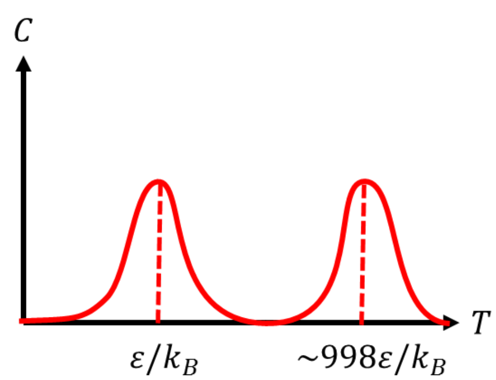
(עבור סעיפים ב-ה) נתונה מערכת בת 3 רמות, $E_1=\varepsilon, E_2=2\varepsilon, E_3=1000\varepsilon$ וחלקיק יחיד.

ב. **(7 נק')** - שרטטו גרף איכותי (אין צורך לחשב בסעיף זה) של האנרגיה הממוצעת וקיבול החום, כתלות בטמפרטורה והסבירו את הסיבות הפיסיקליות לגרפים שהתקבלו - כולל נקודות קיצון וגבול של $T\to 0$ ו- $T\to\infty$

רמז: שימו לב להבדל של 3סדרי גודל בין E_1,E_2 לבין E_3

במקרה הנ"ל נקבל הרחבה של הגרפים אותם ציירנו בסעיף הקודם עבור טמפרטורות גבוהות יותר. למעשה נקבל מעבר נוסף עבור האנרגיה הממוצעת של המערכת וכן שיא נוסף בקיבול החום. להלן דוגמה איכותית:





נעיר כי הגרפים עצמם לא מציגים את הסקאלה האמיתית, למשל המעבר הראשון באנרגיה הממוצעת הינו הרבה יותר קטן והרבה יותר רחוק מהמעבר השני.

ג. **(4 נק')** - מהי פונקציית החלוקה של המערכת?

פונקציית החלוקה של המערכת תהיה :

$$Z = e^{-\beta\varepsilon} + e^{-2\beta\varepsilon} + e^{-1000\beta\varepsilon}$$

ד. **(4 נק')** - מהי האנרגיה הממוצעת של המערכת?

נקבל את האנרגיה הממוצעת של המערכת לפי הגדרה :

$$\langle E \rangle = \frac{\varepsilon e^{-\beta\varepsilon} + 2\varepsilon e^{-2\beta\varepsilon} + 1000\varepsilon e^{-1000\beta\varepsilon}}{e^{-\beta\varepsilon} + e^{-2\beta\varepsilon} + e^{-1000\beta\varepsilon}}$$

ה. **(6 נק')** - מהו קיבול החום של המערכת?

נקבל את קיבול החום של המערכת מגזירת האנרגיה הממוצעת לפי הטמפרטורה :

$$C \triangleq \frac{d\langle E \rangle}{dT} = \frac{d}{dT}[(\varepsilon e^{-\varepsilon/k_BT} + 2\varepsilon e^{-2\varepsilon/k_BT} + 1000\varepsilon e^{-1000\varepsilon/k_BT})(e^{-\varepsilon/k_BT} + e^{-2\varepsilon/k_BT} + e^{-1000\varepsilon/k_BT})^{-1}] =$$

$$= [(\frac{\varepsilon^2}{k_BT^2} e^{-\varepsilon/k_BT} + \frac{4\varepsilon^2}{k_BT^2} e^{-2\varepsilon/k_BT} + \frac{1000^2\varepsilon^2}{k_BT^2} e^{-1000\varepsilon/k_BT})(e^{-\varepsilon/k_BT} + e^{-2\varepsilon/k_BT} + e^{-1000\varepsilon/k_BT})^{-1}] +$$

$$-[(\varepsilon e^{-\varepsilon/k_BT} + 2\varepsilon e^{-2\varepsilon/k_BT} + 1000\varepsilon e^{-1000\varepsilon/k_BT})(e^{-\varepsilon/k_BT} + e^{-2\varepsilon/k_BT} + e^{-1000\varepsilon/k_BT})^{-2}(\frac{\varepsilon}{k_BT^2} e^{-\varepsilon/k_BT} + \frac{2\varepsilon}{k_BT^2} e^{-2\varepsilon/k_BT} + \frac{1000\varepsilon}{k_BT^2} e^{-1000\varepsilon/k_BT})] =$$

$$= \frac{\varepsilon^2}{k_BT^2}(e^{-\varepsilon/k_BT} + e^{-2\varepsilon/k_BT} + e^{-1000\varepsilon/k_BT})^{-1}[(e^{-\varepsilon/k_BT} + 4e^{-2\varepsilon/k_BT} + 1000^2 e^{-1000\varepsilon/k_BT}) - (e^{-\varepsilon/k_BT} + 2e^{-2\varepsilon/k_BT} + 1000e^{-1000\varepsilon/k_BT})^2(e^{-\varepsilon/k_BT} + e^{-2\varepsilon/k_BT} + e^{-1000\varepsilon/k_BT})^{-1}]$$

שאלה מספר 2 (37 נקודות):

נתון שריג דו-מימדי ריבועי המכונה שריג A המכיל N_a אתרים (המסודרים לפי המבנה הריבועי). כאשר אטום נמצא באתר המיועד לו האנרגיה של האטום היא אפס, וכאשר האטום לא נמצא באתר המיועד לו (למשל נמצא בין אתרים) האנרגיה של אותו אתר היא $\varepsilon_0 > 0$ ולשריג יש פגם באתר החסר. השריג מבודד לחלוטין מהסביבה ונתון כי האנרגיה שלו היא $E = H_a$.

א. **(3 נק')** - כמה פגמים n_a יש בשריג A?

הצבר הוא צבר מיקרו-קנוני ולכן יש קשר חד ערכי בין מספר פגמים לאנרגיה. ידועה לנו סך האנרגיה של השריג ולכן נוכל לקשר בינה לבין מספר הפגמים n_a:

$$E = H_a = n_a \varepsilon_0 \Rightarrow n_a = H_a / \varepsilon_0$$

ב. **(5 נק')** - מהי האנטרופיה של השריג A? הניחו כי ניתן לעשות שימוש בקירוב סטירלינג.

על מנת לחשב את האנטרופיה של השריג, נבין מה יכול להשתנות בו. ישנם n_a פגמים אשר צריכים להסתדר בתוך N_a אתרי שריג. היות והמצבים האפשריים הם שאו שישנו פגם או שאין פגם, נוכל להשתמש בביטוי הקומבינטורי הבא:

$$\Omega(n_a) = \frac{N_a!}{n_a!\left(N_a - n_a\right)!}$$

חישוב זה דומה לחישוב שעשינו עבור מערכת המכילה חלקיקים עם ספין חצי (כלומר שישנו ספין "מעלה" וספין "מטה"). כעת נוכל להשתמש בהגדרת האנטרופיה ובנוסחת סטירלינג כדי לקבל את האנטרופיה של השריג:

$$S_a = k_B \ln(\Omega(n_a)) = k_B \ln\left(\frac{N_a!}{n_a!\left(N_a - n_a\right)!}\right) = k_B \ln(N_a!) - \ln(n_a!) - \ln(\left(N_a - n_a\right)!) \approx$$
$$\approx k_B\left(N_a \ln(N_a) - n_a \ln(n_a) - \left(N_a - n_a\right)\ln\left(N_a - n_a\right)\right)$$

הערה: שימו לב שלא מדובר כאן במוצק איינשטיין.

ג. **(5 נק')** - מהי הטמפרטורה של השריג A? (רמז: שימו לב לקשר בין אנרגית השריג למספר הפגמים). הסבירו את התוצאה בגבולות של טמפרטורה נמוכה וגבוהה. הסבירו ביחס לאיזה גודל פיזיקלי הטמפרטורה גבוהה או נמוכה.

נעבוד לפי הגדרת הטמפרטורה אותה ראינו בקורס:

$$\frac{1}{T_a} \triangleq \frac{\partial S_a}{\partial E}$$

עלינו לגזור לפי האנרגיה ולכן נרצה להביע את האנרגיה כתלות במספר הפגמים בשריג, אולם אנו יודעים את הקשר הנ"ל:

$E = n_a \varepsilon_0$

לכן נוכל לבצע את המעבר הבא:

$$\frac{1}{T_a} \triangleq \frac{\partial S_a}{\partial E} = \frac{\partial S_a}{\varepsilon_0 \partial n_a} = \frac{k_B \partial}{\varepsilon_0 \partial n_a}\left(N_a \ln(N_a) - n_a \ln(n_a) - \left(N_a - n_a\right)\ln\left(N_a - n_a\right)\right) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \frac{\varepsilon_0}{k_B T_a} = -\ln(n_a) - n_a \frac{1}{n_a} + \ln\left(N_a - n_a\right) - \left(N_a - n_a\right) \cdot \frac{1}{N_a - n_a} \cdot (-1) =$$

$$= -\ln(n_a) - 1 + \ln\left(N_a - n_a\right) + 1 = \ln\left(\frac{N_a - n_a}{n_a}\right) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow T_a = \frac{\varepsilon_0}{k_B} \frac{1}{\ln\left(\frac{N_a - n_a}{n_a}\right)}$$

היחס $\frac{\varepsilon_0}{k_B}$ קבוע ולכן נבדוק מה קורה לביטוי הלוגריתמי כאשר הטמפרטורה קטנה מאוד או גדולה מאוד אליו. כאשר הטמפרטורה קטנה מאוד ($k_B T_a \ll \varepsilon_0$) המשמעות היא שהלוגריתם גדול. הדבר מתקיים עבור $n_a \ll N_a$. מדוע הדבר הגיוני? כאשר ישנם מעט פגמים בשריג, האנרגיה הכוללת במערכת גם היא מאוד קטנה ולכן גם הטמפרטורה. היות ואנו רוצים לדעת ביחס למה היא קטנה, נשווה לאנרגיה הטיפוסית הנוספת במערכת שהיא ε_0. כאשר הטמפרטורה גדולה מאוד ($k_B T_a \gg \varepsilon_0$), הלוגריתם צריך להיות קטן מאוד, כלומר ש- $n_a \approx N_a / 2$, כלומר שרוב השריג מלא בפגמים. במצב זה האנרגיה של המערכת הרבה יותר גדולה מהאנרגיה הטיפוסית ε_0.

ד. **(4 נק')** - קבלו ביטוי למספר הפגמים על סמך התוצאה הקודמת (הביטוי לטמפרטורה של המערכת). הסבירו את התוצאה.

מהקשר הקודם ניתן לקבל:

$$\frac{\varepsilon_0}{k_B T_a} = -\log(n_a) + \log\left(N_a - n_a\right) = \log\left(\frac{N_a - n_a}{n_a}\right) \quad \Rightarrow$$

$$\left(\frac{N_a - n_a}{n_a}\right) = \exp\left(\frac{\varepsilon_0}{k_B T_a}\right) = \exp\left(\beta_a \varepsilon_0\right) \quad \Rightarrow$$

$$N_a - n_a = n_a \exp\left(\beta_a \varepsilon_0\right) \quad \Rightarrow \quad N_a = n_a\left(1 + \exp\left(\beta_a \varepsilon_0\right)\right) \quad \Rightarrow$$

$$n_a = \frac{N_a}{\left(1 + \exp\left(\beta_a \varepsilon_0\right)\right)} = \frac{N_a}{1 + e^{\left(\frac{\varepsilon_0}{k_B T_a}\right)}}$$

כאשר הטמפרטורה של שריג A נמוכה בהרבה מאנרגיית הפגם, אין למערכת מספיק אנרגיה בכדי לייצר פגמים ונקבל שכמות הפגמים שואפת לאפס. כאשר הטמפרטורה עולה, ובפרט כאשר היא הרבה יותר גדולה מאשר אנרגיית הפגם, אז המערכת תרצה לאכלס בהסתברות זהה את הפגם ואת המקומות המסודרים – סידור כזה ממקסם את האנטרופיה וכמות הפגמים תשאף למחצית מכמות האתרים האפשריים.

כעת נתון שבאחד מצידי השריג A הוצמד שריג ריבועי דו-מימדי זהה ששמו שריג B. שריג זה זהה לשריג A ובעל N_b אתרים עם אנרגיה כוללת $E = H_b$. שני השריגים מבודדים לחלוטין מהסביבה ואחד מהשני.

ה. **(3 נק')** - כמה פגמים n_b יש בשריג B?

סעיף זה זהה לסעיף א'. הצבר הוא צבר מיקרו-קנוני ויש קשר חד ערכי בין מספר פגמים לאנרגיה. נקבל באותו האופן:

$$E = H_b = n_b \varepsilon_0 \Rightarrow n_b = H_b / \varepsilon_0$$

ו. **(3 נק')** - מהי האנטרופיה של שריג B?

באנלוגיה מוחלטת לשריג הראשון נקבל:

$$\Omega(n_b) = \frac{N_b!}{n_b!\left(N_b - n_b\right)!} \Rightarrow S_b = k_B \ln(\Omega(n_b)) \approx k_B\left(N_b \ln(N_b) - n_b \ln(n_b) - \left(N_b - n_a\right)\ln\left(N_b - n_b\right)\right)$$

ז. **(3 נק')** מהי הטמפרטורה של שריג B? מהו מספר הפגמים של השריג (העזרו שוב בביטוי עבור הטמפרטורה שמצאתם עבור שריג B)?

גם כאן, באנלוגיה לשריג הראשון, נקבל:

$$T_b = \frac{\varepsilon_0}{k_B} \frac{1}{\ln\left(\frac{N_b - n_b}{n_b}\right)}$$

ועבור מספר הפגמים:

$$n_b = \frac{N_b}{\left(1 + \exp\left(\beta_b \varepsilon_0\right)\right)} = \frac{N_b}{1 + e^{\left(\frac{\varepsilon_0}{k_B T_b}\right)}}$$

עתה מאפשרים לשני השריגים להיות מצומדים לאמבט תרמי חיצוני בטמפרטורה T (שריג A עם N_a אתרים ושריג B עם N_b אתרים).

ח. **(3 נק')** חשבו את מספר הפגמים הממוצע בשריג A ובשריג B. הסבירו את התוצאות.
בהינתן ששני השריגים מצומדים לאמבט תרמי חיצוני שהטמפרטורה שלו נתונה, מספר הפגמים הממוצע בכל שריג יהיה זהה לביטויים אותם חישבנו מקודם, רק שכעת הטמפרטורה של השריג מוכתבת מבחוץ ע"י האמבט התרמי:

$$\begin{cases} n_a = \dfrac{N_a}{1+e^{\left(\frac{\varepsilon_0}{k_B T}\right)}} \\ n_b = \dfrac{N_b}{1+e^{\left(\frac{\varepsilon_0}{k_B T}\right)}} \end{cases}$$

ט. **(3 נק')** חשבו את סך הפגמים הממוצע בשריגים A ו B ביחד ואת ממוצע האנרגיה המשותפת של A ו B ביחד.

מספר הפגמים הכולל יהיה הסכום של מספר הפגמים מהסעיף הקודם (היות והטמפרטורה נקבעת מבחוץ ע"י אמבט החום). ממוצע האנרגיה המשותפת קשור ביחס ישר למספר הפגמים. בסה"כ נקבל:

$$n_{total} = n_a + n_b = \frac{N_a + N_b}{1+e^{\left(\frac{\varepsilon_0}{k_B T}\right)}}$$

$$E_{total} = \varepsilon_0 n_a + \varepsilon_0 n_b = \frac{\varepsilon_0 (N_a + N_b)}{1+e^{\left(\frac{\varepsilon_0}{k_B T}\right)}}$$

י. **(5 נק')** מהי האנרגיה הממוצעת של כל אתר ב A או ב B והאם אפשר היה לקבל את התוצאה הזו בדרך קצרה יותר?

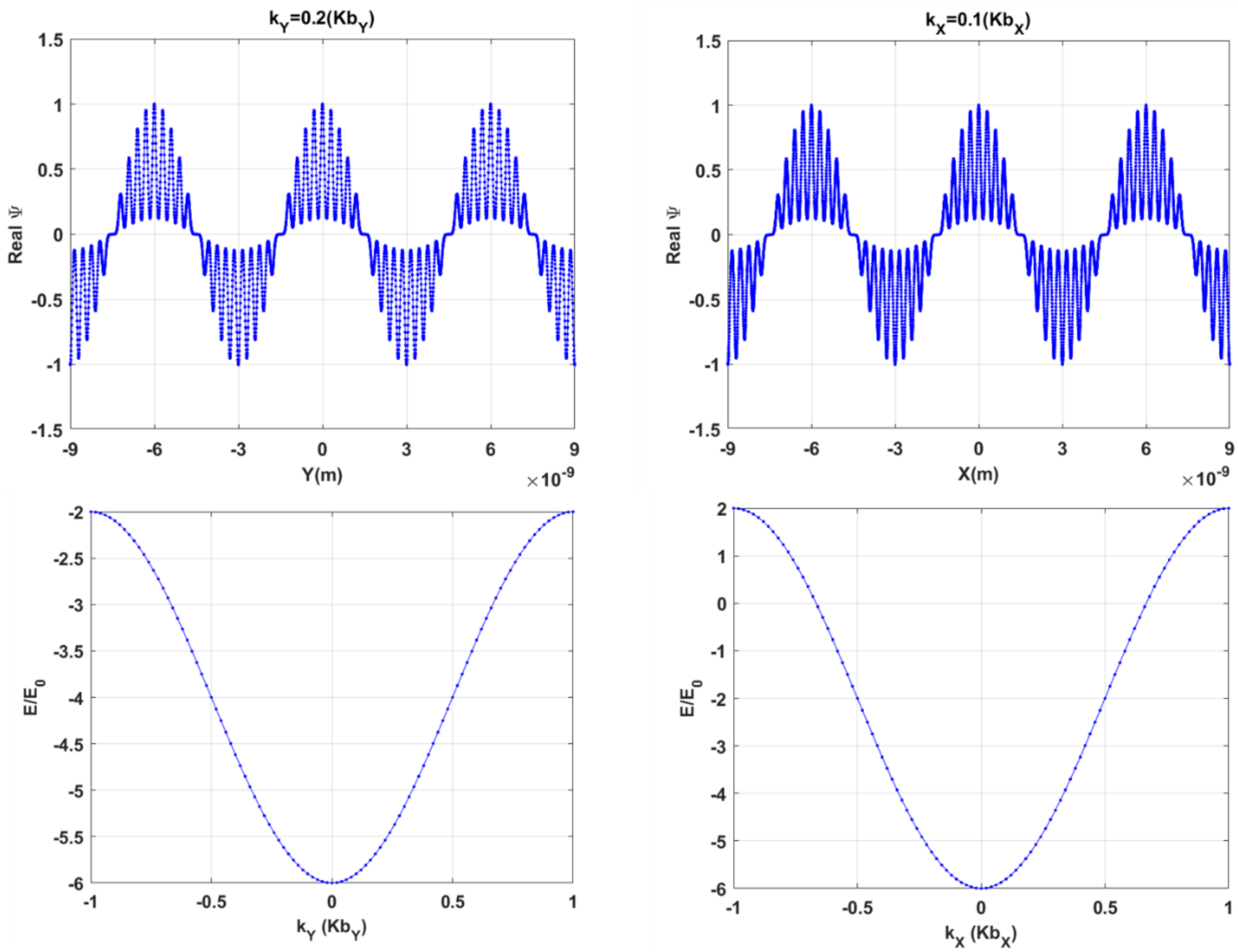
כל אתר בשריג (לא משנה איזה מהם) שקול למערכת 2 רמות כאשר הרמה הנמוכה מציינת שאין פגם ובעלת 0 אנרגיה בעוד שהרמה הגבוהה מציינת פגם ובעלת ε_0 אנרגיה. האנרגיה הממוצעת תהיה לכן:

$$\langle E \rangle = \frac{0 \cdot 1 + \varepsilon_0 e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_B T}}}{1+e^{-\frac{\varepsilon_0}{k_B T}}} = \frac{\varepsilon_0}{1+e^{\frac{\varepsilon_0}{k_B T}}}$$

ניתן כמובן לקבל את הביטוי הנ"ל מהתבוננות בביטוי לאנרגיה של כל שריג וחלוקה במספר האתרים בו. התוצאה המתקבלת כמובן זהה.

<u>שאלה מספר 3 (38 נקודות):</u>

נתון שריג ברווה דו-מימדי מלבני עם וקטורי שריג פרימיטיביים $\vec{a}_1 = a\hat{x}, \vec{a}_2 = b\hat{y}$ בו כל אתר שריג מכיל רמת אנרגיה אחת בלבד (רמת S) אותו נרצה לתאר לפי מודל הקשירה ההדוקה (Tight Binding). מצויירים החלק הממשי של פונקציות הגל כפונקציה של המרחק x או y. פונקציות הגל מחושבות עבור ערכי וקטור הגל המצוינים בראש השרטוט כאשר Kb_x או Kb_y מציינים את וקטורי הגל הגבישי המתאימים לקצה אזור ברילואן הראשון. בנוסף, נתונים פסי האנרגיה של השריג כפונקציה של וקטורי הגל הגבישי בכיוון k_x או k_y. פסי האנרגיה נתונים ביחידות של E_0 המקיים את הקשר הבא: $E_0 = \frac{\hbar^2 Kb_x^2}{2m_0}$ כאשר m_0 היא מסת האלקטרון החופשי.



א. **(6 נק')** - מצאו בעזרת הגרפים את קבועי השריג a,b.

ידוע לנו שפונקציות הגל המשורטטות בגרף מתארות גלים בקצה אזור ברילואן, כלומר שמדובר בגלים עומדים. עוד ידוע לנו שאלו הן פונקציות בלוך, כלומר שישנה פונקציה כלשהיא המאופננת על ידי אקספוננט:

$$\psi_{s,k}(x,y)=\sum_{\vec{R}} e^{ik_xX+ik_yY}\varphi_s(\vec{r}-\vec{R})$$

מהגרפים ניתן להסיק מהו אורך הגל של אותו אקספוננט וממנו ניתן להסיק מהו וקטור הגל. בשני הגרפים ניתן לראות ש-$\lambda=6\cdot10^{-9}[m]$, כלומר שבשני המקרים $k=\frac{2\pi}{\lambda}=\frac{2\pi}{6\cdot10^{-9}}[m^{-1}]$. נשים לב שעוד לא קיבלנו את k של קצה אזור ברילואן. יתקיים לפי הנתון בראש שני הגרפים:

$$\begin{cases} Kb_x\triangleq\frac{\pi}{a}=10k=10\cdot\frac{2\pi}{6\cdot10^{-9}} \\ Kb_y\triangleq\frac{\pi}{b}=5k=5\cdot\frac{2\pi}{6\cdot10^{-9}} \end{cases}\Rightarrow\begin{cases} a=\frac{6\cdot10^{-9}}{20}[m]=0.3[nm] \\ b=\frac{6\cdot10^{-9}}{10}[m]=0.6[nm] \end{cases}$$

ב. **(6 נק')** – כתבו את הביטוי לפס האנרגיה עבור השריג המדובר על פי מודל הקשירה ההדוקה וחלצו מהגרפים את ערכם של אינטגרלי החפיפה γ_x,γ_y. הביעו את תשובתכם כתלות בקבוע פלאנק, מסת האלקטרון וקבוע השריג (אין צורך לתת תשובה מספרית). אינטגרלי החפיפה מוגדרים באופן הבא:

$$\gamma_x=\langle\varphi_S(x,y)|U(x,y)|\varphi_S(x+a,y)\rangle=\int\varphi_S^*(x,y)U(x,y)\varphi_S(x+a,y)dxdy$$

$$\gamma_y=\langle\varphi_S(x,y)|U(x,y)|\varphi_S(x,y+a)\rangle=\int\varphi_S^*(x,y)U(x,y)\varphi_S(x,y+a)dxdy$$

ראינו בהרצאה/תרגול שמבנה הפסים הצפוי ממודל הקשירה ההדוקה הינו מהצורה הבאה:

$$E(k_x,k_y)=C-2\gamma_x\cos(k_xa)-2\gamma_y\cos(k_yb)$$

כאשר γ_x,γ_y הם אינטגרלי החפיפה. עבור ציר k_x נקבל:

$$E(k_x,k_y=0)=C-2\gamma_x\cos(k_xa)-2\gamma_y$$

לפי הגרף השמאלי נקבל:

$$\begin{cases} E(k_x=0,k_y=0)=C-2\gamma_x-2\gamma_y=-6E_0 \\ E(k_x=\pi/a,k_y=0)=C+2\gamma_x-2\gamma_y=2E_0 \end{cases}$$

ניתן לעשות פיתוח דומה עבור ציר k_y לפיו:

$$E(k_x=0,k_y)=C-2\gamma_x-2\gamma_y\cos(k_yb)$$

נקבל:

$$\begin{cases} E(k_x=0,k_y=0)=C-2\gamma_x-2\gamma_y=-6E_0 \\ E(k_x=0,k_y=\pi/b)=C-2\gamma_x+2\gamma_y=-2E_0 \end{cases}$$

היות ויש משוואה אחת חופפת, ישנן 3 משוואות עם 3 נעלמים:

$$\begin{cases} C-2\gamma_x-2\gamma_y=-6E_0 \\ C+2\gamma_x-2\gamma_y=2E_0 \\ C-2\gamma_x+2\gamma_y=-2E_0 \end{cases}$$

חיסור של המשוואה העליונה מהמשוואה התחתונה יתן $\gamma_y = E_0$ ונישאר עם 2 משוואות:

$$\begin{cases} C - 2\gamma_x = -4E_0 \\ C + 2\gamma_x = 4E_0 \end{cases}$$

מצמד המשוואות הנ"ל נקבל ש- $\gamma_x = 2E_0, C = 0$.

לבסוף נביע את הקבועים כתלות בפרמטרי הבעיה:

$$\begin{cases} \gamma_x = 2E_0 = 2 \cdot \dfrac{\hbar^2}{2m_0} Kb_x^2 = \dfrac{\hbar^2}{m_0}\left(\dfrac{\pi}{a}\right)^2 \\ \gamma_y = E_0 = \dfrac{\hbar^2}{2m_0} Kb_Y^2 = \dfrac{\hbar^2}{2m_0}\left(\dfrac{\pi}{b}\right)^2 \end{cases}$$

ג. **(6 נק')** - חשבו את טנזור המסה האפקטיבית בתחתית הפס. הביעו את תשובתכם בעזרת המסה של האלקטרון וקבועים מספריים שונים (במידה ויש). במידה ולא הצלחתם לפתור את הסעיף הקודם, השתמשו ב- γ_x, γ_y כלליים.

תזכורת: $\cos(ax) \approx 1 - \dfrac{a^2x^2}{2}$

נבצע קירוב למבנה הפס הנתון בתחתית הפס:

$$E(k_x,k_y) = C - 2\gamma_x \cos(k_x a) - 2\gamma_y \cos(k_y b) \approx C - 2\gamma_x (1 - \frac{k_x^2 a^2}{2}) - 2\gamma_y (1 - \frac{k_y^2 b^2}{2}) =$$

$$= C - 2\gamma_x - 2\gamma_y + \gamma_x k_x^2 a^2 + \gamma_y k_y^2 b^2$$

ניתן לבצע גזירה כפולה ולהשתמש בהגדרת המסה האפקטיבית אולם ידוע לנו שאנו מצפים לביטוי מהצורה $\dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$, כלומר שמהביטוי המקורב שקיבלנו נוכל למצוא באופן ישיר את המסות האפקטיביות בכל ציר (טנזור המסה האפקטיבית):

$$\begin{cases} \dfrac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x} = \gamma_x k_x^2 a^2 \\ \dfrac{\hbar^2 k_y^2}{2m_y} = \gamma_y k_y^2 b^2 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} m_x = \dfrac{\hbar^2}{2\gamma_x a^2} \\ m_y = \dfrac{\hbar^2}{2\gamma_y b^2} \end{cases}$$

הצבה של אינטגלי החפיפה מהסעיף הקודם תיתן:

$$\begin{cases} m_x = \dfrac{\hbar^2}{2\gamma_x a^2} = \dfrac{\hbar^2}{2\dfrac{\hbar^2}{m_0}\left(\dfrac{\pi}{a}\right)^2 a^2} = \dfrac{m_0}{2\pi^2} \\ m_y = \dfrac{\hbar^2}{2\gamma_y b^2} = \dfrac{\hbar^2}{2\dfrac{\hbar^2}{2m_0}\left(\dfrac{\pi}{b}\right)^2 b^2} = \dfrac{m_0}{\pi^2} \end{cases}$$

ד. **(6 נק')** - רשמו ביטוי לאנרגיה של הפס קרוב לתחתית שלו. ציירו איכותית קווים שווי אנרגיה במישור וקטורי הגל. מהי צורת המשטחים?

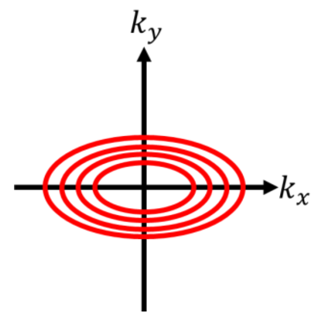
למעשה קיבלנו את הביטוי הדרוש בסעיף הקודם:

$$E(k_x,k_y)\approx C-2\gamma_x-2\gamma_y+\gamma_x k_x^2a^2+\gamma_y k_y^2b^2$$

קווים שווי אנרגיה ינתנו עבור E כלשהי, כלומר שיתקיים:

$$E(k_x,k_y)=E\approx C-2\gamma_x-2\gamma_y+\gamma_x k_x^2a^2+\gamma_y k_y^2b^2\Rightarrow$$
$$\Rightarrow\gamma_x k_x^2a^2+\gamma_y k_y^2b^2=E-C+2\gamma_x+2\gamma_y$$
$$\Rightarrow 2E_0k_x^2a^2+E_0k_y^2(2a)^2=E-C+2\gamma_x+2\gamma_y$$

היות והמשתנים הם k_x,k_y ולכל אחד מהם קבוע שונה, נקבל משטחים בעלי צורת אליפסה. האליפסה מצויירת כך ולא בסיבוב של 90 מעלות מכיוון שהמקדם של k_x יותר קטן מהמקדם של k_y.



ה. **(4 נק')** - בהנחה שכל תא יחידה תורם אלקטרון יחיד, מהי צפיפות האלקטרונים המשטחית בשריג? האם מדובר במבודד או מוליך? נמקו!

ידוע לנו שגודלו של תא יחידה אחד הינו $S=a\cdot b$. היות וכל תא יחידה תורם אלקטרון אחד, צפיפות האלקטרונים המשטחית תהיה פשוט 1 חלקי שטח תא היחידה:

$$n=\frac{1}{ab}=\frac{1}{3\cdot10^{-10}\cdot6\cdot10^{-10}}[m^{-2}]\approx5.5\cdot10^{-22}[m^{-2}]$$

היות ואלקטרונים הם בעלי ספין חצי, כל מצב אנרגטי יכול להכיל 2 אלקטרונים. לכן שריג שבו תא היחידה תורם אלקטרון אחד בלבד יגרור שרק חצי מהפס מאוכלס (כי הפס כולו תומך בפי 2 אלקטרונים ממספר המצבים בו). לכן רמת פרמי תימצא במרכז הפס והחומר יהיה מוליך (מתכת).

ו. **(10 נק')** - בהנחה שקרוב המסה האפקטיבית הקבועה תקף עבור צפיפות נושאי המטען מהסעיף הקודם, חשבו את אנרגיית פרמי של השריג (הניחו טמפרטורות נמוכות מאוד).

תזכורת: שטחה של אליפסה הוא $S=\pi ab$

בסעיף הקודם חישבנו את הצפיפות המשטחית של נושאי המטען. כאשר אנו מצויים בטמפרטורה נמוכה מאוד, פונקציית החלוקה שהיא פונקציית פרמי-דיראק הופכת למדרגה שערכיה 1 מתחת לאנרגיית פרמי ו-0 מעל. נגדיר את k_x^f,k_y^f בתור וקטורי הגל שהאנרגיה שלהם היא אנרגיית פרמי. צפיפות המצבים במצב זה תהיה:

$$n = \frac{2S}{(2\pi)^2} = \frac{2\pi k_x^f k_y^f}{(2\pi)^2} = \frac{k_x^f k_y^f}{(2\pi)}$$

כאשר S הוא שטחה של האליפסה המכילה את כל נושאי המטען מהסעיף הקודם.

ערכה של אנרגיית פרמי יקיים:

$$E_f(k_x^f, k_y^f) = \frac{\hbar^2}{2m_x}(k_x^f)^2 + \frac{\hbar^2}{2m_y}(k_y^f)^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{m_0}(k_x^f)^2 + \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_0}(k_y^f)^2$$

היות וערכה של רמת פרמי תמיד קבוע, הוא קבוע גם עבור הבחירות $k_x^f, k_y^f = 0$ או $k_x^f = 0, k_y^f$, כלומר שנקבל:

$$E_f(k_x^f = 0, k_y^f) = E_f(k_x^f, k_y^f = 0) = \frac{\hbar^2\pi^2}{m_0}(k_x^f)^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_0}(k_y^f)^2 \Rightarrow 2(k_x^f)^2 = (k_y^f)^2$$

הצבה של הקשר הנ"ל בביטוי לצפיפות המשטחית של נושאי המטען תיתן:

$$n = \frac{2S}{(2\pi)^2} = \frac{2\pi k_x^f k_y^f}{(2\pi)^2} = \frac{k_x^f k_y^f}{(2\pi)} = \frac{\sqrt{2}(k_x^f)^2}{(2\pi)} \Rightarrow (k_x^f)^2 = \sqrt{2}\pi n$$

הצבת קשר זה בביטוי לאנרגיית פרמי תיתן:

$$E_f(k_x^f, k_y^f) = \frac{\hbar^2\pi^2}{m_0}(k_x^f)^2 + \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_0}(k_y^f)^2 = \frac{\hbar^2\pi^2}{m_0}(k_x^f)^2 + \frac{\hbar^2\pi^2}{2m_0}2(k_x^f)^2 = \frac{2\hbar^2\pi^2}{m_0}(k_x^f)^2 = \frac{2\sqrt{2}\hbar^2\pi^3 n}{m_0}$$

ניתן גם לפשט את הביטוי עוד יותר ע"י הבעתו בעזרת E_0:

$$E_f(k_x^f, k_y^f) = \frac{2\sqrt{2}\hbar^2\pi^3 n}{m_0}$$

גדלים פיזיקליים שימושיים:

$$m_e = 9.1 \cdot 10^{-31}[kg]$$
$$k_B = 1.38 \cdot 10^{-23}[J / K]$$
$$h = 6.626 \cdot 10^{-34}[J \cdot s]$$

זהויות טריגונומטריות שימושיות:

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