אלקטרוניקה פיסיקאלית 044124

סמסטר אביב 2021

מועד ב

הנחיות

- **משך הבחינה – שלוש שעות**
- **במבחן ישנן 3 שאלות**
- **בדקו שברשותכם 6 עמודים**
- **ניתן להשתמש במחשבון ו- 5 דפי נוסחאות דו-צדדיים**
- **הציון המקסימאלי במבחן הינו 100**
- **אם לא צוין אחרת סעיפים בשאלה הם בעלי משקל זה**

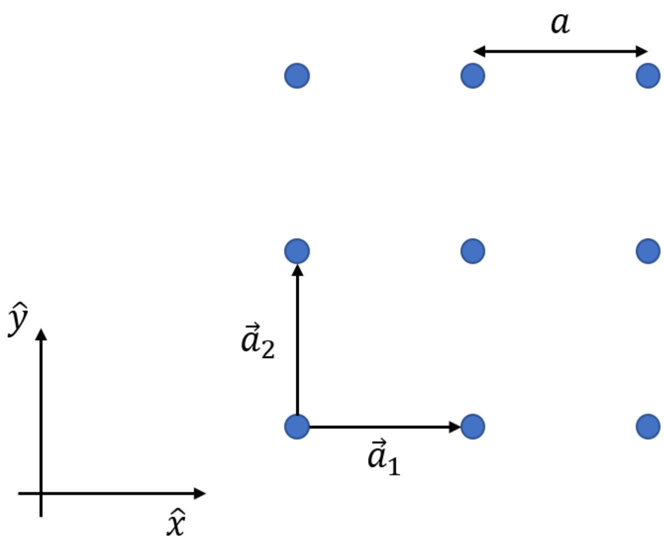
בהצלחה!

שאלה מספר 1 (40 נקודות):

נתון סריג ריבועי פשוט המתאר חומר דו-ממדי בעל מרחק a בין אטומים.

א. מצאו עבורו וקטורים פרימיטיביים בסריג הישיר ובסריג ההופכי. ציירו את השריג ההופכי המתאים ומצאו וציירו על גביו את אזור ברילואן הראשון.

הסריג הישיר נראה באופן הבא:



הוקטורים הפרימיטיביים בסריג הישיר הינם:

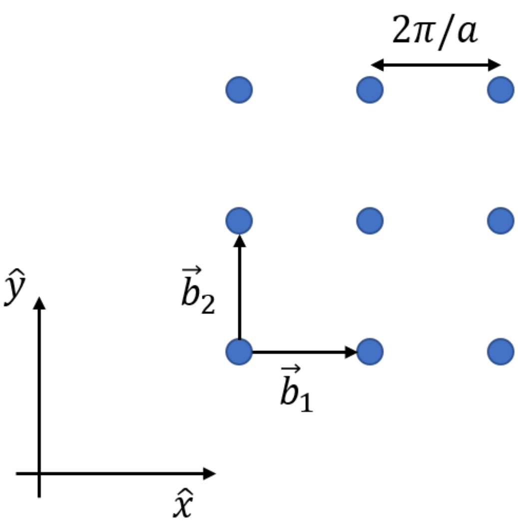
$$\vec{a}_1 = a\hat{x} \qquad ; \qquad \vec{a}_2 = a\hat{y}$$

הווקטורים הפרימיטיביים בסריג ההופכי הינם:

$$\vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \times \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot (\vec{a}_2 \times \vec{a}_3)} = 2\pi \frac{a\hat{y} \times \hat{z}}{a\hat{x} \cdot (a\hat{y} \times \hat{z})} = \frac{2\pi}{a}\hat{x}$$

$$\vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \times \vec{a}_1}{\vec{a}_2 \cdot (\vec{a}_3 \times \vec{a}_1)} = 2\pi \frac{\hat{z} \times a\hat{x}}{a\hat{y} \cdot (\hat{z} \times a\hat{x})} = \frac{2\pi}{a}\hat{y}$$

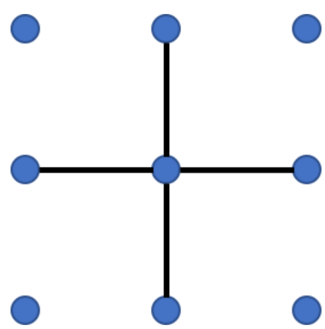
והשריג ההופכי נראה באופן הבא :



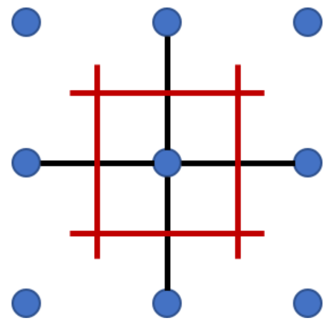
ראינו בכיתה שאזור ברילואן הראשון הינו תא ויגנר-זייץ בסריג ההופכי. מדובר בתא יחידה פרימיטיבי (כלומר תא יחידה ששכפול שלו על פני כל אתרי הסריג יכסה את כל הסריג במלואו ללא פערים והוא מכיל נקי סריג אחת בלבד), אשר ספציפית מכיל את כל הנקי במרחב שקרובות יותר לנקי הסריג שהוא מקיף מאשר לכל נקי אחרת במרחב ההופכי.

אנחנו כבר יודעים שאזור ברילואן הראשון עבור שריג ריבועי פשוט כזה עם מרחק בין אטומים a הוא בסה״כ ריבוע בעל צלע $2\pi/a$ סביב נקי סריג שרירותית, כלומר ריבוע בין $-\pi/a$ ל-π/a אם נקודת הסריג הזו נלקחת כמרכזו ב-0. בכל זאת נבצע את הפרוצדורה המלאה שראינו בכיתה בכדי למצוא אותו :

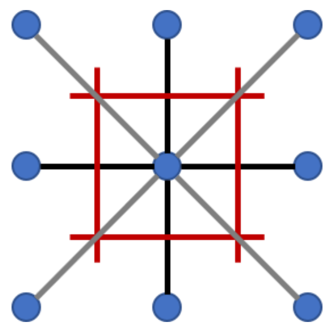
נבחר נקי סריג שרירותית כלשהי בסריג ההופכי ונמתח קווים ממנה אל נקי הסריג הקרובות ביותר :



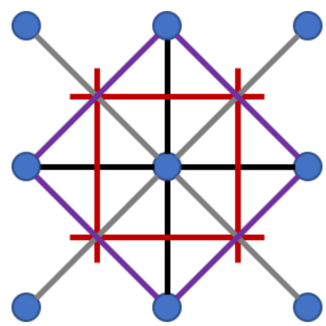
נחצה את הקווים השחורים בדיוק באמצע:



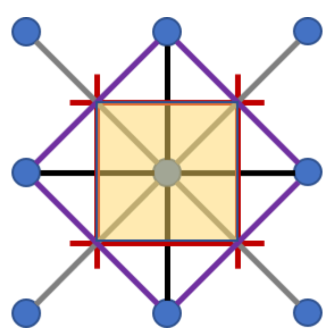
נמשיך בפרוצדורה עבור השכנים הבאים בתור:



ונחצה את הקווים האפורים כמקודם:



אנחנו רואים שהאזור התחום המינימלי סביב נקי' הסריג שלנו הינו באופן לא מפתיע הריבוע (בין הקווים האדומים) אותו ציפינו לקבל. זהו אזור ברילואן הראשון (מסומן בצהוב):



ב. השתמשו במודל הקשירה ההדוקה וקבלו ביטוי עבור יחס הנפיצה של אלקטרונים בשריג (עבור הפס הראשון בלבד).

- נתון כי:

$$\left\langle \varphi(\vec{x}) \middle| \hat{H} \middle| \varphi(\vec{x}) \right\rangle \triangleq -\alpha$$

$$\left\langle \varphi(\vec{x}) \middle| \hat{H} \middle| \varphi(\vec{x} - \vec{a}_{1,2}) \right\rangle \triangleq -\gamma$$

לפי הגדרה מתקיים:

$$E_k = \sum_{m=1}^{N} e^{-ik\Delta x_m} \left\langle \varphi(x) \middle| \hat{H} \middle| \varphi(x - \Delta x_m) \right\rangle$$

נבחר אתר שריג כלשהו ונגדירו כאפס. ישנם 4 שכנים קרובים ולכן נקבל:

$$E_k = \sum_{m=1}^{N} e^{-ik\Delta x_m} \left\langle \varphi(x) \middle| \hat{H} \middle| \varphi(x - \Delta x_m) \right\rangle = -\alpha - \gamma\left(e^{-ik_x a} + e^{ik_x a} + e^{-ik_y a} + e^{ik_y a}\right)$$

$$\Longrightarrow$$

$$\Longrightarrow \boldsymbol{E(k_x, k_y) = -\alpha - 2\gamma(\cos k_x a + \cos k_y a)}$$

ג. מצאו את יחס הנפיצה $E(\vec{k})$:

[1] לאורך וקטור $\vec{k}$ המחבר בין מרכז אזור ברילואן לנק' $(k_x, k_y) = (\pi/a, 0)$

[2] לאורך וקטור $\vec{k}$ המחבר את מרכז אזור ברילואן לנק' $(k_x, k_y) = (\pi/a, \pi/a)$

[3] לאורך וקטור $\vec{k}$ המחבר בין הנק' $(k_x, k_y) = (\pi/a, 0)$ לנק' $(k_x, k_y) = (\pi/a, \pi/a)$

[1] הוקטור הנ"ל מקיים $k_y = 0$ ולכן הצבה ביחס הנפיצה שקיבלנו תניב:

$$E = -\alpha - 2\gamma(\cos k_x a + 1) = -\alpha - 2\gamma - 2\gamma \cos k_x a$$

[2] הוקטור הנ"ל מקיים $k_x = k_y = \frac{|k|}{\sqrt{2}}$ כאשר $|k|$ זה הגודל שלו (נתייחס אליו כפרמטר). מהצבה נקבל:

$$E = -\alpha - 2\gamma\left(\cos\frac{|k|}{\sqrt{2}}a + \cos\frac{|k|}{\sqrt{2}}a\right) = -\alpha - 4\gamma \cos\frac{|k|}{\sqrt{2}}a$$

[3] הוקטור הנ"ל מקיים $k_x = \pi/a$ ולכן הצבה ביחס הנפיצה תניב:

$$E = -\alpha - 2\gamma(-1 + \cos k_y a) = -\alpha + 2\gamma - 2\gamma \cos k_y a$$

ד. מצאו כיצד נראים משטחים שווי אנרגיה של הפס שמצאתם סביב מרכז אזור ברילואן וסביב הנקי' $(k_x,k_y)=(\pi/a,\pi/a)$.

- רמז : פתחו לטור טיילור בסביבה הקרובה לנק' הללו.

ציירו איכותית את העקומים המתקבלים בתוך אזור ברילואן יחד עם העקום שמקיים $E=-\alpha$.

- סביב מרכז אזור ברילואן נפתח לטור טיילור את הקוסינוסים ביחס הנפיצה עבור $\Delta k_{x,y}a \ll 1$:

$$\cos\big((0+\Delta k_x)a\big) \approx 1-\frac{(\Delta k_x a)^2}{2} \qquad , \qquad \cos\left(\left(0+\Delta k_y\right)a\right) \approx 1-\frac{\left(\Delta k_y a\right)^2}{2}$$

משטחים שווי אנרגיה בסביבה זו יקיימו לכן :

$$E \cong -\alpha-2\gamma\left(1-\frac{(\Delta k_x a)^2}{2}+1-\frac{\left(\Delta k_y a\right)^2}{2}\right) \implies \Delta k_x^2+\Delta k_y^2 \cong \frac{E+\alpha+4\gamma}{\gamma a^2}$$

וקיבלנו שהעקומים הינם **מעגלים** שמרכזם בנק' סביבה פיתחנו (מרכז איזור ברילואן).

- סביב הנקי' $(k_x,k_y)=(\pi/a,\pi/a)$ נפתח לטור טיילור את הקוסינוסים ביחס הנפיצה עבור $\Delta k_{x,y}a \ll 1$:

$$\cos\left(\left(\frac{\pi}{a}-\Delta k_x\right)a\right)=\cos(\pi-\Delta k_x a)=-\cos(\Delta k_x a)\approx\frac{(\Delta k_x a)^2}{2}-1$$

$$\cos\left(\left(\frac{\pi}{a}-\Delta k_y\right)a\right)=\cos\left(\pi-\Delta k_y a\right)=-\cos\left(\Delta k_y a\right)\approx\frac{\left(\Delta k_y a\right)^2}{2}-1$$

משטחים שווי אנרגיה בסביבה זו יקיימו לכן :

$$E \cong -\alpha-2\gamma\left(\frac{(\Delta k_x a)^2}{2}-1+\frac{\left(\Delta k_y a\right)^2}{2}-1\right) \implies \Delta k_x^2+\Delta k_y^2 \cong -\frac{E+\alpha-4\gamma}{\gamma a^2}$$

וקיבלנו שהעקומים הם גם כאן **מעגלים** שמרכזם בנק' סביבה פיתחנו (הפינה הימנית העליונה של איזור ברילואן הראשון). אפשר בקלות להיווכח שתוצאה דומה תתקבל גם בכל שאר הפינות של קצוות אזור ברילואן הראשון.

- עבור $E=-\alpha$ מתקיים מיחס הנפיצה :

$$\cos k_x a=-\cos k_y a \qquad \implies \qquad k_y=\pm k_x\pm\frac{\pi}{a}$$

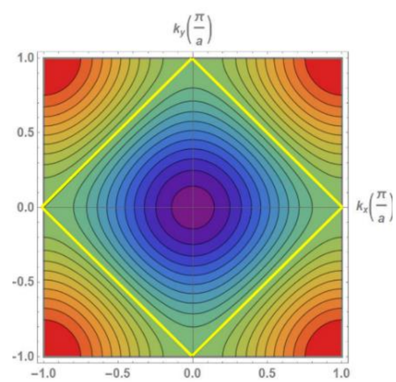
ניתן להיווכח שהעקום המתאים בתוך אזור ברילואן הראשון יוצר ריבוע אלכסוני בעל אורך צלע $\frac{\pi\sqrt{2}}{a}$, שקודקודיו מחברים בין מרכזי צלעות קצוות אזור ברילואן הראשון (ראה ריבוע צהוב בציור של סעיף הבא). שטחו של ריבוע זה הוא בדיוק כמחצית משטח איזור ברילואן הראשון והיקפו מהווה משטח פרמי עבור גביש בעל אלקטרון ערכיות יחיד בתא יחידה כפי שנראה בסעיף הבא, אליו מצורפת

המפה הטופוגרפית המחושבת של הפס ובה נוכל לזהות את כל מה שקיבלנו (ונדרשתם במבחן לשרטט באופן איכותי).

ה. בהינתן אלקטרון ערכיות יחיד לכל אתר שריג בחומר קבעו באיזה סוג של חומר מדובר – מוליך או מבודד?

ראינו בכיתה שבהתחשב בספין, כל תא יחידה בגביש תורם 2 מצבים לפס. באופן זה הסקנו שאם N הוא מספר תאי היחידה בגביש הרי שישנם $2N$ מצבים באזור ברילואן של פס, ולכן אמרנו שגבישים עם מספר אי-זוגי של אלקטרוני ערכיות יהיו מתכות וכאלו עם מספר זוגי של אלקטרוני ערכיות יהיו מבודדים/מל״מ (בהנחה ואין חפיפות פסים וכו׳). בהתאם לכך ניתן לקבוע את מיקומה של רמת פרמי ביחס לפס האנרגיה (שכן משמעותה היא בדיוק עד לאן מאוכלסים אלקטרונים).

נסיק אם כך שאם ישנו אלקטרון ערכיות יחיד לכל אתר שריג בגביש שלנו (שקול ללומר שישנו אלקטרון ערכיות יחיד בכל תא יחידה), אזי פס האנרגיה שחישבנו וניתחנו בסעיפים הקודם הוא בדיוק חצי מאוכלס ומשטח שווה אנרגיה של רמת פרמי (משטח פרמי) הינו עקום במישור k_x, k_y שתוחם שטח המהווה בדיוק מחצית מאזור ברילואן הראשון, כשהחומר המדובר הינו מתכת/מוליך. העקום (היקף הריבוע) מסעיף קודם הינו בדיוק משטח פרמי במקרה זה, והוא מצויר בצהוב בשרטוט הבא (המציג מפה טופוגרפית של הפס שחישבנו באזור ברילואן הראשון) :



ו. חשבו את טנזור המסה האפקטיבית (M_{ij}) בנק׳ $(k_x, k_y) = (0,0)$, $(k_x, k_y) = (\pi/a, 0)$, ו-$(k_x, k_y) = (\pi/a, \pi/a)$. לצורך כך השתמשו בתוצאה שקיבלתם ממודל הקשירה ההדוקה (גם כאן, הניחו שקיים רק הפס הראשון). הסבירו מה ניתן להסיק ממה שקיבלתם על סוג החלקיקים בנק׳ השונות. מתי ניתן להצדיק את קירוב המסה האפקטיבית ולהשתמש בה לצורך חישוב גדלים פיזיקליים?

טנזור המסה האפקטיבית נתון באופן כללי (במקרה הזה בדו-ממד) על ידי :

$$M_{ij} = \hbar^2 \left(\frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_i \partial k_j} \right)^{-1}$$

נבצע את הגזירות מסדר ראשון ושני כולל נגזרות מעורבות על הביטוי שקיבלנו עבור פס האנרגיה בסעיף ב׳ ונקבל :

$$\frac{\partial E(k_x, k_y)}{\partial k_x} = 2a\gamma \sin k_x a$$

$$\frac{\partial E(k_x,k_y)}{\partial k_y} = 2a\gamma \sin k_y a$$

$$\frac{\partial^2 E(k_x,k_y)}{\partial k_x^2} = 2a^2\gamma \cos k_x a$$

$$\frac{\partial^2 E(k_x,k_y)}{\partial k_y^2} = 2a^2\gamma \cos k_y a$$

$$\frac{\partial^2 E(k_x,k_y)}{\partial k_x \partial k_y} = \frac{\partial^2 E(k_x,k_y)}{\partial k_y \partial k_x} = 0$$

מכאן שטנזור המסה האפקטיבית הינו (בייצוג מטריצי):

$$M = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2a^2\gamma \cos k_x a & 0 \\ 0 & 2a^2\gamma \cos k_y a \end{pmatrix}^{-1}$$

<u>ובנקי' המבוקשות</u>:

ב-$(k_x,k_y) = (0,0)$ [מרכז אזור ברילואין, נקי' Γ]:

$$M = \hbar^2 \begin{pmatrix} 2a^2\gamma & 0 \\ 0 & 2a^2\gamma \end{pmatrix}^{-1} = \frac{\hbar^2}{2a^2\gamma} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

מתקבלת מסה אפקטיבית איזוטרופית וחיובית (החלקיק ינוע בכיוון הכח בין אם הכח מופעל בכיוון x או בכיוון y).

ב-$(k_x,k_y) = (\pi/a, 0)$ [מרכז צלע בקצה אזור ברילואין, נקי' X]:

$$M = \hbar^2 \begin{pmatrix} -2a^2\gamma & 0 \\ 0 & 2a^2\gamma \end{pmatrix}^{-1} = \frac{\hbar^2}{2a^2\gamma} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

מתקבלת מסה אפקטיבית אנאיזוטרופית (העקמומיות משנה סימן בהתאם לכיוון הכח המופעל - עבור כח המופעל בכיוון x החלקיק ינוע בכיוון הפוך לכיוון הכח, בעוד שעבור כח המופעל בכיוון y הוא ינוע באותו כיוון).

ב-$(k_x,k_y) = (\pi/a, \pi/a)$ [פינה של קצה אזור ברילואן, נקי' M]:

$$M = \hbar^2 \begin{pmatrix} -2a^2\gamma & 0 \\ 0 & -2a^2\gamma \end{pmatrix}^{-1} = -\frac{\hbar^2}{2a^2\gamma} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

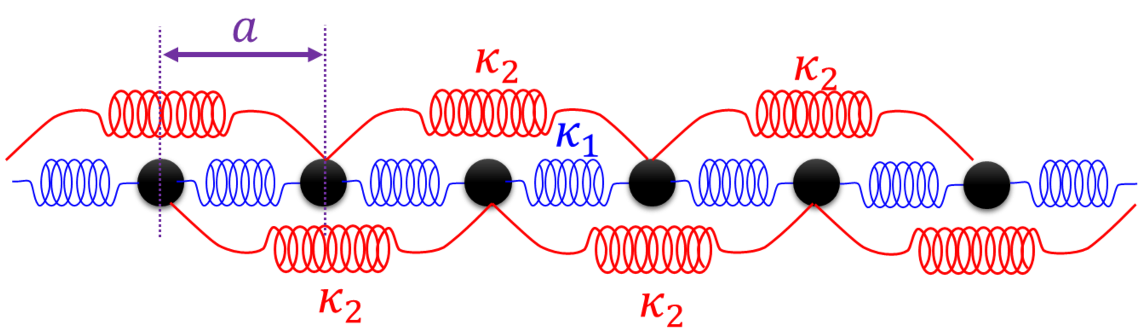
מתקבלת שוב מסה אפקטיבית איזוטרופית, אך הפעם שלילית (החלקיק ינוע בכיוון הפוך לכיוון הכח בין אם הכח מופעל בכיוון x או בכיוון y).

אנחנו יודעים שאלקטרונים נמצאים סביב רמת פרמי (בטווח אנרגיה מסדר גודל של $k_B T$ כמוכתב מהתפלגות פרמי דיראק), כך שהם למעשה נעים על גבי משטח שווה אנרגיה בקירוב (משטח פרמי). עבור פס כמעט ריק או כמעט מלא, משטח פרמי נשאר מאוד קרוב למרכז אזור ברילואן $(0,0)$ ולפינות שלו $(\pm\pi/a, \pm\pi/a)$, בהתאמה. בהתאם לכך, כל זמן שהאלקטרונים נשארים קרוב

למקסימום או למינימום של פס האנרגיה שחישבנו, ניתן להשתמש בקירוב המסה האפקטיבית (בטנזור שקיבלנו) לצורך חישוב גדלים פיזיקליים כפי שראינו במהלך הקורס, בדיוק כמו במל״מ עבור אלקטרונים בתחתית פס ההולכה וחורים בתקרת פס הערכיות. בנקי׳ $(k_x, k_y) = (\pi/a, 0)$ החישוב שלנו רלוונטי רק כאשר הפס מלא באופן חלקי (כמו בסעיף ה׳), ובכל מקרה קירוב המסה האפקטיבית לא יתפוס בנקי׳ זו.

<u>שאלה מספר 2 (40 נקודות)</u>

נתונה שרשרת חד-ממדית של אטומים המרוחקים זה מזה במרחק a. תנועת האטום בשרשרת מתוארת באמצעות מתנד הרמוני כך שאטום נתון מקושר לשני השכנים הקרובים הנמצאים במרחק a ממנו באמצעות קפיץ עם קבוע קפיץ κ_1 ולשני שכנים הרחוקים יותר הנמצאים במרחק $2a$ באמצעות קבוע קפיץ κ_2. המרחק הממוצע בין אטומים הינו a



א. כמה אופנים אקוסטיים וכמה אופנים אופטיים ישנם במודל?

מימד הבעיה קובע את מספר האופנים האקוסטיים. מכיוון שנתונה שרשרת חד ממדית נצפה לקבל אופן אקוסטי בודד. מספר האופנים האופטיים נקבע על ידי מספר האטומים בתא יחידה פחות מספר האופנים האקוסטיים. מכיוון שיש אטום בודד בתא יחידה וישנו אופן אקוסטי בודד נקבל שאין אופנים אופטיים.

ב. כתבו ביטוי לאנרגיה פוטנציאלית האגורה במערכת.

$$V(x) = \frac{1}{2}\kappa_1 \sum_{n=1}^{N} (\delta x_{n+1} - \delta x_n)^2 + \frac{1}{2}\kappa_2 \sum_{n=1}^{N} (\delta x_{n+2} - \delta x_n)^2$$

ג. כתבו את משוואת הכוחות הפועלים על כל אטום.

מגזירה של האנרגיה הפוטנציאלית לפי מיקום נקבל את הכוח הפועל על האטום. בשילוב עם החוק השני של ניוטון נקבל :

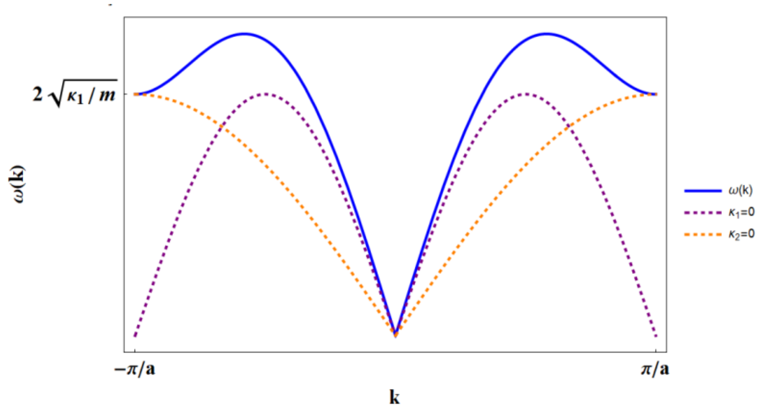
$$m\delta\ddot{x}_n = \kappa_1(\delta x_{n+1} - 2\delta x_n + \delta x_{n-1}) + \kappa_2(\delta x_{n+2} - 2\delta x_n + \delta x_{n-2})$$

ד. הציבו את הפתרון מהצורה $Ae^{i\omega(k)t-ikna}$ למשוואה שקיבלתם בסעיף הקודם וקבלו ביטוי ליחס הנפיצה וציירו אותו איכותית.

ההצבה תניב :

$$-m\omega(k)^2 = \kappa_1\left(e^{-ika} - 2 + e^{ika}\right) + \kappa_2\left(e^{-i2ka} - 2 + e^{i2ka}\right)$$
$$\omega(k)^2 = 4\kappa_1/m \sin(ka/2)^2 + 4\kappa_2/m \sin(ka)^2$$

$$\omega(k) = \sqrt{4\kappa_1/m \sin(ka/2)^2 + 4\kappa_2/m \sin(ka)^2}$$



ה. חשבו את מהירות הקול והסבירו את התוצאה שהתקבלה.

נקרב את הביטוי של יחס הנפיצה סביב $k = 0$ ונקבל :

$$\omega(k) = \sqrt{4\kappa_1/m \sin(ka/2)^2 + 4\kappa_2/m \sin(ka)^2} \approx \sqrt{\frac{\kappa_1 k^2 a^2}{m} + \frac{4\kappa_2 k^2 a^2}{m}}$$

$$= |k|\sqrt{\frac{\kappa_1 + 4\kappa_2}{m} a^2}$$

$$v_{sound} = \sqrt{\frac{\kappa_1 + 4\kappa_2}{m} a^2}$$

וקיבלנו שמהירות הקול נקבעת לפי קבוע הקפיץ האפקטיבי :

$$\kappa = \kappa_1 + 4\kappa_2$$

כעת נניח ש-$\kappa_2 = 0$.

ו. כתבו את הביטוי למהירות החבורה ומצאו את הערך המקסימאלי של תדירות התנודה ω_{max} .

מהירות החבורה במקרה זה היא :

$$\omega(k) = 2\sqrt{\kappa/m}|\sin(ka/2)|$$

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

$$v_g = v_{sound} \cos(ka/2)\, sign(k)$$

ז. רשמו את הביטוי לצפיפות המצבים באמצעות מהירות החבורה. איזה ערך מקבל הביטוי כאשר $\omega = \omega_{max}$ הסבירו.

$$N(k) = \frac{1}{2} \times \frac{2k}{V_k} = \frac{k}{\pi/L} = L \times \frac{k}{\pi}$$

$$g(k) = \frac{1}{V} \times \frac{dN(k)}{dk} = \frac{1}{\pi}$$

$$g(\omega) = g(k)dk/d\omega \rightarrow g(\omega) = g(k) \times \frac{dk}{d\omega} = \frac{1}{\pi} \times \frac{1}{v_g(k)}$$

$$g(\omega)=\frac{1}{\pi}\times\frac{1}{v_{sound}\times\cos(ka/2)}=\frac{1}{\pi}\times\frac{1}{v_{sound}\sqrt{1-\sin^2(ka/2)}}=\frac{1}{\pi}\times\frac{2\sqrt{\kappa/m}}{a\sqrt{\kappa/m}\sqrt{4\kappa/m-\omega^2}}$$
$$=\frac{1}{\pi a}\times\frac{2}{\sqrt{4\kappa/m-\omega^2}}=\frac{1}{\pi a}\times\frac{2}{\sqrt{\omega_{max}^2-\omega^2}}$$

ניתן לראות שצפיפות המצבים מתבדרת כאשר תדירות התנודה שואפת לערכה המקסימלי בקצה אזור ברילואן. זה לא מפתיע אותנו שכן ראינו שמהירות החבורה מתאפסת בנק׳ זו.

ח. קרבו את צפיפות המצבים עבור $\omega \ll \omega_{max}$. איזו תלות פונקציונאלית קיבלתם? הסבירו!

$$g(\omega)=\frac{2}{\pi a}\times\frac{1}{\omega_{max}\sqrt{1-\omega^2/\omega_{max}^2}}\approx\frac{2}{\pi a}\times\frac{1}{\omega_{max}}=\frac{1}{\pi v_{sound}}\equiv const$$

בגבול הנ״ל נקבל יחס נפיצה לינארי

$$\omega(k)=2\sqrt{\kappa/m}|\sin(ka/2)|\approx\sqrt{\kappa/m}a|k|=v_s|k|$$

מכיוון שמדובר בממד אחד ויחס נפיצה לינארי נקבל שצפיפות המצבים הינה קבועה.

ט. כתבו ביטוי עבור צפיפות האנרגיה הממוצעת. אין צורך בחישוב. למה שווה הביטוי בטמפרטורות גבוהות?

מכיוון שמדובר בפונונים שפונקציית האכלוס שלהם היא בוזה-איינשטיין עם פוטנציאל כימי $\mu=0$:

$$f_{BE}(E)=\frac{1}{e^{\beta E}-1}$$

נקבל

$$U(T)=\int_0^{E_{max}}E\times g\,(E)\times f_{BE}(E)\times dE=\int_0^{\omega_{max}}\hbar\omega\times\frac{1}{\pi a}\times\frac{2}{\sqrt{\omega_{max}^2-\omega^2}}\times\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1}\times d\omega$$

נשים לב שגבולות האינטגרציה הם בין 0 לאנרגיה המקסימלית של הענף.

$$E_{max}=\hbar\omega_{max}=\hbar\sqrt{4\kappa/m}$$

בטמפרטורות גבוהות השימוש במשפט החלוקה השווה יהיה מוצדק ונקבל שכל דרגת חופש ריבועית תקבל $1/2k_bT$. מכיוון שיש 2 דרגות חופש – אחת למהירות והשנייה לאנרגיה פוטנציאלית, נצפה לקבל

$$U(T)=2\times\frac{1}{2}k_bT\times n=n\times k_bT$$

כאשר n היא צפיפות האטומים בשרשרת.

כמובן שיכולנו להצדיק את החישוב גם בדרך מתמטית יותר - בגבול של טמפרטורות גבוהות נצפה ש

$$\beta E\ll 1$$
$$f_{BE}(E)=\frac{1}{e^{\beta E}-1}\approx\frac{1}{1+\beta E-1}=\frac{k_bT}{\hbar\omega}$$

ובכך נקבל ש-

$$U(T)\approx\int_0^{\omega_{max}}\hbar\omega\times g(\omega)\times\frac{k_bT}{\hbar\omega}\times d\omega=k_bT\times\int_0^{\omega_{max}}g(\omega)d\omega$$

אינטגרל על צפיפות המצבים יניב את מספר המצבים ליחידת נפח, מכיוון שכל אתר תורם מצב אחד, מספר המצבים ליחידת נפח זהה לצפיפות האטומים, שכן במקרה זה יש אטום יחיד בכל אתר.

$$N = V \times \int_0^{\omega_{max}} g(\omega)d\omega \rightarrow n \equiv \frac{N}{V} = \int_0^{\omega_{max}} g(\omega)d\omega$$

שאלה 3 (20 נקודות)

נתונה מערכת של שתי רמות אנרגיה ε_1 ו- ε_2 המצומדת למאגר חום בטמפרטורה T.

א. רשמו ביטוי לפונקציית החלוקה של המערכת.
ב. רשמו ביטוי לאנרגיה ממוצעת של המערכת.
ג. רשמו ביטוי לקיבול חום של המערכת
ד. בטמפרטורות נמוכות מאוד, הסבירו פיזיקאלית את הגבול של קיבול חום.
ה. בטמפרטורות גבוהות מאוד, הסבירו פיזיקאלית את הגבול של קיבול חום.
ו. ציירו סכמתית גרף של קיבול חום כפוני של טמפרטורה. עבור איזו טמפרטורה קיבול חום מקסימאלי? חשבו והסבירו פיזיקאלית את התוצאה שהתקבלה.

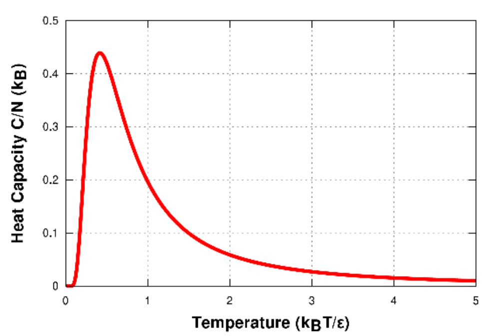
פתרון:

א. $Z = e^{-\beta\varepsilon_1} + e^{-\beta\varepsilon_2} = e^{-\beta\varepsilon_1}\left(1 + e^{-\beta\Delta\varepsilon}\right)$

ב. $\langle E \rangle = -\frac{\partial}{\partial\beta}\ln Z = \varepsilon_1 + \frac{\Delta\varepsilon}{\left(1 + e^{\beta\Delta\varepsilon}\right)}$

ג. $C = \frac{\partial\langle E \rangle}{\partial T} = k_B \frac{\left(\beta\Delta\varepsilon\right)^2 e^{\beta\Delta\varepsilon}}{\left(1 + e^{\beta\Delta\varepsilon}\right)^2}$

ד. ניתן להסביר השפעה זו על ידי התבוננות בשינוי האנטרופיה של המערכת. בטמפרטורה אפסית תפוסה רק רמת האנרגיה הנמוכה ביותר, האנטרופיה היא אפס, ויש מעט מאוד סבירות למעבר לרמת אנרגיה גבוהה יותר.
ה. בטמפרטורות גבוהות כל הרמות מאוכלסות באופן שווה, כך שיש שוב מעט שינוי באנטרופיה לשינויים קטנים בטמפרטורה, וכך יכולת חום ספציפית נמוכה יותר.
ו.



ככל שהטמפרטורה עולה, יש עלייה באנטרופיה וכך ההסתברות למעבר עולה. ככל שהטמפרטורה מתקרבת להבדל בין רמות האנרגיה יש שיא רחב בקיבול חום המתאים לשינוי גדול באנטרופיה עבור שינוי קטן בטמפרטורה.

נגדיר $x = \beta\Delta\varepsilon$

$$\frac{dC}{dx}=k_B\left[\frac{2xe^x+x^2e^x}{\left(1+e^x\right)^2}-\frac{2x^2e^{2x}}{\left(1+e^x\right)^3}\right]=0$$

$$2+x=\frac{2xe^x}{e^x+1}$$

$$e^x=\frac{x+2}{x-2}$$

$$x\approx 2.4$$

$$k_BT\approx 0.417\Delta\varepsilon$$

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
$\cos(a)\cos(b) = 1/2(\cos(a+b) + \cos(a-b))$
$\sin(a)\sin(b) = 1/2(\cos(a-b) - \cos(a+b))$
$\sin(a)\cos(b) = 1/2(\sin(a+b) + \sin(a-b))$
$\sin(2a) = 2\sin(a)\cos(b)$
$\cos(2a) = \cos^2 a - \sin^2 b$
$\sin^2 a = (1 - \cos(2a))/2$
$\cos^2 a = (1 + \cos(2a))/2$
$\sin(\pi - a) = \sin(a)$
$\cos(\pi - a) - \cos(a)$
$\sin(\pi/2 - a) = \cos(a)$
$\cos(\pi/2 - a) = \sin(a)$
$\sin(-a) = -\sin(a)$
$\cos(-a) = \cos(a)$
$\cos(a) = (e^{ia} + e^{-ia})/2$
$\sin(a) = (e^{ia} - e^{-ia})/(2i)$
Hyperbolic Identities
$\cosh(a) = (e^{a} + e^{-a})/2$
$\sinh(a) = (e^{a} - e^{-a})/2$
$\mathrm{sech}(a) = \cosh^{-1}(a)$
$\mathrm{csch}(a) = \sinh^{-1}(a)$
$\tanh(a) = \sinh(a) / \cosh(a)$
$\coth(a) = \cosh(a) / \sinh(a)$
$\sinh'(a) = \cosh(a)$
$\tanh'(a) = \mathrm{sech}^2(a)$
$\coth'(a) = -\mathrm{csch}^2(a)$

אינטגרליים 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

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

$$\Gamma(n) = (n-1)\Gamma(n-1)$$

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

Polylogarithm

$$\int_0^{\infty} \frac{x^n}{e^{\alpha x} - 1} dx \equiv \frac{1}{\alpha^{n+1}} J(n), \quad n > 0$$

$\boldsymbol{n}$	1	2	3	4	5
$\boldsymbol{J(n)}$	$\frac{\pi^2}{6}$	$2\zeta(3) \approx 2.404$	$\frac{\pi^4}{15}$	$24\zeta(5) \approx 24.886$	$\frac{8\pi^6}{63}$

More Gaussian Integrals $\alpha > 0, n \geq 0$

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

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

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