מבוא למצב מוצק תשפ"ג: תרגיל בית 10

1. לפי משפט בלוך, בהינתן המילטוניאן חד-חלקיקי מהצורה

$$H = -\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r})$$

עבור פוטנציאל $V(\mathbf{r})$ מחזורי בסריג, המצבים העצמיים הם מהצורה $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ כאשר $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ פונקציה מחזורית בסריג.

(א) הראו שאם $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ היא האנרגיה העצמית המתאימה ל-$\Psi_{\mathbf{k}}$, אז $u_{\mathbf{k}}$ מקיימת את המשוואה

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m}\left(-i\overrightarrow{\nabla} + \mathbf{k}\right)^2 + V(\mathbf{r})\right]u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \varepsilon_{\mathbf{k}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

כאשר במשוואה זו יש להתייחס ל-$\mathbf{k}$ כאל פרמטר (לא אופרטור).

(ב) נסמן לכל $\mathbf{k}$

$$H_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(-i\overrightarrow{\nabla} + \mathbf{k}\right)^2 + V(\mathbf{r})$$

פתחו את $H_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}$, כאשר $\mathbf{q}$ פרמטר קטן, לסדר ראשון ב-$\mathbf{q}$. זכרו שבאופן כללי, עבור המילטוניאן מהצורה $H = H_0 + H_1$ כאשר המצבים העצמיים של H_0 ידועים, $H_0\psi_n = E_n^0\psi_n$, ו-H_1 מייצג הפרעה, התיקון מסדר ראשון (לפי תורת הפרעות) לאנרגיות העצמיות הוא

$$E_n = E_n^0 + \int \mathrm{d}\mathbf{r}\, \psi_n^* H_1 \psi_n + O\left({H_1}^2\right)$$

השתמשו בכך כדי להראות שמתקיים

$$\frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\hbar^2}{m}\int \mathrm{d}\mathbf{r}\, u_{\mathbf{k}}^*\left(-i\overrightarrow{\nabla} + \mathbf{k}\right)u_{\mathbf{k}}$$

(ג) אופרטור המהירות מוגדר בתור $\mathbf{v} = (-i/\hbar)[\mathbf{r}, H] = (-i\hbar/m)\overrightarrow{\nabla}$. הסיקו מהסעיף הקודם

שהנגזרת של $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ לפי $\mathbf{k}$ נותנת את ערך התצפית של מהירות האלקטרון, כלומר שמתקיים

$$\frac{1}{\hbar}\frac{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} = \langle \Psi_{\mathbf{k}} | \, \mathbf{v} \, | \Psi_{\mathbf{k}} \rangle$$

2. נתונה שרשרת חד-מימדית עם פרמטר סריג a. אלקטרון בשרשרת מרגיש פוטנציאל מחזורי $U(x)$, הבנוי מסכום של מחסומי פוטנציאל מהצורה $v(x)$ אשר ממורכזים בנקודות הסריג $x = na$,

$$U(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} v(x - na)$$

נתון כי הרוחב של המחסום הבודד $v(x)$ הוא a, כלומר $v(x) = 0$ לכל $x \geq \frac{a}{2}$ ו-$x \leq -\frac{a}{2}$, וכי המחסום סימטרי, $v(x) = v(-x)$. נניח שאנחנו יודעים לפתור את בעיית הפיזור מהמחסום הבודד: בהינתן שההמילטוניאן הוא $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + v(x)$, לכל תנע $q > 0$ ידועים מצבי הפיזור שמהווים מצבים עצמיים של H עם אנרגיה $\varepsilon = \frac{\hbar^2 q^2}{2m}$. מצב הפיזור משמאל הוא

$$\Psi^{(q)}_{\text{left}}(x) = \begin{cases} e^{iqx} + r_q e^{-iqx} & x \leq -\frac{a}{2} \\ t_q e^{iqx} & x \geq \frac{a}{2} \end{cases}$$

ומצב הפיזור מימין הוא $\Psi^{(q)}_{\text{right}}(x) = \Psi^{(q)}_{\text{left}}(-x)$. שימו לב שאמפליטודות ההעברה וההחזרה t_q ו-r_q זהות עבור שני מצבי הפיזור בגלל הסימטריה של המחסום $v(x)$. המצבים $\Psi^{(q)}_{\text{left}}$ ו-$\Psi^{(q)}_{\text{right}}$ מוגדרים גם בתחום המחסום עצמו, $|x| < \frac{a}{2}$, אך לא יהיה לנו צורך לדעת כיצד הם מתנהגים בתחום זה.
בשאלה זו נמצא את יחס הנפיצה $\varepsilon(k)$ עבור הפוטנציאל **המחזורי** $U(x)$. בהינתן אנרגיה כלשהי $\varepsilon > 0$, נסמן $q \equiv \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}$ ונחפש מצב עצמי $\Psi(x)$ המתאים לאנרגיה ε. בתחום $-\frac{a}{2} \leq x \leq \frac{a}{2}$ מתקיים $U(x) = v(x)$, ולכן $\Psi(x)$ יהיה שווה בתחום זה לסופרפוזיציה של $\Psi^{(q)}_{\text{left}}(x)$ ו-$\Psi^{(q)}_{\text{right}}(x)$. מצד שני, לפי משפט בלוך קיים k כך שלכל x מתקיימות הדרישות

$$\Psi(x+a) = e^{ika}\Psi(x)$$
$$\Psi'(x+a) = e^{ika}\Psi'(x)$$

הציבו $x = -\frac{a}{2}$, ומתוך מערכת המשוואות המתקבלת הגיעו לקשר הבא:

$$\boxed{\cos(ka) = \frac{{t_q}^2 - {r_q}^2}{2t_q}e^{iqa} + \frac{1}{2t_q}e^{-iqa}}$$

משוואה זו אכן קובעת את יחס הנפיצה $\varepsilon(k)$ משום ש-q תלוי ב-ε.

3. בשאלה זו ננתח את יחס הנפיצה שהתקבל בשאלה 2 עבור הפוטנציאל המחזורי $U(x)$.

(א) משימור זרם ההסתברות בתהליך הפיזור נובעת הדרישה לפיה מטריצת הפיזור היא בהכרח מטריצה אוניטרית, ולכן מתקיים $\left|r_q\right|^2+\left|t_q\right|^2=1$ והמספר $r_q t_q^*$ הוא מדומה טהור. נכתוב את אמפליטודת ההעברה בתור $t_q=\left|t_q\right|e^{i\phi_q}$. הראו שאת הקשר בין k ל-q, הקובע את יחס הנפיצה, ניתן כעת לכתוב באופן הבא:

$$\cos(ka)=\frac{1}{\left|t_q\right|}\cos\left(qa+\phi_q\right)$$

(ב) אמפליטודת ההעברה t_q מקיימת $t_q\to 1$ כאשר q גדל (השפעת המחסום פוחתת ככל שאנרגיית האלקטרון הפוגע בו גבוהה יותר), אבל עבור הרוב המוחלט של ערכי q יתקיים $\left|t_q\right|<1$. נסמן בתור q_n את הערכים עבורם $q_n a+\phi_q=n\pi$, כאשר n מספר טבעי. הסבירו מדוע עבור ערכים של q בסביבת q_n **אין פתרון** למשוואה שקובעת את יחס הנפיצה. ערכי האנרגיה ε המתאימים לאותם ערכי q הם ערכי אנרגיה אסורים, כלומר הם מגדירים **פערי אנרגיה** סביב האנרגיות $\varepsilon_n=\hbar^2 q_n^2/2m$.

4. בתרגול מצאנו את יחס הנפיצה עבור מודל קרוניג-פני: מודל של שרשרת חד-מימדית עם קבוע סריג a ועם פוטנציאל מחזורי מצורה של פונקציות מלבן ברוחב b ובגובה v_0.

(א) מצאו את יחס הנפיצה בגבול של פוטנציאל חלש מאוד, וציירו את מבנה הפסים. הראו כי האנרגיות המתקבלות הן של אלקטרונים חופשיים, אך מתאימות גם לאלקטרוני בלוך (כלומר, ספקטרום האנרגיה אינוריאנטי להזזה של k בווקטור סריג הופכי G).

(ב) מצאו את יחס הנפיצה בגבול של פוטנציאל חזק מאוד. באיזו מערכת מתקבלות רמות אנרגיה זהות לאלו שקיבלתם? ציירו את מבנה הפסים המתקבל. מהו הניוון של כל רמת אנרגיה?

5. בתרגול פתרנו מודל של שרשרת חד-מימדית עם שני אטומים בתא יחידה, ומצאנו כי ביחס הנפיצה האלקטרוני מתקבלים שני פסי אנרגיה $\varepsilon_\pm(k)$.

(א) הראו כי במרכז אזור ברילואן הראשון ($k\to 0$) ניתן לקרב את יחס הנפיצה של הפס התחתון באופן הבא:

$$\varepsilon_-(k)\approx\frac{t^2a^2k^2}{\sqrt{\left(\varepsilon_0^A-\varepsilon_0^B\right)^2+16t^2}}+\text{const.}$$

מהי המסה האפקטיבית של האלקטרונים תחת קירוב זה?

(ב) מהו יחס הנפיצה $\varepsilon_\pm(k)$ בגבול שבו איבר hopping קטן מאוד, $t\to 0$? הסבירו את התוצאה.