$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\bar{r}) \qquad (1)$$

$$V(\bar{r}+\bar{R}) = V(\bar{r})$$

$$\Psi_{\bar{k}}(\bar{r}) = e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}\, u(\bar{r})$$

$$u(\bar{r}+\bar{R}) = u(\bar{r})$$

$$H\,\Psi_{\bar{k}} = \varepsilon_{\bar{k}}\,\Psi_{\bar{k}} \qquad (k$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\bar{r})\right] e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}\, u(\bar{r}) = \varepsilon_{\bar{k}}\, e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}\, u(\bar{r})$$

$$-\nabla^2\left(e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}u(\bar{r})\right) = -\nabla\left(i\bar{k}e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}u + e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}\nabla u\right)$$

$$= +k^2 e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}u - i\bar{k}e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}\nabla u - i\bar{k}e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}\nabla u - e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}\nabla^2 u$$

$$= e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}\left[-\nabla^2 u - 2i\bar{k}\bar{\nabla}u + k^2 u\right]$$

$$= e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}\left[-i\bar{\nabla} + \bar{k}\right]^2 u$$

$$\Rightarrow \quad \left[\frac{\hbar^2}{2m}\left(-i\bar{\nabla} + \bar{k}\right)^2 + V(\bar{r})\right]u(\bar{r}) = \varepsilon_{\bar{k}}\, u(\bar{r})$$

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

$$\rightarrow \qquad -\nabla^2 - 2i\bar{k}\cdot\bar{\nabla} + k^2$$

$$-\nabla^2 - 2i(\bar{k}+\bar{q})\bar{\nabla} + (k+q)^2$$

לכן עד סדר ראשון:

$$H_{\bar{k}+\bar{q}} \approx \frac{\hbar^2}{2m}\left[-\nabla^2 - 2i\bar{k}\cdot\bar{\nabla} + k^2 - 2i\bar{q}\cdot\bar{\nabla} + 2\bar{k}\cdot\bar{q}\right] + V(\bar{r})$$

$$\Rightarrow \quad H_1 = \frac{\hbar^2}{m}\bar{q}\cdot\left(\bar{k} - i\bar{\nabla}\right)$$

נסתכל על $\int d^3r\, \psi_n^* H_1 \psi_n$

ונציין שכאן $\psi_n = u_{\bar{k}}(\bar{r})$

בנוסף שים לב שאם נגזור $\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial \bar{q}}$ נקבל בדיוק את מה שמבוקש.

לכן צריך רק שאר להוכיח $\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial \bar{q}} = \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial \bar{k}}$,

אבל כבר ראינו ש $\frac{\partial \varepsilon_{k,\bar{q}}}{\partial \bar{q}} = \frac{\hbar^2}{m}\left(\bar{k} - i\bar{\nabla}\right)$

לכן צריך להראות שגם $\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial \bar{k}}$ יוצא אותו דבר.

אבל אם נגזור את H הנ"ל מפורש נקבל אותו דבר

$$\frac{\partial}{\partial \bar{k}}\left(\frac{\hbar^2}{2m}\left(-i\bar{\nabla}+\bar{k}\right)^2 + V(\bar{r})\right) = \frac{\hbar^2}{m}\left(-i\bar{\nabla}+\bar{k}\right) = \frac{\partial \varepsilon_{k,\bar{q}}}{\partial \bar{q}}$$

ג)

$$\hat{V} = -\frac{i\hbar}{m}\bar{\nabla}$$

$$\Rightarrow \quad -i\bar{\nabla} = \frac{m}{\hbar}\bar{V}$$

$$\Rightarrow \quad \frac{\partial \varepsilon_k}{\partial k} = \frac{\hbar^2}{m}\int d^3r\, u_k^*\left(\frac{m}{\hbar}\bar{V} + \bar{k}\right)u_k$$

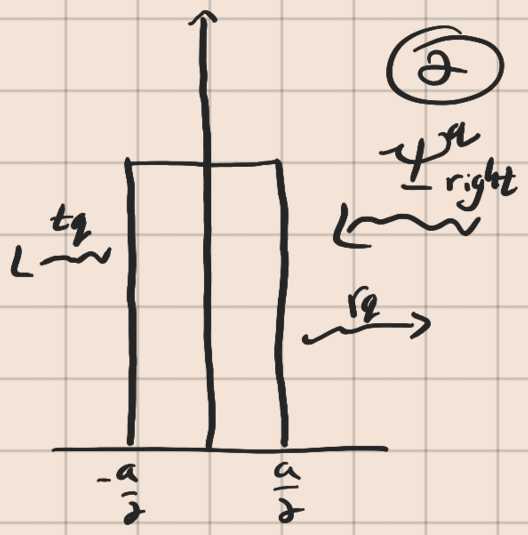
$$= \hbar\int d^3r\, u_k^* \bar{V} u_k + \frac{\hbar^2}{m}\int d^3r\, u_k^* \bar{k} u_k$$

ע"י הכפלה ב $1 = e^{i\bar{k}\cdot\bar{r}}e^{-i\bar{k}\cdot\bar{r}}$ ונקבל

$$\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial \bar{k}} = \hbar\langle \psi_k|\bar{V}|\psi_k\rangle + \frac{\hbar^2}{m}\langle \psi_k|\bar{k}|\psi_k\rangle$$

אבל מכיוון שאין בזה תלוי $\langle \bar{k}\rangle = 0$ לכן הוכחנו את המבוקש.

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



$$\Psi^q_{right} = \begin{cases} t_q e^{-iqx} & x \leq -\frac{a}{2} \\ r_q e^{iqx} + e^{-iqx} & x \geq \frac{a}{2} \end{cases}$$

ולפי הנ״ל ס״כ:

$$\Psi = A\Psi_{left} + B\Psi_{right}$$

$$= \begin{cases} A\left(e^{iqx} + r_q e^{-iqx}\right) + B t_q e^{-iqx} & x \leq -\frac{a}{2} \\ A t_q e^{iqx} + B\left(r_q e^{iqx} + e^{-iqx}\right) & x \geq \frac{a}{2} \end{cases}$$

$x + a = \frac{a}{2}$ נציב את שפת בלוק ב-$x = -\frac{a}{2}$:

$$\psi\left(\frac{a}{2}\right) = e^{ika}\,\psi\left(-\frac{a}{2}\right)$$

$$\psi'\left(\frac{a}{2}\right) = e^{ika}\,\psi'\left(-\frac{a}{2}\right)$$

$$A t_q e^{iq\frac{a}{2}} + B\left(r_q e^{iq\frac{a}{2}} + e^{-iq\frac{a}{2}}\right) = e^{ika}\left[A\left(e^{-iq\frac{a}{2}} + r_q e^{iq\frac{a}{2}}\right) + B t_q e^{iq\frac{a}{2}}\right]$$

$$A t_q e^{iq\frac{a}{2}} + B\left(r_q e^{iq\frac{a}{2}} - e^{-iq\frac{a}{2}}\right) = e^{ika}\left[A\left(e^{-iq\frac{a}{2}} - r_q e^{iq\frac{a}{2}}\right) - B t_q e^{iq\frac{a}{2}}\right]$$

מחיבור השוואות:

$$2 A t_q e^{iq\frac{a}{2}} + 2 B r_q e^{iq\frac{a}{2}} = 2 A e^{ika} e^{-iq\frac{a}{2}}$$

$$e^{iq\frac{a}{2}}\left(A t_q + B r_q\right) = A e^{ika} e^{-iq\frac{a}{2}}$$

ומחיסור:

$$B e^{-iq\frac{a}{2}} = A e^{ika} r_q e^{iq\frac{a}{2}} + e^{ika} B t_q e^{iq\frac{a}{2}}$$

$$= e^{ika} e^{iq\frac{a}{2}}\left(A r_q + B t_q\right)$$

$$\begin{vmatrix} e^{iq\frac{a}{2}} t_q - e^{ika} e^{-iq\frac{a}{2}} & e^{iq\frac{a}{2}} r_q \\ e^{ika} e^{iq\frac{a}{2}} r_q & e^{ika} e^{iq\frac{a}{2}} t_q - e^{-iq\frac{a}{2}} \end{vmatrix} \Leftarrow$$

$$= \left(e^{iq\frac{a}{2}} t - e^{ika} e^{-iq\frac{a}{2}}\right)\left(e^{ika} e^{iq\frac{a}{2}} t - e^{-iq\frac{a}{2}}\right) - r^2 e^{ika} e^{iqa}$$

$$= e^{ika} e^{iqa} t^2 - t - e^{2ika} t + e^{ika} e^{-iqa} - r^2 e^{ika} e^{iqa}$$

$$= e^{ika} e^{iqa}(t^2 - r^2) - t\underbrace{(1 + e^{2ika})}_{e^{ika}(e^{-ika} + e^{ika})} + e^{ika} e^{-iqa}$$

$$= e^{ika}\left[e^{iqa}(t^2 - r^2) - 2t\cos(ka) + e^{-iqa}\right] = 0$$

$$\hookrightarrow \quad 2t\cos(ka) = (t^2 - r^2) e^{iqa} + e^{-iqa}$$

$$\cos(ka) = \frac{t^2 - r^2}{2t} e^{iqa} + \frac{1}{2t} e^{-iqa}$$

$$\cos(ka) = \frac{t_q^2 - r_q^2}{2t_q} e^{iqa} + \frac{1}{2t_q} e^{-iqa} \qquad (k \quad 3$$

$$|r_q|^2 + |t_q|^2 = 1 \qquad t_q = |t_q| e^{i\phi_q}$$

$$r_q t_q^* \propto i$$

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

$$t_q^* = |t_q| e^{-i\phi_q} \Leftarrow t_q = |t_q| e^{i\phi_q} \qquad \text{ok}$$

$$r_q t_q^* = \underset{\substack{\downarrow \\ |r_q| e^{i\varphi}}}{r_q} |t_q| e^{-i\phi_q} \propto i$$

כי [illegible] ש $r_q t_q^* \propto i$ $\quad r_q = |r_q| i e^{i\phi_q}$

$$\Rightarrow \quad t_q^2 - r_q^2 = |t_q|^2 e^{2i\phi_q} + |r_q|^2 e^{2i\phi_q} = e^{2i\phi_q}$$

$$\Rightarrow \quad \cos(ka) = \frac{e^{2i\phi_q}}{2|t_q| e^{i\phi_q}} e^{iqa} + \frac{1}{2|t_q| e^{i\phi_q}} e^{-iqa}$$

$$= \frac{1}{2|t_q|} e^{i(qa+\phi_q)} + \frac{1}{2|t_q|} e^{-i(qa+\phi_q)}$$

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

ב) בהצבת q_n נקבל

$$\cos(ka) = \frac{(-1)^n}{|t_q|}$$

ואין פתרון מכיוון ש $|t_q|<1$ ואז $\left|\frac{(-1)^n}{|t_q|}\right| > 1$

אך הקוסינוס חסום בין 1 ל- -1 ולכן אין

פתרון.

4) א)

$$V_0 \ll E$$
$$\Downarrow$$
$$\alpha = \beta$$

$$\cos(ka) = \cos(\alpha b)\cos(\alpha(a-b))$$

$$-\sin(\alpha b)\sin(\alpha(a-b))$$

$$= \cos(\alpha b + \alpha a - \alpha b)$$

$$= \cos(\alpha a)$$

$$ka = \alpha a + 2\pi n$$

$$k = \alpha + \frac{2\pi n}{a}$$

$$\left(k - \frac{2\pi n}{a}\right)^2 = \alpha^2$$

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k - \frac{2\pi n}{a}\right)^2$$

ואם $G = \frac{2\pi}{a} m$ ונציג ב G

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m}\left(k + \frac{2\pi}{a}(m-n)\right)^2$$

אG יש את G ה-n-ים לכן ה-m יהיה
לא שלם.

ב)

$$V_0 \gg \varepsilon$$

$$\Downarrow$$

$$\beta \propto i \qquad \beta \approx \lambda i$$

$$|\beta| \gg \alpha$$

$$\Downarrow$$

$$\frac{\beta\left(\cancel{\frac{\alpha^2}{\beta^2}}+1\right)}{2\alpha\cancel{\beta}} \to \frac{\beta}{2\alpha}$$

אם נצריך
גם את הסדר
השני לו יישאר
הרבה

$$\cos(\lambda b i) = \frac{e^{\overset{-1}{i(\lambda b i)}} + e^{\overset{+1}{-i(\lambda b i)}}}{2} \approx \frac{e^{\lambda b}}{2}$$

$$\sin(\lambda b i) \approx -\frac{e^{\lambda b}}{2i}$$

$$\Rightarrow \cos(ka) = \frac{e^{\lambda b}}{2}\cos(\alpha(a-b)) + \frac{\overset{\lambda i}{\cancel{\beta}}}{2\alpha}\,\frac{e^{\lambda b}}{2\cancel{i}}\sin(\alpha(a-b))$$

נשים לב ש λ גדול מאוד ולכן בגבול

שבו $\lambda \to \infty$ נקבל מה שציפינו

צריך להתקיים:

$$\cos(\alpha(a-b)) + \frac{\lambda}{2\alpha}\sin(\alpha(a-b)) \simeq 0$$

אבל $\lambda \gg \alpha$, ולכן נקבל:

$$\sin(\alpha(a-b)) \simeq -\frac{2\alpha}{\lambda}\cos(\alpha(a-b))$$

$$\Rightarrow \quad \sin(\alpha(a-b)) \simeq 0$$

$$\alpha(a-b) = \pi n$$

$$\alpha^2 (a-b)^2 = \pi^2 n^2$$

$$\frac{\varepsilon 2m}{\hbar^2}(a-b)^2 = \pi^2 n^2$$

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m(a-b)^2} n^2$$

ספקטרום של בור אינסופי

לכל הפתרונות יש N מסוים אותה אנרגיה וני אין

תלות ב-k. ויש N אתרים, ולכן הניוון הוא N

כפול הספין

$$\varepsilon_-(k) = \frac{1}{2}\left[(\varepsilon_0^A + \varepsilon_0^B) - \sqrt{(\varepsilon_0^A - \varepsilon_0^B)^2 + 16t^2\cos^2\left(\frac{ka}{2}\right)}\right]_{k} \quad 5$$

עבור $k \to 0$

$$\cos^2\left(\frac{ka}{2}\right) \simeq \left(1 - \frac{a^2 k^2}{8}\right)^2$$

$$\sqrt{(\varepsilon_0^A-\varepsilon_0^B)^2+16t^2\left(1-\frac{a^2k^2}{8}\right)^2} \approx \sqrt{(\varepsilon_0^A-\varepsilon_0^B)^2+16t^2}$$

$$-\frac{2a^2t^2k^2}{\sqrt{(\varepsilon_0^A-\varepsilon_0^B)^2+16t^2}} + \mathcal{O}(k^4)$$

$$\Rightarrow \varepsilon_-(k) \approx \frac{1}{2}\left[(\varepsilon_0^A+\varepsilon_0^B) - \sqrt{(\varepsilon_0^A-\varepsilon_0^B)^2+16t^2} + \frac{2a^2t^2k^2}{\sqrt{(\varepsilon_0^A-\varepsilon_0^B)^2+16t^2}}\right]$$

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

המסה האפקטיבית מחושבת מהמקדם של האיבר הריבועי:

$$\frac{\hbar^2}{2m^*}\cancel{k^2} = \frac{a^2t^2\cancel{k^2}}{\sqrt{(\varepsilon_0^A-\varepsilon_0^B)^2+16t^2}}$$

$$\boxed{m^* = \frac{\hbar^2\sqrt{(\varepsilon_0^A-\varepsilon_0^B)^2+16t^2}}{2a^2t^2}}$$

ב) קודם כל נדבר שבלי איבר hopping

אין נפירה, והם:

$$\varepsilon_\pm \xrightarrow{t\to 0} \frac{1}{2}\left[(\varepsilon_0^A+\varepsilon_0^B) \pm (\varepsilon_0^A-\varepsilon_0^B)\right] = \begin{cases}\varepsilon_0^A \\ \varepsilon_0^B\end{cases}$$

כלומר יש שתי אנרגיות קבועות של שתי האורביטלים.

מכיוון שהאלקטרונים לא יכולים לעבור בין האטומים יש להם שתי אנרגיות אפשריות, אחת לכל אטום.