מבוא למצב מוצק תשפ"ג – תרגול 1
התפלגויות בסיסיות וצפיפות מצבים

כללי

- מתרגל: שחר פרנקל, shacharf@mail.tau.ac.il
- תרגולים בימי ב' 9:10-10:00 ו-ה' 16:10-17:00.
- שעת קבלה: יום ה' 17:00 (בתיאום מראש במייל).
- תרגילי בית: תרגיל שבועי יעלה מדי יום ב', ויש להגיש אותו עד יום ה' בשבוע לאחר מכן (תוך 10 ימים) דרך המודל. יש להעלות תרגילי בית בפורמט PDF. **חובת הגשה של 70% מהשאלות, כתנאי לגשת לבחינה.** (12 תרגילי בית, כ-55 שאלות בסך הכל.)
- ספרות מומלצת לקורס:
  - Neil Ashcroft, N. David Mermin: Solid State Physics
  - Steven Simon: The Oxford Solid State Basics
- ספרות מומלצת לתרגול זה:

- Ashcroft, Mermin: pp. 32–44
- Simon: ch. 2

1 פונקציות התפלגות קוונטיות

בעולם תלת-מימדי אנו מבחינים בין שני סוגים של חלקיקים עם סטטיסטיקה שונה: **פרמיונים ובוזונים**. בהיעדר אינטראקציות, האכלוס הממוצע של מצב חד-חלקיקי כלשהו עם אנרגיה ε נתון בשני המקרים על ידי פונקציה פשוטה של ε, של הפוטנציאל הכימי μ ושל הטמפרטורה $k_BT \equiv \beta^{-1}$.

התפלגות Fermi-Dirac

$$\langle n_F(\varepsilon)\rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1} \equiv f_{FD}(\varepsilon)$$

בגבול $T \to 0$ מקבלים בפרט

$$f_{FD}(\varepsilon) = \begin{cases} 1 & \varepsilon < \mu \\ 0 & \varepsilon > \mu \end{cases}$$

התפלגות Bose-Einstein

$$\langle n_B(\varepsilon)\rangle = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}-1} \equiv f_{BE}(\varepsilon)$$

2 גז אלקטרונים חופשיים

האלקטרונים (פרמיונים עם ספין $1/2$) לא מושפעים מפוטנציאל חיצוני או מאינטראקציות, והאיבר היחיד במשוואת שרדינגר הוא האיבר של האנרגיה הקינטית,

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi = \varepsilon\psi$$

הפתרונות למשוואה הם גלים מישוריים

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad ; \quad \varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$$

ונוח לבחור תנאי שפה מחזוריים (Born-von Karman) עבור הנפח $V = L^3$, כך שערכי התנע המותרים הם

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{L}\left(n_x, n_y, n_z\right)$$

כאשר n_x, n_y, n_z שלמים. הבחירה הזו מאפשרת לעבור מסכום בדיד לאינטגרל (בגבול $V \to \infty$) על פי הכלל

$$\frac{1}{V}\sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) \longrightarrow \int \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{8\pi^3}F(\mathbf{k})$$

האינטגרל הוא על כל מרחב $\mathbf{k}$ התלת-מימדי. דרך מקובלת לנסח את כלל המעבר הזה היא לומר שבמרחב $\mathbf{k}$, כל מצב תופס נפח של $8\pi^3/V$.

כאשר האינטגרנד תלוי ב-$\mathbf{k}$ רק דרך תלות ישירה באנרגיה $\varepsilon(\mathbf{k})$ – כלומר, $F(\mathbf{k}) = F(\varepsilon(\mathbf{k}))$ – ניתן לעבור לאינטגרל על האנרגיה ε תוך שימוש ב**צפיפות המצבים** $g(\varepsilon)$. למשל, הצפיפות הנפחית הממוצעת של גז האלקטרונים החופשיים וצפיפות האנרגיה שלו ניתנות לכתיבה בתור

$$n = 2\int \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{8\pi^3} f_{FD}(\varepsilon(\mathbf{k})) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon\, g(\varepsilon)\, f_{FD}(\varepsilon)$$

$$u = 2\int \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{8\pi^3} \varepsilon(\mathbf{k})\, f_{FD}(\varepsilon(\mathbf{k})) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon\, g(\varepsilon)\varepsilon f_{FD}(\varepsilon)$$

כאשר האינטגרל הראשון הוא על כל מרחב $\mathbf{k}$, והפקטור הכפלי של 2 נובע מניוון ספין (לכל מצב של גל מישורי עם $\mathbf{k}$ נתון מתאימים שני מצבי ספין בלתי-תלויים).

תרגיל

חשבו את צפיפות המצבים $g(\varepsilon)$ עבור גז אלקטרונים חופשיים.

פתרון

האנרגיה $\varepsilon(\mathbf{k})$ תלויה רק ב-$k = |\mathbf{k}|$, ולכן

$$2\int \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{8\pi^3} F(\varepsilon(\mathbf{k})) = \int_0^{\infty} \frac{k^2\mathrm{d}k}{\pi^2} F(\varepsilon(k))$$

נבחין כי

$$\mathrm{d}\varepsilon = \frac{\hbar^2}{m} k\mathrm{d}k \longrightarrow k^2\mathrm{d}k = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot \frac{m}{\hbar^2}\mathrm{d}\varepsilon$$

ואז

$$2\int \frac{\mathrm{d}\mathbf{k}}{8\pi^3} F(\varepsilon(\mathbf{k})) = \int_0^{\infty} \frac{k^2\mathrm{d}k}{\pi^2} F(\varepsilon(k)) = \int_0^{\infty} \mathrm{d}\varepsilon \frac{m}{\pi^2\hbar^2} \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} \cdot F(\varepsilon)$$

$$\longrightarrow g(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{\varepsilon} & \varepsilon > 0 \\ 0 & \varepsilon \le 0 \end{cases}$$

הערות

1. הגודל $V \cdot g(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon$ מציין את מספר המצבים החד-חלקיקיים הקיימים בטווח האנרגיות שבין ε לבין $\varepsilon + \mathrm{d}\varepsilon$.

2. צפיפות המצבים לא מכילה תלות בטמפרטורה, ולא מצביעה על ערך ייחודי כלשהו של אנרגיה דוגמת אנרגיית פרמי ε_F. המידע הזה מגולם על ידי פונקציית ההתפלגות של פרמי-דיראק f_{FD}.

3. צפיפות המצבים בלתי-תלויה גם בסטטיסטיקה. צפיפות המצבים של גז בוזונים חופשיים תהיה **זהה**, עד כדי פקטור מספרי של שינוי ניוון הספין.

4. צפיפות המצבים מגלמת את כל המידע שיש לנו על ספקטרום האנרגיה של החלקיקים (פונקציית ההתפלגות f_{FD} לא תלויה בספקטרום).

דרך פתרון נוספת

נסמן בתור $\Omega(\varepsilon)$ את מספר המצבים המתאימים לאנרגיות קטנות או שוות ל-ε. אז מתקיים

$$V \cdot g(\varepsilon)\,\mathrm{d}\varepsilon = \Omega(\varepsilon + \mathrm{d}\varepsilon) - \Omega(\varepsilon) \longrightarrow g(\varepsilon) = \frac{1}{V} \cdot \frac{\mathrm{d}\Omega}{\mathrm{d}\varepsilon}$$

מיחס הנפיצה אנחנו מבינים שהמצבים שנספרים על ידי $\Omega(\varepsilon)$ הם המצבים במרחב $\mathbf{k}$ המקיימים

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \leq \varepsilon \longrightarrow |\mathbf{k}| \leq \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}$$

כלומר, הם מוכלים בתוך כדור במרחב $\mathbf{k}$ ברדיוס $\sqrt{2m\varepsilon/\hbar^2}$. כל מצב $\mathbf{k}$ תופס נפח של $8\pi^3/V$ במרחב $\mathbf{k}$, ולכן מספר המצבים בכדור נתון על ידי

$$2 \times \left(\frac{8\pi^3}{V}\right)^{-1} \frac{4\pi}{3} \left(\sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}\right)^3 = \frac{V}{3\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \varepsilon^{3/2}$$

כאשר הפקטור הכפלי 2 נובע מניוון ספין. לפיכך קיבלנו שצפיפות המצבים נתונה על ידי

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{V} \cdot \frac{\mathrm{d}\Omega}{\mathrm{d}\varepsilon} = \begin{cases} \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\varepsilon} & \varepsilon > 0 \\ 0 & \varepsilon \leq 0 \end{cases}$$

וזו כמובן אותה התוצאה שהתקבלה בדרך הפתרון הראשונה.

תרגיל

בהינתן צפיפות n, חשבו את k_F (תנע פרמי) ואת ε_F (אנרגיית פרמי) עבור גז אלקטרונים חופשיים ב-3D.

פתרון

תנע פרמי מוגדר מתוך הדרישה שב-$T=0$ המצבים המאוכלסים יהיו בדיוק כל המצבים עם תנע שגודלו קטן מ-k_F; מספר המצבים המאוכלסים צריך להיות שווה ל-nV, ולכן

$$nV = 2\times\left(\frac{8\pi^3}{V}\right)^{-1}\frac{4\pi}{3}k_F^3 \longrightarrow k_F = \left(3\pi^2 n\right)^{1/3}$$

בהתאם לכך, אנרגיית פרמי היא

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2 n\right)^{2/3}$$

3 נספח: תזכורת לגבי מוצק הרמוני קוונטי ומודל Debye

בתיאור הקוונטי של תנודות הרמוניות במוצק, המוצק מתואר כאוסף של אוסילטורים הרמוניים קוונטיים בלתי תלויים, כשכל אוסילטור מתאים לאופן תנודה מסוים עם קיטוב מסוים (במימד d יש d קיטובים בלתי-תלויים לכל תנע $\mathbf{k}$). רמות האנרגיה של האוסילטור המתאים לאופן תנודה עם תנע $\mathbf{k}$ וקיטוב s הן

$$E_{\mathbf{k},s} = \left(n_{\mathbf{k},s} + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_s(\mathbf{k})$$

כאשר $n_{\mathbf{k},s} = 0,1,2,...$.

השלב הבא הוא לבחור מודל ספציפי עבור יחס הנפיצה $\omega_s(\mathbf{k})$. במסגרת מודל Debye יחס הנפיצה לינארי (אקוסטי):

$$\omega(\mathbf{k}) = ck$$

מודל Debye מניח למעשה שהתנודות במוצק נובעות מגלי קול. בדומה לפוטונים, שהם החלקיקים המייצגים את הקוונטיזציה של גלים אלקטרומגנטיים, את הקוונטיזציה של גלי הקול ניתן לייצג על ידי חלקיקים המכונים **פונונים** (phonons). במקום לומר שהאוסילטור המתאים לאופן $\mathbf{k}, s$ מעורר לרמה $n_{\mathbf{k},s}$, נאמר שיש $n_{\mathbf{k},s}$ פונונים שמאכלסים את האופן $\mathbf{k}, s$, ושלכל פונון כזה מתאימה אנרגיה $\hbar\omega_s(\mathbf{k})$. ניתן להראות (שאלה 4 בתרגיל הבית) כי פונונים הם בוזונים, ולפיכך התכונות התרמודינמיות שלהם נקבעות בהתאם להתפלגות בוז-איינשטיין (אין אינטראקציה בין פונונים).

הנחה נוספת של מודל Debye היא שמספר אופני התנודה המותרים במוצק שווה למספר דרגות החופש הקלאסיות: $3N$, כאשר N מספר האטומים (ב-3 מימדים; באופן כללי, ב-d מימדים יהיו $d\cdot N$ דרגות חופש קלאסיות). ההנחה הזו מתבטאת בקיומה של תדירות קיטעון $\omega_D = ck_D$, שמתחתיה כל אופני התנודה מותרים ומעליה כל אופני התנודה אסורים.

תרגיל

מצאו את צפיפות המצבים (ליחידת תדירות וליחידת נפח) $g(\omega)$ עבור מערכת הפונונים של מוצק תלת-מימדי עם צפיפות אטומים נפחית n. בטאו באמצעותה את צפיפות האנרגיה של הפונונים ליחידת נפח.

פתרון

נכתוב

$$g(\omega) = \frac{1}{V} \cdot \frac{\mathrm{d}\Omega}{\mathrm{d}\omega}$$

כאשר $\Omega(\omega)$ הוא מספר אופני התנודה עם תדירות קטנה או שווה ל-ω. במרחב $\mathbf{k}$ אלו הם אופני התנודה המקיימים $c\,|\mathbf{k}| \leq \omega$, ולכן הם ממלאים כדור ברדיוס $k = \omega/c$, כאשר צריך להכפיל ב-3 לצורך ספירת הקיטובים השונים המתאימים לאותו $\mathbf{k}$:

$$\begin{aligned}\Omega(\omega) &= 3 \cdot \left(\frac{8\pi^3}{V}\right)^{-1} \frac{4\pi}{3} \left(\frac{\omega}{c}\right)^3 = \frac{V}{2\pi^2 c^3}\omega^3 \\ \longrightarrow g(\omega) &= \frac{3}{2\pi^2 c^3}\omega^2\end{aligned}$$

אלא שחשוב לשים לב שהחישוב הזה תקף <u>אך ורק</u> לתדירויות שנמצאות מתחת לתדירות הקיטעון ω_D, שכן עבור $\omega > \omega_D$ אין מצבים מותרים ולכן בתחום זה $g(\omega) = 0$ על פי הגדרה. את ω_D מוצאים מתוך הדרישה על מספר אופני התנודה המותרים, $3N = \Omega(\omega_D) = \int\limits_{-\infty}^{\omega_D} g(\omega)\,\mathrm{d}\omega$:

$$3N = \frac{V}{2\pi^2 c^3}\omega_D^3 \longrightarrow \omega_D = c\left(6\pi^2 n\right)^{1/3}$$

לפיכך קיבלנו את צפיפות המצבים

$$g\left(\omega\right) = \begin{cases} 0 & \omega \leq 0 \\ \frac{3}{2\pi^2 c^3}\omega^2 & 0 < \omega \leq \omega_D \\ 0 & \omega > \omega_D \end{cases}$$

כעת ניתן לכתוב ביטוי עבור צפיפות האנרגיה מהצורה

$$u = \int\limits_{-\infty}^{\infty} g(\omega)\,\hbar\omega\left(f_{BE}(\hbar\omega) + \frac{1}{2}\right)\mathrm{d}\omega = \frac{3\hbar}{2\pi^2 c^3}\int\limits_{0}^{\omega_D} \omega^3\left(\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} + \frac{1}{2}\right)\mathrm{d}\omega$$

מכאן ניתן לחלץ את קיבול החום הסגולי באמצעות הקשר $c_v = \partial u/\partial T$:

$$c_v = \frac{3\hbar^2}{2\pi^2 c^3 k_B T^2} \int_0^{\omega_D} \frac{e^{\beta\hbar\omega}\omega^4 \mathrm{d}\omega}{\left(e^{\beta\hbar\omega}-1\right)^2}$$

אם מגדירים את טמפרטורת Debye $T_D = \hbar\omega_D/k_B$, אז עבור $T \ll T_D$ מקבלים

$$c_v \approx \frac{12\pi^4}{5}\left(\frac{T}{T_D}\right)^3 n k_B$$

הערה חשובה

גם במקרה של גז פרמי מנוון בטמפרטורה $T = 0$ וגם במקרה של מודל Debye, אינטגרלים מהצורה של u נקטעים בתדירות/אנרגיה מסוימת, אבל הסיבות לקטיעה הזו שונות בתכלית בין שני המקרים. במקרה של גז פרמי זהו אפקט שקיים רק עבור $T = 0$, והוא נובע מהצורה של פונקציית ההתפלגות. במקרה של מודל Debye זהו אפקט שמתבטא בכל טמפרטורה, והוא נובע מהצורה של פונקציית צפיפות המצבים.