נתון סריג חד מימדי עם תא יחידה באורך a. ניתן לפתור את משוואת שרדינגר ע"י שימוש במקדם העברה (t=|t|exp(iδ (והחזרה r) ולמצוא את האנרגיה ε. אם פונקצית הגל בתא יחידה אחד שונה מפונקצית הגל בתא יחידה שכן בפקטור (exp(iqa אז

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

כאשר

$$\cos(qa) = \frac{1}{|t|}\cos(ka+\delta)$$

עבור

$$t = \frac{\sqrt{3}}{2}$$
$$\delta = 0$$

א. מהן האנרגיות של ראש הפס הראשון ושל תחתית הפס השני? מהו פער האנרגיה ביניהן?

ב. המסה האפקטיבית מוגדרת כ $\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2}\frac{d^2\varepsilon}{dq^2}$. מהי המסה האפקטיבית של אלקטרון בראש הפס הראשון? מהי המסה האפקטיבית של אלקטרון בתחתית הפס השני?

הנחיה: השתמשו בכלל השרשרת והגיעו לביטוי ל $\frac{d^2\varepsilon}{dq^2}$ המכיל את $\frac{dk}{dq}$ ואת $\frac{d^2k}{dq^2}$. מצאו נגזרות אלו (כפונקציות של k ו q) ע"י גזירת המשוואה הנ"ל. לבסוף הציבו את k ו q המתאימים.

ג. מהירות האלקטרון ניתנת ע"י $v = \frac{1}{\hbar}\frac{d\varepsilon}{dq}$. מהי מהירות אלקטרון הנמצא בראש הפס הראשון? מהי מהירות אלקטרון הנמצא בתחתית הפס השני?

פתרון:

א. ראש הפס הראשון ותחתית הפס השני מקיימים:

$$q = \frac{\pi}{a} \rightarrow$$
$$-1 = \cos qa = \frac{2}{\sqrt{3}}\cos ka \rightarrow \cos ka = -\frac{\sqrt{3}}{2}$$
$$\rightarrow ka = \frac{5\pi}{6}, \frac{7\pi}{6} \rightarrow k = \frac{5\pi}{6a}, \frac{7\pi}{6a}$$

לכן, האנרגיות הן:

$$\varepsilon_1 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{5\pi}{6a}\right)^2 = \frac{25\pi^2\hbar^2}{72m}$$
$$\varepsilon_2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{7\pi}{6a}\right)^2 = \frac{49\pi^2\hbar^2}{72m}$$
$$\rightarrow \varepsilon_2 - \varepsilon_1 = \frac{24\pi^2\hbar^2}{72m} = \frac{\pi^2\hbar^2}{3m}$$

ב. נגזור את הנוסחה לאנרגיה:

$$\frac{d\varepsilon}{dq}=\frac{\hbar^2 k}{m}\frac{dk}{dq}$$

$$\to\frac{d^2\varepsilon}{dq^2}=\frac{\hbar^2}{m}\left(\left(\frac{dk}{dq}\right)^2+k\frac{d^2k}{dq^2}\right)$$

עתה נגזור את המשוואה ונחלץ את $\frac{dk}{dq}$:

$$-a\sin qa=-\frac{a}{t}\sin ka\frac{dk}{dq}$$

$$\to\frac{dk}{dq}=t\frac{\sin qa}{\sin ka}$$

נגזור שוב למציאת $\frac{d^2k}{dq^2}$:

$$\frac{d^2k}{dq^2}=t\left(\frac{a\cos qa}{\sin ka}-\frac{a\sin qa\cos ka}{\sin^2 ka}\frac{dk}{dq}\right)$$

$$=ta\left(\frac{\cos qa}{\sin ka}-\frac{t\sin^2 qa\cos ka}{\sin^3 ka}\right)$$

$$=ta\left(\frac{\sin^2 ka\cos qa-t\sin^2 qa\cos ka}{\sin^3 ka}\right)$$

נציב בביטוי ל $\frac{d^2\varepsilon}{dq^2}$:

$$\frac{d^2\varepsilon}{dq^2}=\frac{\hbar^2}{m}\left(\left(t\frac{\sin qa}{\sin ka}\right)^2+tka\left(\frac{\sin^2 ka\cos qa-t\sin^2 qa\cos ka}{\sin^3 ka}\right)\right)$$

$$=\frac{t\hbar^2}{m\sin^3 ka}\left(t\sin ka\sin^2 qa+ka\sin^2 ka\cos qa-tka\sin^2 qa\cos ka\right)$$

עתה נציב $qa=\pi$, ונקבל:

$$\frac{d^2\varepsilon}{dq^2}=\frac{t\hbar^2}{m\sin^3 ka}\left(-ka\sin^2 ka\right)=\frac{-t\hbar^2 ka}{m\sin ka}$$

$$\to m^*=-\frac{\sin ka}{tka}m$$

לראש הפס הראשון $k=\frac{5\pi}{6a}$, לכן: $m_1^*=-\frac{\sin\frac{5\pi}{6}}{\frac{\sqrt{3}}{2}\frac{5\pi}{6}}m=-\frac{\frac{1}{2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}\frac{5\pi}{6}}m=-\frac{2\sqrt{3}}{5\pi}m$.

לתחתית הפס השני $k=\frac{7\pi}{6a}$, לכן: $m_2^*=-\frac{\sin\frac{7\pi}{6}}{\frac{\sqrt{3}}{2}\frac{7\pi}{6}}m=-\frac{-\frac{1}{2}}{\frac{\sqrt{3}}{2}\frac{7\pi}{6}}m=\frac{2\sqrt{3}}{7\pi}m$.

כאשר הצבנו $t=\frac{\sqrt{3}}{2}$.

<u>הערה</u>: הדרך המובאת כאן אינה הדרך היחידה לפתרון. ניתן גם לחלץ את $\frac{d^2\varepsilon}{dq^2}$ ישירות מהמשוואה $\cos qa = \frac{1}{t}\cos ka$, כפונקציה של $\frac{dk}{d\varepsilon}$ ו $\frac{d^2k}{d\varepsilon^2}$, אותן ניתן לבטא ע"י k. מגיעים לאותה התוצאה.

ג. המהירות המוגדרת כנגזרת הראשונה של הדיספרסיה. בראש\תחתית פס, לדיספרסיה יש מינימום\מקסימום. לכן במקרים אלו המהירות **תתאפס**.