פיסיקה של מצב מוצק - תרגיל בית מס' 10 - פתרון

א. בשביל מחסום פוטנציאל מהצורה: $v(x) = Aa\delta(x)$ (A הוא קבוע בעל יחידות של אנרגיה. ל a יחידות של מרחק), מצאו את מקדם ההעברה $t = |t|e^{i\delta}$ (כלומר, רשמו את $|t|$ ואת δ כפונקציות של נתוני הבעיה ושל האנרגיה).

ב. לאלקטרונים בפוטנציאל מחזורי המורכב ממחסומים כנ"ל המרוחקים האחד מהשני מרחק a, רשמו נוסחה סגורה למספר הגל q כפונקציה של האנרגיה ε. השתמשו בנוסחה שהתקבלה בתרגיל כיתה 10:

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

כאשר $K = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}$.

ג. בעזרת מחשב (אפשר אפילו עם Excel), שרטטו את האנרגיה ε (שלושה פסים ראשונים) כפונקציה של מספר הגל q (בתחום $-\frac{\pi}{a} < q < \frac{\pi}{a}$), בשביל:

1) $A = 0.05 \cdot \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$ (הפוטנציאל חלש לעומת האנרגיה הקינטית ב q הכי גדול)

2) $A = 1 \cdot \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$ (הפוטנציאל מסדר גודל של האנרגיה הקינטית ב q הכי גדול)

3) $A = 20 \cdot \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$ (הפוטנציאל חזק לעומת האנרגיה הקינטית ב q הכי גדול)

מומלץ לשרטט את כל המקרים על גרף אחד.

ד. רשמו ביטויים אנליטיים (ופשוטים) ליחס הדיספרסיה בשביל פוטנציאל אפס, ובשביל פוטנציאל אין-סופי. הסבירו את תשובותיכם. הוסיפו את שני המקרים הללו לגרף מסעיף ג', וודאו שכל יחסי הדיספרסיה שחישבתם תחומים ביניהם (כך תוכלו לבדוק את חישוביכם).

פתרון:

א. ניקח גל המגיע למחסום משמאל, חלקו מוחזר וחלקו מועבר:

$$\psi_l(x) = \begin{cases} e^{iKx} + re^{-iKx} & : \; x < 0 \\ te^{iKx} & : \; x > 0 \end{cases}$$

נדרוש רציפות פונקצית הגל ב 0, ונקבל את המשוואה:

$$1 + r = t$$

נבצע לשני אגפי משוואת שרדינגר אינטגרציה על קטע קטן מסביב ל 0:

$$\lim_{\eta\to 0}\int_{-\eta}^{\eta}\left\{-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi_l}{dx^2}(x) + Aa\delta(x)\psi_l(x)\right\}dx = \lim_{\eta\to 0}\int_{-\eta}^{\eta}\varepsilon\psi_l(x)dx$$

$$\to -\frac{\hbar^2}{2m}\left\{\frac{d\psi_l}{dx}(0^+) - \frac{d\psi_l}{dx}(0^-)\right\} + Aa\psi_l(0) = 0$$

$$\to \frac{d\psi_l}{dx}(0^+) - \frac{d\psi_l}{dx}(0^-) = \frac{2mAa}{\hbar^2}\psi_l(0)$$

נציב את $\psi_l(x)$ ונקבל:

$$iKt - iK(1-r) = \frac{2mAa}{\hbar^2} t$$

$$\rightarrow 1 - r = t(1 + i\frac{2mAa}{\hbar^2 K})$$

נחבר משוואה זו עם המשוואה שהתקבלה מרציפות הפונקציה ב 0, ונקבל:

$$2 = t(2 + i\frac{2mAa}{\hbar^2 K}) \rightarrow t = \frac{1}{1 + i\frac{mAa}{\hbar^2 K}}$$

כלומר,

$$|t| = \frac{1}{\sqrt{1 + \left(\frac{mAa}{\hbar^2 K}\right)^2}}$$

$$\delta = -\arctan\left(\frac{mAa}{\hbar^2 K}\right)$$

נציב $K = \sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}$, ונקבל:

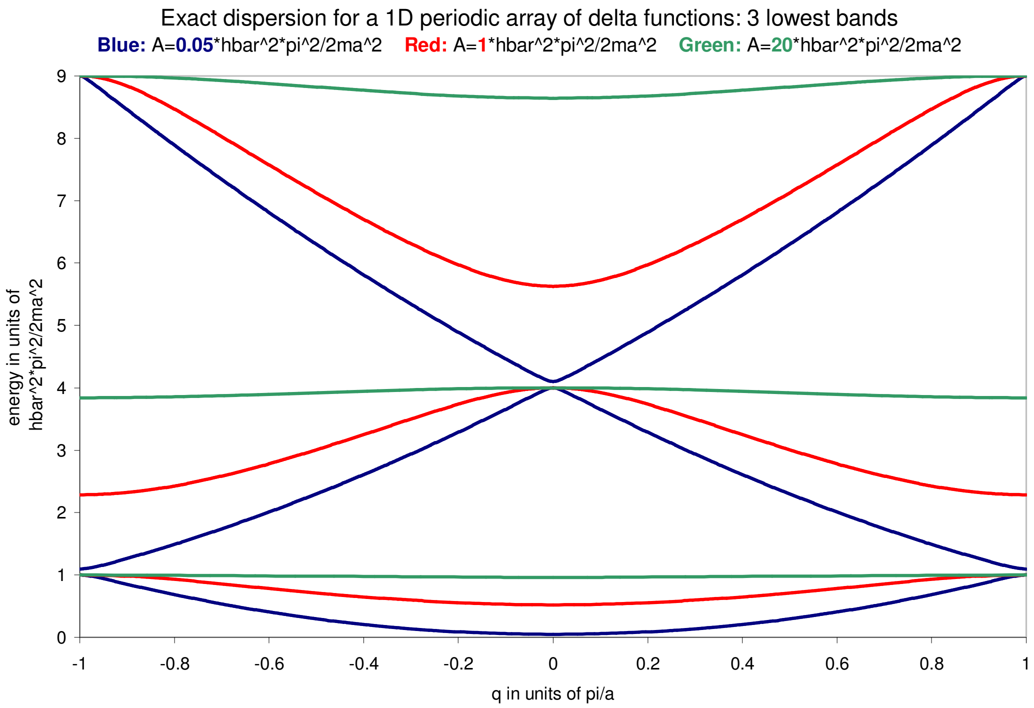
$$|t|(\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{mA^2a^2}{2\hbar^2\varepsilon}}}$$

$$\delta(\varepsilon) = -\arctan\left(\frac{Aa}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{2\varepsilon}}\right)$$

ב. נציב את $|t|$, את δ ואת K בנוסחה הנתונה, ניקח arccos של שני האגפים, נחלק ב a, ונקבל:

$$q(\varepsilon) = \frac{1}{a}\arccos\left(\sqrt{1 + \frac{mA^2a^2}{2\hbar^2\varepsilon}}\cos\left(a\sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}} - \arctan\left(\frac{Aa}{\hbar}\sqrt{\frac{m}{2\varepsilon}}\right)\right)\right)$$

ג. שרטוט שלושת פסי האנרגיה הראשונים כפונקציה של מספר הגל, בשביל שלושת המקרים הנתונים (נעשה בעזרת Excel):



ד. כאשר הפוטנציאל חזק מאד, אין קשר בין שני אתרים סמוכים, ומתקבלת מערכת של הרבה בורות קוונטיים אין-סופיים שלא משפיעים האחד על השני. לכן, רמות האנרגיה תהינה כמו של בור פוטנציאל אין סופי ברוחב a: $\varepsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{a}n\right)^2$. n הוא מספר שלם השונה מ 0. לא תהיה תלות ב q, וכל רמה תהיה מנוונת לפי מספר הבורות במערכת (שהוא מספר תאי היחידה בשרשרת).

כאשר הפוטנציאל שווה אפס, נקבל רמות אנרגיה של אלקטרון חופשי. נגדיר כי q נמצא רק באיזור ברילואין הראשון, וכדי לפצות על כך, נוסיף לו וקטורי סריג הופכי: $\varepsilon_{q,n} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(q + \frac{2\pi}{a}n\right)^2$.

כאן n הוא מספר שלם כלשהו (כולל 0).
(זה שקול ל"קיפול" של הפרבולה לתוך איזור ברילואין הראשון).

בגרף מהסעיף הקודם ניתן לראות כי לפוטנציאל חזק (מקרה 3), הדיספרסיה המחושבת אכן מאד שטוחה, ושואפת לרמות של בור פוטנציאל אין-סופי (1, 4, 9 ביחידות של הגרף), וכי לפוטנציאל חלש (מקרה 1) מקבלים משהו מאד דומה לפרבולה מקופלת.