נתון חומר חד מימדי הבנוי משלושה אטומים בכל תא יחידה פרימיטיבי. הפוטנציאל שמשרים האטומים על האלקטרונים נתון ע"י:

$$U(x)=U_0 a\sum_n\left[2\delta\left(x-na\right)-\delta\left(x-\left(n+\tfrac{1}{4}\right)a\right)-\delta\left(x-\left(n+\tfrac{3}{4}\right)a\right)\right]$$

כאשר $U_0 \ll \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$ ו m מסת אלקטרון חופשי.

א. מהו פער האנרגיה בקצה איזור ברילואין הראשון (בסביבת האנרגיה $\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$) **בקירוב הפוטנציאל החלש**?

מהי המסה האפקטיבית של האלקטרונים בתחתית הפס הנמצא מעט **מעל** לאנרגיה $\frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$?

ב. מהו פער האנרגיה במרכז איזור ברילואין הראשון (בסביבת האנרגיה $\frac{2\hbar^2\pi^2}{ma^2}$) **בקירוב הפוטנציאל החלש**?

__פתרון:__

א. נמצא את רכיבי פורייה של הפוטנציאל ב $G_\pm=\pm\frac{2\pi}{a}$.

$$U_{G_\pm}=\frac{1}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}U\left(x\right)e^{\pm i\frac{2\pi}{a}x}dx=U_0\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\left[2\delta\left(x\right)-\delta\left(x-\tfrac{1}{4}a\right)-\delta\left(x+\tfrac{1}{4}a\right)\right]e^{\pm i\frac{2\pi}{a}x}dx$$

$$=U_0\left(2-e^{\pm i\frac{\pi}{2}}-e^{\mp i\frac{\pi}{2}}\right)=2U_0$$

רכיבי פורייה המתאימים, הם $2U_0$, ולכן פער האנרגיה יהיה $4U_0$.

ב. הגישה הקצרה לפיתרון היא ע"י שימוש בתוצאה שהגענו אליה בתרגיל הכיתה:

$$\frac{m_\pm^*}{m}=\frac{1}{1\pm 2\lambda/U_G}\cong\pm\frac{U_G}{2\lambda}$$

$$\lambda=\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\left(\frac{\pi}{a}\right)^2$$

$$\frac{m_\pm^*}{m}=\frac{1}{1+\left(\frac{1}{2mU_0}\right)\left(\frac{\hbar\pi}{a}\right)^2}\cong\frac{2ma^2U_0}{\hbar^2\pi^2}$$

ג. נמצא את רכיבי פורייה של הפוטנציאל ב $G_\pm=\pm\frac{4\pi}{a}$.

$$U_{G_\pm}=\frac{1}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}U\left(x\right)e^{\pm i\frac{4\pi}{a}x}dx=U_0\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}}\left[2\delta\left(x\right)-\delta\left(x-\tfrac{1}{4}a\right)-\delta\left(x+\tfrac{1}{4}a\right)\right]e^{\pm i\frac{4\pi}{a}x}dx$$

$$=U_0\left(2-e^{\pm i\pi\pi}-e^{\mp i\pi}\right)=4U_0$$

במקרה זה הפיצול הוא $8U_0$.

שאלה 2

נתון סריג הקסגונלי דו-מימדי. אורך צלע משולש היא a. וקטורים פרימיטיביים:
$$\vec{a} = a\left(\frac{1}{2}\hat{x} - \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y}\right), \quad \vec{b} = a\left(\frac{1}{2}\hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2}\hat{y}\right).$$

א. ציירו במרחב ההופכי את נקודות הסריג ההופכי, את מישורי בראג, ואת שלושת אזורי ברילואין הראשונים.

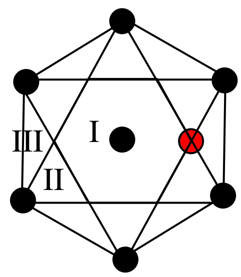
ב. ללא פוטנציאל, כמה מצבי אלקטרון מנוונים בנקודה $\vec{k}_A = \frac{4\pi}{3a}\hat{x}$, באנרגיה הנמוכה ביותר בה יש ניוון בנקודה זו? מהם המצבים המנוונים (רשמו לאיזה וקטור סריג הופכי שייך כ"א), ומהי האנרגיה בה הם מנוונים? מסת אלקטרון חופשי היא m.

ג. נתון שבסריג הנ"ל, הפוטנציאל הוא $U(\vec{r}) = -U_0 + \sum_{\vec{R}} U_0 \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 \delta(\vec{r} - \vec{R})$. כאשר $\vec{R}$ הוא וקטור סריג, ו $U_0 \ll \frac{\hbar^2\pi^2}{2ma^2}$. **בקירוב הפוטנציאל החלש**, מהו הפרש האנרגיה בין המצב הנמוך ביותר לבין המצב הגבוה ביותר מבין המצבים של סעיף ב', לאחר הסרת הניוון ע"י הפוטנציאל הנתון?

ד. **בקירוב הפוטנציאל החלש**, מהי פונקצית הגל של אלקטרון עם $k = \vec{k}_A$ הנמצא באנרגיה הגבוהה ביותר מבין האנרגיות של סעיף ג'?

פתרון:

א.



ב. יש שלושה וקטורים (בנקודה, המסומנת באדום בציור לעיל, נפגשים שני מישורי בראג), והם:

$$\vec{G}_1 = \vec{0}$$
$$\vec{G}_2 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{x} + \frac{1}{2}\hat{y}\right)$$
$$\vec{G}_3 = \frac{4\pi}{\sqrt{3}a}\left(\frac{\sqrt{3}}{2}\hat{x} - \frac{1}{2}\hat{y}\right)$$

האנרגיה:
$$\varepsilon_A = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{4\pi}{3a}\right)^2 = \frac{8\hbar^2\pi^2}{9ma^2}$$

ג. לפוטנציאל הנתון, כל רכיבי פורייה שווים U_0, פרט לרכיב של $\vec{G} = \vec{0}$, השווה ל 0. לכן נצטרך ללכסן את המטריצה 3x3 הבאה:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_A & U_0 & U_0 \\ U_0 & \varepsilon_A & U_0 \\ U_0 & U_0 & \varepsilon_A \end{pmatrix}$$

האנרגיות העצמיות הן $\varepsilon_A - U_0$ (מנוונת פעמיים), ו $\varepsilon_A + 2U_0$. ההפרש בין האנרגיות הוא $3U_0$.

ד. הוקטור העצמי לאנרגיה העצמית הגבוהה ביותר ($\varepsilon_A + 2U_0$) הוא $\frac{1}{\sqrt{3}}\begin{pmatrix}1\\1\\1\end{pmatrix}$.

לכן פונקצית הגל היא:

$$\psi_{\vec{k}_A}\left(\vec{r}\right) = \frac{1}{\sqrt{3}}\left(e^{i\left(\vec{k}_A-\vec{G}_1\right)\cdot\vec{r}} + e^{i\left(\vec{k}_A-\vec{G}_2\right)\cdot\vec{r}} + e^{i\left(\vec{k}_A-\vec{G}_3\right)\cdot\vec{r}}\right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{3}}\left(e^{i\frac{4\pi}{3a}x} + e^{i\left(-\frac{2\pi}{3a}x-\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}y\right)} + e^{i\left(-\frac{2\pi}{3a}x+\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}y\right)}\right) = e^{i\frac{4\pi}{3a}x}\frac{1}{\sqrt{3}}\left(1+2e^{-i\frac{2\pi}{a}x}\cos\left(\frac{2\pi}{\sqrt{3}a}y\right)\right)$$