סיכום ודף נוסחאות במבוא לפיזיקה של מצב מוצק – 044129

גדלים יסודיים ותאוריית PEdB (פלאנק– אינשטיין– דה-ברולי):

- משוואת הגלים ב- 3D : $f(x)=A\cos\left(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t\right)$

✓ ווקטור הגל המכוון בכיוון התקדמות הגל - $\vec{k}$, מיקום - $\vec{r}$

✓ משוואת גלים זו מתארת חלקיק הנע במהירות קבועה (תנע קבוע $\hbar\vec{k}$ ואנרגיה קבועה $\hbar\omega$).

- מספר הגל : $k=\left|\vec{k}\right|=\frac{2\pi}{\lambda}$
- תדירות זויתית : $\omega=2\pi\nu=2\pi f=2\pi\frac{c}{\lambda}=c\left|\vec{k}\right|$
- תנע עפ"י דה-ברולי:($k>0$ - נע ימינה) $\left|\vec{p}\right|=\hbar\left|\vec{k}\right|=\frac{\mathcal{E}}{c}=\frac{2\pi\hbar}{\lambda}$

✓ ל- $\left|\vec{p}\right|$ גם משמעות של לחץ הקרינה.

- אנרגיה עפ"י דה-ברולי : $\mathcal{E}=\hbar\omega$
- אנרגיה קינטית קלאסית (ניוטון): $\mathcal{E}=\frac{p^2}{2M}$
- אנרגיה יחסותית : $\left(\mathcal{E}+Mc^2\right)^2=(cp)^2+\left(Mc^2\right)^2$
- אנרגיה של פוטון $(m=0)$: c - מהירות האור: $\mathcal{E}=c\left|\vec{p}\right|$

❖ <u>חישוב אורך גל של פוטון:</u> $\lambda=\frac{2\pi\hbar c}{\mathcal{E}}=\frac{1.24\mu m}{\mathcal{E}[eV]}=\frac{12400\,\mathring{A}}{\mathcal{E}[eV]}$

❖ <u>חישוב אורך גל של אלק':</u>

$$\lambda=\sqrt{\frac{(2\pi\hbar)^2}{2m\mathcal{E}}}=\sqrt{\frac{2\pi^2(\hbar c)^2}{mc^2\mathcal{E}}}=\frac{12.262\,\mathring{A}}{\sqrt{\mathcal{E}[eV]}}=\sqrt{\frac{1.504\,eV}{\mathcal{E}}}\cdot 1_{nm}$$

<u>**משפט:**</u> אם הפוטנציאל $V(x)$ סופי, אזי $\Psi(x)$, $\Psi'(x)$ רציפות.

הוכחה: $\Psi''(x)=\frac{2m}{\hbar^2}\left[V(x)-\mathcal{E}\right]\Psi(x)$ נבצע אינטגרציה ונקבל:

$\Psi'(b)=\Psi'(a)+\frac{2m}{\hbar^2}\int_a^b\left(V(y)-\mathcal{E}\right)\Psi(y)dy$ ומאינטגרציה נוספת:

$$\Psi(b)=\Psi(a)+\Psi'(a)(b-a)+\frac{2m}{\hbar^2}\int_a^b dx\int_a^x\left(V(y)-\mathcal{E}\right)dy$$

✓ ואם משאיפים $a\to b$ מקבלים מהשאיפה לאפס של האינטגרל את הרציפות של $\Psi'(x)$ $\Leftarrow$ רציפות $\Psi(x)$. מש"ל.

<u>**מצבים קשורים**</u>: מצב קשור מתואר ע"י התנאי : $\lim_{r\to\infty}\Psi(r)=0$

✓ והדבר יכול להתקיים לערכים בדידים של האנרגיות $\mathcal{E}$ - אלו הם הע"ע של האנרגיה של פתרונות משוואת שרדינגר.

<u>**אורטוגונליות של פונק' גל עצמיות:**</u>

✓ עבור של שתי פונקציות גל השייכות לע"ע שונים של אנרגיות מתקיימת א"ג: $0=\left(\mathcal{E}_2-\mathcal{E}_1\right)\int\Psi_1^*\Psi_2d^3r$, $\mathcal{E}_2-\mathcal{E}_1\neq0$

<u>**זוגיות, אי-זוגיות וסימטריה:**</u>

- עבור פוטנציאל סימטרי/ אנטי-סימטרי גם פונקצית הגל תהיה בעלת התנהגות דומה: $V(-r)=\pm V(r)\Rightarrow\Psi(-r)=\pm\Psi(r)$

<u>**נרמול פונקצית הגל:**</u> (לנרמל ניתן רק במצבים קשורים)

1D: $\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\Psi dx=\int_{-\infty}^{\infty}|\Psi|^2dx=\int_{-\infty}^{\infty}\Phi^*\Phi dp=\int_{-\infty}^{\infty}|\Phi|^2dp=1$

3D: $\iiint\Psi^*\Psi d^3r=\iiint|\Psi|^2d^3r=\iiint\Phi^*\Phi d^3p=\iiint|\Phi|^2d^3p=1$

<u>**פונקציות גל, משוואות שרדינגר ויחסי דיספרסיה:**</u>

תחום ואילוצים	משוואת שרדינגר	פונקצית הגל	יחס דיספרסיה
מרחב חופשי ללא כוחות חיצוניים	1D : $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}$ 3D : $i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\Psi$	$\Psi(x,t)=A\cdot e^{i(kx-\omega t)}$ $\omega\Psi=i\frac{\partial\Psi}{\partial t}$, $k\Psi=-i\frac{\partial\Psi}{\partial x}$	$\omega=\frac{\hbar k^2}{2M}$ $k=\left(\frac{2M}{\hbar^2}\mathcal{E}\right)^{1/2}$
מרחב פוטנציאל המתאר כוח $V(r)=-F\lvert r\rvert$ או $F=-\nabla V(r)$	$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\Psi+V(r)\Psi$ $i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial t}=\frac{p^2}{2M}\Phi-i\hbar\cdot F\cdot\frac{\partial\Phi}{\partial p}$	<u>הערה:</u> עבור $V=a_nx^n$ ניתן להציב באיבר הימני את : $V\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial p}\right)\Phi$	$\mathcal{E}=\frac{p^2}{2M}+V(r)$ $\hbar\omega=\frac{\hbar^2k^2}{2M}+V(r)$
מצבים סטציונריים וסופרפוזיציה (שכבר לא סטציונרית!) כאשר $V=V(r)+V(t)$	$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\Psi+V(r)\Psi=\mathcal{E}\Psi$ $\hat{H}\Psi=\mathcal{E}\Psi$	$\Psi(r,t)=\psi(r)e^{-i\omega t}=\psi(r)\exp\left(-\frac{i\mathcal{E}t}{\hbar}\right)$ $\Psi(r,t)=\sum_n c_n\psi_n(r)\cdot\exp\left(-\frac{i\mathcal{E}_nt}{\hbar}\right)$	$\mathcal{E}$ קבוע ולא תלוי בזמן $\mathcal{E}=\frac{p^2}{2M}+V(r)$

✓ עבור <u>סופרפוזיציה של מצבים</u> סטציונריים מקבלים פונקצית גל אשר כבר <u>איננה סטציונרית</u> ו<u>ללא אנרגיה מוגדרת</u>.

$$\Psi(r,t)=\Psi_1(r,t)+\Psi_2(r,t)\Rightarrow\left|\Psi(r,t)\right|^2=\left|\Psi_1\right|^2+\left|\Psi_2\right|^2+\Psi_1\Psi_2e^{i(\omega_1-\omega_2)t}+\Psi_1^*\Psi_2e^{-i(\omega_1-\omega_2)t}$$

<u>זרם צפיפות ההסתברות:</u>

- קביעות בזמן של הנורמה של פונקצית הגל: $\frac{d}{dt}\int\limits_{all\ space}\left|\Psi\right|^2 d^3r=0$
- כל פתרון של משוואת שרדינגר מקיים:

$$\frac{d\left|\Psi\right|^2}{dt}=\frac{d\left(\Psi\Psi^*\right)}{dt}=\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t}+\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}$$

- ממשוואת שרדינגר: $$\frac{d\left|\Psi\right|^2}{dt}=\frac{i\hbar}{2M}\left(\underbrace{\Psi^*\nabla^2\Psi-\Psi\nabla^2\Psi^*}_{=\nabla\cdot\left(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*\right)}\right)$$

$$\boxed{\begin{aligned}j&\triangleq-\frac{i\hbar}{2M}\left(\Psi^*\nabla\Psi-\Psi\nabla\Psi^*\right)=\\&=\frac{\hbar}{M}\mathrm{Im}\left\{\Psi^*\nabla\Psi\right\}=-\frac{\hbar}{M}\mathrm{Re}\left\{i\Psi^*\nabla\Psi\right\}\end{aligned}}$$

- <u>משוואת זרם ההסתברות</u>: $\frac{\partial\rho}{\partial t}=-\nabla\cdot\vec{j}\ ,\ \rho\left(\vec{r},t\right)=\left|\Psi\left(\vec{r},t\right)\right|^2$

✓ $\frac{d}{dt}\int\rho d^3r=-\int\left(\nabla\cdot j\right)d^3r=-\oiint j\cdot dA\ \Rightarrow\ \lim\limits_{r\to\infty}j=0$

✓ $\frac{d}{dt}\iiint\limits_V\rho\left(\vec{r},t\right)dv=0$ - לא תלוי בזמן $\Leftarrow$ החלקיק לא נעלם.

- מצב סטציונרי מקיים: $\frac{\partial\rho}{\partial t}=-\nabla\cdot\vec{j}=0\ \not\Rightarrow\ \vec{j}=0$

❖ <u>דוגמה</u>: עבור גל מישורי: $\Psi\left(x,t\right)=Ae^{i\left(\frac{p}{\hbar}x-\omega t\right)}\ ,\ \nabla\Psi=\frac{\partial\Psi}{\partial x}$

$$\vec{j}=\frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}\left\{A^*e^{-i\left(\frac{p}{\hbar}x-\omega t\right)}\cdot i\frac{p}{\hbar}Ae^{i\left(\frac{p}{\hbar}x-\omega t\right)}\right\}=\frac{p}{m}\cdot AA^*=\frac{p}{m}\left|A\right|^2$$

✓ונשים לב כי ל- $AA^*=\left|A\right|^2$ יש יחידות של שטף. $\Rightarrow\left|\vec{j}\right|=v\left|A\right|^2$

<u>ניוון של פונקצית הגל:</u>

- <u>הגדרה</u>: ניוון זהו מספר הפונקציתו העצמיות עבור כל ע"ע.
- עבור 1D ניתן להוכיח כי אין ניוון, כלומר לכל ע"ע של אנרגיה יש פונקצית גל <u>ממוקמת</u> אחת בלבד.
- עבור חלקיקי חופשי (לא ממקודם בפוטנציאל $V=0$) הפתרון של משוואת שרדינגר הינו $Ae^{+ikx}+Be^{-ikx}$, כלומר 2 פ"ע כשלכל אחת מתאים הע"ע $\pm k$, לכן יש <u>ניוון מדרגה 2.</u>

<u>מעבר בין הצגות שונות של פונקצית הגל באמצעות התמרות פוריה:</u>

- הצגת מקום ב- 1D: $\Psi\left(x,t\right)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\Phi\left(p,t\right)\cdot e^{+ipx/\hbar}dp$
- הצגת תנע ב- 1D: $\Phi\left(p,t\right)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\Psi\left(x,t\right)\cdot e^{-ipx/\hbar}dx$
- הצגת מקום ב- 3D: $\Psi\left(r,t\right)=\frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^{3/2}}\int\Phi\left(p,t\right)\cdot e^{+ipr/\hbar}d^3p$
- הצגת תנע ב- 3D: $\Phi\left(p,t\right)=\frac{1}{\left(2\pi\hbar\right)^{3/2}}\int\Psi\left(r,t\right)\cdot e^{-ipr/\hbar}d^3r$
- המרות: $r\leftrightarrow p\ ,\ \Psi\left(r,t\right)\leftrightarrow\Phi\left(p,t\right)=\frac{A\left(k,t\right)}{\sqrt{\hbar}}\ ,\ i\leftrightarrow -i$

<u>המובן ההסתברותי של פונקצית הגל:</u>

- בהצגת המקום: $dP_r=\left|\Psi\left(r,t\right)\right|^2d^3r$
- בהצגת התנע: $dP_p=\left|\Phi\left(p,t\right)\right|^2d^3p$
- פוסטולט האינטרפרטציה הסטטיסטית של Born:

$P_V=\iiint\limits_V\left|\Psi\left(\vec{r},t\right)\right|^2d^3r$ - הסתברות לגילוי החלקיק בנפח V

- ההסתברות שחלקיק בעל אמפליטודה $A\left(k,t\right)$ יתגלה באינטרוול המומנטום $\left(\hbar k,\hbar k+\hbar dk\right)$: $\rho_k\left(k\right),\ \rho_p\left(p\right)$ - צפיפויות הסתברות

$$\rho_k\left(k\right)dk=\left|A\left(k,t\right)\right|^2dk=\left|\Phi\left(p,t\right)\right|^2dp=\rho_p\left(p\right)dp$$

- עבור 1D מתקיים הקשר: $\Phi\left(p,t\right)=\frac{1}{\sqrt{\hbar}}A\left(k,t\right)$
- עצם המדידה גורמת לשינוי (קריסה) של פונקצית הגל (כיוון שגילוי החלקיק משנה את הסתברות הימצאותו במקום המדידה)

<u>עקרון אי הוודאות:</u>

✓ <u>אינטואיציה</u>: התנע והמיקום לעולם לא יקבלו ערכי תצפית מדוייקים בו זמנית כיוון שהאופרטורים שלהם לא מתחלפים.

- עבור כל פונקצית גל מתקיים תמיד: $\boxed{\Delta p\Delta x\ge\hbar/2}$, $\boxed{\Delta\mathcal{E}\Delta t\ge\hbar/2}$

✓ עבור גאוסיאן מתקיים שיוויון – אי-וודאות מינימאלית.

- <u>השלמה הדדית</u>: בין כל שני אופרטורים <u>לא מתחלפים</u> תהיה מידה של אי-וודאות מסוימת, $\left[\hat{A},\hat{B}\right]$-<u>מדומה</u>: $\boxed{\left(\Delta A\right)\left(\Delta B\right)\ge\frac{1}{2}\left|\left\langle\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\rangle\right|}$

✓ הוכחה: נגדיר: $\hat{A}'=\hat{A}-\left\langle\hat{A}\right\rangle,\ \hat{B}'=\hat{B}-\left\langle\hat{B}\right\rangle\ ,\ \left\langle\hat{A}\right\rangle,\left\langle\hat{B}\right\rangle\in\mathbb{R}$

ולכן ע"י חישוב פשוט מקבלים כי $\left[\hat{A}',\hat{B}'\right]=\left[\hat{A},\hat{B}\right]$

נגדיר הרמיטיים צמודים: $\hat{a}=\lambda\hat{A}'+i\hat{B}/\lambda\ ,\ \hat{a}^\dagger=\lambda\hat{A}'-i\hat{B}/\lambda$

ערך התצפית: $0\le\left\langle\hat{a}^\dagger\hat{a}\right\rangle=\lambda^2\left\langle\hat{A}'^2\right\rangle+\left\langle\hat{B}'^2\right\rangle/\lambda^2+i\left\langle\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\rangle$

ו- $\left\langle\Psi\right|\hat{a}^\dagger\hat{a}\left|\Psi\right\rangle=0$ אם"ם: $\hat{a}\Psi=\left(\lambda\hat{A}'+i\hat{B}/\lambda\right)\Psi=0$

ללא הגבלת הכלליות נניח כי $\left[\hat{A},\hat{B}\right]<0$ (אחרת נחליף את $\hat{A},\ \hat{B}$)

נציב הכל ונקבל: $\lambda^2\left(\Delta A\right)^2+\left(\Delta B\right)^2/\lambda^2\ge\left|\left\langle\left[\hat{A},\hat{B}\right]\right\rangle\right|$

למשוואה (לפי λ) יש מינימום ב- $\lambda^2=\Delta B/\Delta A$, נציב ומש"ל.

- <u>הקשר בין השתנות בזמן לאי-וודאות</u>:

$$\left|\frac{d\left\langle A\right\rangle}{dt}\right|=\frac{1}{\hbar}\left|\left\langle\hat{H},\hat{A}\right\rangle\right|\ \underset{\hat{B}\to\hat{H}}{\Rightarrow}\ \left|\frac{d\left\langle A\right\rangle}{dt}\right|\le\frac{2}{\hbar}\left(\Delta A\right)\underbrace{\left(\Delta\varepsilon\right)}_{\varepsilon=\left\langle H\right\rangle}$$

חבילות גלים כלליות:

- עיקרון הסופרפוזיציה הלינארית : אם $\Psi_1(\vec{r},t)$ וגם $\Psi_2(\vec{r},t)$ הם ייצוגים אפשריים, אזי גם $\Psi(\vec{r},t)=\Psi_1(\vec{r},t)+\Psi_2(\vec{r},t)$ הוא ייצוג אפשרי, ולכן גם הסכום האינסופי הוא ייצוג אפשרי :
$\Psi(\vec{r},t)=\int_{k_x}\int_{k_y}\int_{k_z}A(k)\cdot e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}d^3k$, $A(k)$ - קובע האם ממוקמת.
- חבילת גלים בהצגת מקום : $\Psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}a(k)\cdot e^{i(kx-\omega t)}dk$

✓ זהו סכום אינסופי של גלי ע"מ לקבל חלקיק ממוקם במרחב.

$$\Psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}A(k,t)\cdot e^{ikx}dk \Leftarrow A(k,t)=a(k)e^{-i\omega t}$$

✓ וזוהי התמרת פורייה, עבור הזוג : $A(k,t)\xrightarrow{F}\Psi(x,t)$

✓ Δk לא תלוי בזמן כי : $|A(k,t)|=|a(k)|\cdot|e^{-i\omega t}|=|a(k)|$

- התמרת פוריה הפוכה נותנת: $A(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi(k,t)\cdot e^{-ikx}dx$
- מהגדרת התמרת פורייה נובע הנירמול:
$\int_{-\infty}^{+\infty}|\Psi(x,t)|^2dx=\int_{-\infty}^{+\infty}|A(k,t)|^2dk=\int_{-\infty}^{+\infty}|a(k)|^2dk=1$

תווך/גל דיספרסיבי

- נתון $\omega(k)$ כלשהו לא לינארי, נבחר חבילת גלים ממורכזת סביב k_0 בעלת רוחב Δk קטן מספיק כך שניתן לקרב:
$$\omega(k)=\omega(k_0)+\left.\frac{d\omega}{dk}\right|_{k_0}(k-k_0)$$
- מהירות חבורה: $v_g=\frac{d\omega}{dk}$ ולכן $\omega(k)=\omega(k_0)+v_g(k-k_0)$
- פולס שמתקדם במהירות v_g : נסמן: $\Psi(x,0)\triangleq\Psi_0(x)$

ואז: $\Psi(x,t)\cong e^{-i(\omega_0 t+v_g k_0)}\Psi_0(x-v_g t)$, $|\Psi(x,t)|\cong|\Psi_0(x-v_g t)|$

✓ פיתוח טיילור של $\omega(k)$ עד סדר ראשון בלבד גורם לגל לנוע ללא עיוות, כלומר ללא התרחבות Δx .

חבילת גלים גאוסית:

- עבור חבילת גלים גאוסית מתקיים הקשר:
$a(k)=a_0\exp\left[-\left(\frac{k-k_0}{2\Delta k}\right)^2\right]$, מנירמול: $a_0=\left[2\pi(\Delta k)^2\right]^{-1/4}$

✓ התפלגות זו סימטרית סביב k_0, לכן מתקיים $p_0=\hbar k_0=\hbar\langle k\rangle$

- העקרון אי הוודאות לחבילת גלים גאוסית הינו מינימלי :
$\Delta x=1/(2\Delta k)\Leftrightarrow\Delta x\Delta k=1/2$, $\Delta x\Delta p=\hbar/2$

פיתוח חבילת הגלים בזמן ומרחב:

<table>
<tr><th>המקרה</th><th>חבילת הגלים</th><th>פונקצית הגל המתקבלת מחישוב האינטגרל</th></tr>
<tr><td>$k_0=0$
$t=0$</td><td>$\Psi(x,0)=\frac{a_0}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[-\left(\frac{k}{2\Delta k}\right)^2+ikx\right]dk$</td><td>$\Psi(x,0)=\sqrt{2}a_0\Delta k\exp\left[-(\Delta k)^2x^2\right]$, $a_0=c_0/\sqrt{2}\Delta k$
$\Psi(x,0)=c_0\exp\left[-\left(\frac{x}{2\Delta x}\right)^2\right]$, $c_0=\left[2\pi(\Delta x)^2\right]^{-1/4}$</td></tr>
<tr><td>$k_0\neq0$
$t=0$</td><td>$\Psi(x,0)=\frac{a_0e^{ik_0x}}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[-\left(\frac{k-k_0}{2\Delta k}\right)^2+i(k-k_0)x\right]dk$</td><td>$\Psi(x,0)=c_0\exp\left[-\left(\frac{x}{2\Delta x}\right)^2+ik_0x\right]$</td></tr>
<tr><td>$k_0\neq0$
$t\neq0$
הכללי ביותר</td><td colspan="2">$\Psi(x,t)=\frac{a_0}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp\left[-\left(\frac{k-k_0}{2\Delta k}\right)^2+i(k-k_0)x-i\omega(k)t\right]dk\Rightarrow\left[2\Delta x(t)\right]^2=\left[2\Delta x(0)\right]^2\left[1+\left(\frac{t}{t_0}\right)^2\right]$ רוחב חב' הגלים
$\Psi(x,t)=\frac{c_0}{\sqrt{1+(t/t_0)i}}\exp\left[-\left(x-\frac{i2k_0}{(2\Delta k)^2}\right)^2\left(\frac{1}{2\Delta x}\right)^2\frac{1-(t/t_0)i}{1+(t/t_0)^2}\right]$, $t_0=\frac{2M}{\hbar}\frac{1}{(2\Delta k)^2}=\frac{2M(\Delta x)^2}{\hbar}$
$|\Psi(x,t)|^2=\frac{c_0^2e^{-\frac{k_0^2}{(2\Delta k)^2}}}{\sqrt{1+(t/t_0)^2}}\exp\left[-\left(x-\frac{2k_0t/t_0}{(2\Delta k)^2}\right)^2\left(\frac{1}{2\Delta x\left(1+(t/t_0)^2\right)}\right)^2\right]\Rightarrow v_g=\frac{\hbar k}{M}=\frac{d\omega}{dk}$
✓ Δk הינו קבוע בזמן ועבור $t\gg t_0$: $\Delta x(t)\cong\Delta x(0)\frac{t}{t_0}=\Delta x(0)\cdot t\cdot\frac{\hbar}{2M(\Delta x(0))^2}=...=\frac{\hbar}{M}t\Delta k=\frac{\Delta p}{M}t=\Delta v\cdot t$</td></tr>
</table>

<u>פונקצית צפיפות מצבים</u>:

- מטרתנו לספור את הפונק' העצמיות בעלות אנרגיה קטנה מ- $\mathcal{E}$ נתונה, כאשר $\mathcal{E} \gg \mathcal{E}_1$: ב- 3D מספור את הנקודות של $\frac{1}{8}$ כדור, שם $x, y, z > 0$ ונקבל:

$$N = \frac{1}{8} \cdot \frac{4}{3} \pi n^3 = \frac{\pi}{6} \left(\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{E}_1} \right)^{3/2}$$

מספר המצבים שנוספו עבור $\mathcal{E} \to \mathcal{E} + \mathcal{E}_1$: $\Delta N \cong \frac{dN}{d\mathcal{E}} \cdot \mathcal{E}_1 \underset{3D}{=} \frac{\pi}{4} n$

✓ מהיותם של האלק' פרמיונים (spin up/down) עבור כל צירוף n-ים שנבחר יכולים להיות שם 2 אלקטרונים.

- <u>הגדרה</u>: <u>אנרגית פרמי</u> היא האנרגיה המאוכלסת הגבוהה ביותר - E_F
- חישוב E_F עבור אלק' בצפיפות $n = N / L^3$:

$$E_F = \left(\frac{6nL^3\mathcal{E}_1}{\pi} \right)^{2/3}$$

✓ ניתן גם למצוא את מהירות האלק' בבור ע"י $E_k = \frac{1}{2} m v^2$

- <u>הגדרת פונקצית צפיפות מצבי אנרגיה</u>:

$$D(\mathcal{E}) \triangleq \frac{1}{L^3} \frac{dN}{d\mathcal{E}}$$

- ריכוז מצבים מותרים ליח' אנרגיה :

$$D_{3D}(\mathcal{E}) = \frac{\pi}{4L^3} \sqrt{\mathcal{E}} / \mathcal{E}_1^{3/2}$$

ואם נציב $\mathcal{E}_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ML^2}$ נקבל :

$$D_{3D}(\mathcal{E}) = \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{\mathcal{E}}$$

- עבור מימדים נוספים:

$$D_{2D}(\mathcal{E}) = \frac{m}{2\pi\hbar^2}$$

$$D_{1D}(\mathcal{E}) = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} (\mathcal{E})^{-1/2}$$

✓ בגלל הספין של האלקטרונים: $\boxed{g_e(\mathcal{E}) = 2D(\mathcal{E})}$

<u>קבלת החוק השני של ניוטון ממשוואת שרדינגר</u>:

- $i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \frac{p^2}{2m} \Phi - i\hbar F \frac{\partial \Phi}{\partial p} \Rightarrow i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} + F \frac{\partial}{\partial p} \right) \Phi = \frac{p^2}{2m} \Phi$
- ונשים לב כי הפעלת האופרטור שבאגף שמאל על : $p' = p - Ft$ נותנת אפס ולכן ניתן לפתור ע"י הפרדת משתנים:

$$\Phi(p,t) = f(p)\Theta(p') = f(p)\Theta(p - Ft)$$

- בצבת $\Phi(p,t)$ הנ"ל נקבל: $i\hbar F \frac{\partial f}{\partial p} = \frac{p^2}{2m} f$
- פתרון המשוואה נותן: $f(p) = \exp\left(-\frac{ip^3}{6\hbar MF} \right)$
- ולכן $\Rightarrow \Phi(p,t) = \exp\left(-\frac{ip^3}{6\hbar MF} \right) \Theta(p - Ft)$
- $\Rightarrow \left| \Phi(p,t) \right| = \left| \Theta(p - Ft) \right|$
- והדבר מתאר את שינוי בתנע הקוונטי עבור מקרה הכוח האחיד עפ"י הקשר הידוע מהחוק השני של ניוטון: $p \propto Ft$

אופרטורים (Operators) וערכי תצפית (Expectation Values):

מוטיבציה: ע"י הפעלת אופרטור על פונקצית הגל ניתן לקבל את כל התכונות הפיסיקליות של החלקיק.

הגודל הפיזיקלי	האופרטור - $\hat{\Theta}$	ערך התצפית - $\langle\Theta\rangle$
תדירות ואנרגיה	$\hat{\omega}\equiv +i\frac{\partial}{\partial t} \Rightarrow \hat{\mathcal{E}}\equiv +i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$	$\langle\omega\rangle \quad , \quad \langle\varepsilon\rangle$
וקטור הגל ותנע	$\hat{k}\equiv -i\frac{\partial}{\partial x} \Rightarrow \hat{p}\equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$	$\langle k\rangle \;,\; \langle p\rangle = M\langle v\rangle$
המילטוניאן Hemiltonian	$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2+V(r)$	$\mathcal{E}$
$A(r)$ פונקציה כללית בהצגת מקום $\hat{A}$ - אופרטור בהצגת **התנע**		$\langle A\rangle=\int\Psi^* A(r)\Psi\cdot d^3r=\int\lvert\Psi\rvert^2 A(r)\cdot d^3r$ $\langle A\rangle=\int\Phi^*\hat{A}\Phi\cdot d^3p$
$B(p)$ פונקציה כללית בהצגת תנע $\hat{B}$ - אופרטור בהצגת **המקום**		$\langle B\rangle=\int\Phi^* B(p)\Phi\cdot d^3p=\int\lvert\Phi\rvert^2 B(p)\cdot d^3p$ $\langle B\rangle=\int\Psi^*\hat{B}\Psi\cdot d^3r$
תנע (בהצגת מקום)	$\hat{p}=\hbar\hat{k}=-i\hbar\nabla_r\xrightarrow{1D}-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ $\nabla_r\equiv\left(\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial}{\partial y},\frac{\partial}{\partial z}\right)$	$\langle p\rangle=\int\Psi^*\hat{p}\Psi\cdot d^3r=\int\Phi^* p\Phi\cdot d^3p$
מקום (בהצגת תנע)	$\hat{r}=+i\hbar\nabla_p\xrightarrow{1D}+i\hbar\frac{\partial}{\partial p_x}$ $\nabla_p\equiv\left(\frac{\partial}{\partial p_x},\frac{\partial}{\partial p_y},\frac{\partial}{\partial p_z}\right)$	$\langle r\rangle=\int\Psi^* r\Psi\cdot d^3r=\int\Phi^*\hat{r}\Phi\cdot d^3p$
אנרגיה פוטנציאלית		$\langle\mathcal{E}_{pot}\rangle=\langle V\rangle=\int\Psi^* V(r)\Psi\cdot d^3r$
אנרגיה קינטית	$\hat{\mathcal{E}}_{kin}=-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2M}=\frac{\hat{p}^2}{2M}$	$\langle\mathcal{E}_{kin}\rangle=\left\langle-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\right\rangle=-\frac{\hbar^2}{2M}\int\Psi^*\nabla^2\Psi\cdot d^3r=\int\Phi^*\frac{p^2}{2M}\Phi\cdot d^3p$

- <u>קשר בין אופרטורים לגדל פיזיקלי:</u> $\Theta=f(\Omega)\Rightarrow\hat{\Theta}=f(\hat{\Omega})$
- <u>דואליות בין הצגת התנע והמקום:</u>
  $\hat{A}$ בהצגת התנע $\Leftrightarrow$ $A(r)$ בהצגת המקום.
  $B(p)$ בהצגת התנע $\Leftrightarrow$ $\hat{B}$ בהצגת המקום.
- ❖ התנע הוא $\hat{p}=p$ בהצגת התנע ו- $\hat{p}=-i\hbar\nabla$ בהצגת המקום.
-

❖ חישוב ערך תצפית של $\Psi(r)=\sum_i c_i\phi_i(r)$, כאשר ϕ_i - פ"ע של אופרטור הרמיטי כלשהו:

$$\langle A\rangle=\int\sum_i c_i^*\phi_i^*\cdot\hat{A}\cdot\sum_i c_i\phi_i\cdot d^3r=$$

$$=\int\sum_i c_i^*\phi_i^*\cdot\sum_i\alpha_i c_i\phi_i\cdot d^3r=\sum_i\alpha_i\lvert c_i\rvert^2=\sum_i\alpha_i P(A=\alpha_i)$$

✓ ערך תצפית של אופרטור הרמיטי $\hat{A}$ הינו "חד" ($\Delta A=0$) אם"ם הוא ע"ע של פונקצית המצב, כלומר $\hat{A}\Psi=A\Psi$.

✓ ע"ע של אופרטור כלשהו הינו גם ערך התצפית של הפונקציה המנורמלת עליה הוא פועל:

$$\langle\hat{A}\rangle=\int\Psi^*\hat{A}\Psi dx=\int\Psi^* a\Psi dx=a\int\Psi^*\Psi dx=a\lVert\Psi\rVert^2=a$$

ייצוג דירק (Dirac Notation):

- הגדרות: $bra-\langle f| = (f_1^*, f_2^*, f_3^*)$; $ket-|g\rangle = (g_1, g_2, g_3)^T$
- סימון המכפלה הפנימית: $\langle f|g\rangle \equiv \begin{cases} \int f^*(s)g(s)d^3s \\ \sum_{i=1}^{n} f_i^* g_i \end{cases}$
- תכונות המכפלה הפנימית:
  - היפוך: $\langle g|f\rangle = (\langle f|g\rangle)^*$
  - לינאריות: $\langle (f_1+f_2)|g\rangle = \langle f_1|g\rangle + \langle f_2|g\rangle$
  - מכפלה בקבוע: $\langle f|cg\rangle = \langle c^* f|g\rangle = c\langle f|g\rangle$
  - דואליות: $(\langle f|) = (f\rangle)^{T*}$
- נרמול פונקצית הגל: $\langle\Psi|\Psi\rangle = \langle\Phi|\Phi\rangle = 1 = \|\Phi\| = \|\Psi\|$
- ייצוג אופרטורים: $\hat{A}|\Psi\rangle \equiv |\hat{A}\Psi\rangle$; $\langle\Phi|\hat{A}|\Psi\rangle \equiv \langle\Phi|\hat{A}\Psi\rangle$

✓ הפעלת אופרטור + היפוך : $\langle\hat{A}\Psi|\Phi\rangle = (\langle\Phi|\hat{A}\Psi\rangle)^*$

- אופרטור האנרגיה: $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi\rangle \equiv \hat{H}|\Psi\rangle$ או $\hat{H}|\Psi\rangle \equiv \mathcal{E}|\Psi\rangle$
- ערך התצפית בכתיב אופרטורי: $\langle\hat{A}\rangle \triangleq \langle\Psi|\hat{A}|\Psi\rangle = \langle A\rangle$
- השונות בכתיב אופרטורי: $(\Delta A)^2 = \langle\Psi|(\hat{A}-\langle A\rangle)^2\Psi\rangle \geq 0$

✓ השונות מתאפסת ממש אם"ם :

$$(\Delta A)^2 = 0 \Leftrightarrow \langle(\hat{A}-\langle A\rangle)\Psi|(\hat{A}-\langle A\rangle)\Psi\rangle = 0 \Leftrightarrow \hat{A}\Psi = A\Psi$$

✓ משמעות הדבר כי Ψ היא פ"ע של $\hat{A}$ עם ע"ע $A = \langle A\rangle$.

יחסי החילוף בין אופרטורים:

- סדר ההפעלה חשוב: $\hat{B}\hat{A}\Psi \equiv \hat{B}(\hat{A}\Psi) \neq \hat{A}(\hat{B}\Psi) \equiv \hat{A}\hat{B}\Psi$
- הגדרת יחס החילוף: $[\hat{A},\hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} = -[\hat{B},\hat{A}]$
- תכונות של יחס חילוף:
  - $[\hat{A}\hat{B},\hat{C}] = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B}$ or $[\hat{A},\hat{B}\hat{C}] = \hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A}$
  - $[\hat{A}\hat{B},\hat{C}] = \hat{A}[\hat{B},\hat{C}] + [\hat{A},\hat{C}]\hat{B}$
  - $[\hat{A},\hat{B}\hat{C}] = [\hat{A},\hat{B}]\hat{C} + \hat{B}[\hat{A},\hat{C}]$
  - $[\hat{A}^2,\hat{B}] = \hat{A}[\hat{A},\hat{B}] + [\hat{A},\hat{B}]\hat{A}$
  - $[\hat{A},\hat{B}^2] = [\hat{A},\hat{B}]\hat{B} + \hat{B}[\hat{A},\hat{B}]$

❖ $[\hat{x}^2,\hat{p}_x] = 2i\hbar\hat{x}$; $[\hat{x},\hat{p}_x^2] = 2i\hbar\hat{p}_x$; $[\hat{x}^2,\hat{p}^2] = 2i\hbar(\hat{x}\hat{p}+\hat{p}\hat{x})$

❖ $[\hat{x},\hat{p}^n] = i\hbar n\hat{p}^{n-1} = i\hbar\frac{d}{d\hat{p}}\hat{p}^n$, $[\hat{x}^n,\hat{p}] = i\hbar n\hat{x}^{n-1} = i\hbar\frac{d}{d\hat{x}}\hat{x}^n$

אופרטורים הרמיטיים: (מופעל רק על פונקציות ניתנות לנירמול)

✓ <u>אופרטור הרמיטי מציין מדידה של גודל פיזיקאלי, לכן ע"ע שלו לעולם יהיה ממשי</u>, לכן אם $\hat{A}$ הרמיטי, אז $(\langle A\rangle)^* = \langle A\rangle$

- <u>הגדרה</u> : כל אופרטור אשר מקיים : $\langle\Psi|\hat{A}\Psi\rangle = \langle\hat{A}\Psi|\Psi\rangle$

✓ בפרט הוא חייב לקיים את השוויון הבא: $\langle\Phi|\hat{A}\Psi\rangle = \langle\hat{A}\Phi|\Psi\rangle$

✓ הוכחה ע"י $\Psi' = \Psi + \lambda\Phi$ וחישוב $\langle\Psi'|\hat{A}\Psi'\rangle$ ל- $\lambda = 1, i$

- <u>משפט הא"ג של פ"ע של פונצית הגל</u>:

פונקציות גל (שהן פ"ע של אופ' הרמיטי)בעלות ע"ע שונים הינן א"ג.

הוכחה: נתון $\hat{A}$ - אופרטור הרמיטי, המוציא 2 ע"ע שונים מ-2 פונקציות גל שונות, כלומר $\hat{A}\Psi_1 = A_1\Psi_1$, $\hat{A}\Psi_2 = A_2\Psi_2$

$\langle\hat{A}\Psi_1|\Psi_2\rangle = A_1\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle$, $\langle\Psi_1|\hat{A}\Psi_2\rangle = A_2\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle$

בגלל ש- $\hat{A}$ הרמיטי, נובע השיוון $\langle\hat{A}\Psi_1|\Psi_2\rangle = \langle\Psi_1|\hat{A}\Psi_2\rangle$

ולכן $A_1\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle = A_2\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle \Rightarrow (A_1-A_2)\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle = 0$

בגלל ש- $A_2 \neq A_2$ מתקבלת הא"ג הדרושה, כלומר $\langle\Psi_1|\Psi_2\rangle = 0$

- עבור $\hat{A},\hat{B}$ הרמיטיים, האופרטור $\hat{A}\hat{B}$ הרמיטי בעצמו <u>אם"ם</u>: $\hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B} \Leftrightarrow [\hat{A},\hat{B}] = 0$, והדבר אינו תמיד כך.
- עבור אופרטורים $\hat{A},\hat{B}$ הרמיטיים, אך לא מחלפים מתקיימת תכונת <u>אופרטור אנטי-הרמיטי</u>:

$$\langle\Phi|[\hat{A},\hat{B}]\Psi\rangle = -\langle[\hat{A},\hat{B}]\Phi|\Psi\rangle = -(\langle\Psi|[\hat{A},\hat{B}]\Phi\rangle)^*$$

❖ דוגמאות:

❖ ההמילטוניאן הינו אופרטור הרממטי.

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2M} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V(r) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$$

❖ אופרטור התנע $\hat{p}_r = -i\hbar\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r$ (בכדוריות) , הינו הרמיטי.

❖ אופרטור המיקום $\hat{r}$ איננו הרמיטי כיוון ש- $\langle v\rangle = \frac{d}{dt}\langle r\rangle = \frac{i}{\hbar}\langle[\hat{H},\hat{r}]\rangle$ ואם נתבונן במימד אחד :

$[\hat{H},\hat{x}] = \frac{1}{2M}[\hat{p}_x^2,\hat{x}] = -\frac{i\hbar}{M}\hat{p}_x$ ולכן: $\langle v\rangle = \frac{1}{M}\langle p\rangle \neq 0$

- <u>קשר בין אופרטורים הרמיטיים לעקרון אי הוודאות ויחסי החילוף:</u>

אם עבור שני אופרטורים הרמיטיים $\hat{A},\hat{B}$ עבור וקטור $|\Psi\rangle$ נתון מתקיים כי $(\Delta A)^2 = (\Delta B)^2 = 0$ אזי $[\hat{A},\hat{B}] = 0$, כלומר שני האופרטורים מתחלפים ולא קיים לגביהם עקרון אי הוודאות.

הוכחה: נסמן $\langle A\rangle = A$, $\langle B\rangle = B$ אזי מהנתון נובע כי $\hat{A}|\Psi\rangle = A|\Psi\rangle$, $\hat{B}|\Psi\rangle = B|\Psi\rangle$

$$\hat{B}|\hat{A}\Psi\rangle = A|\hat{B}\Psi\rangle = AB\Psi \equiv BA\Psi = B|\hat{A}\Psi\rangle = \hat{A}|\hat{B}\Psi\rangle$$

$$\Rightarrow \hat{B}\hat{A} = \hat{A}\hat{B} \Rightarrow [\hat{A},\hat{B}] = 0$$

- <u>עקרון אי הוודאות</u>: עבור שני אופרטורים הרמיטיים <u>מינימאלי</u>

התלות הזמנית של ערך התצפית:

- נגזרת של ערך תצפית : $\frac{d}{dt}\langle A\rangle=\left\langle\frac{\partial\Psi}{\partial t}\middle|\hat{A}\middle|\Psi\right\rangle+\left\langle\Psi\middle|\hat{A}\middle|\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right\rangle$
- נציב $\hat{H}=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$:

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt}=\frac{i}{\hbar}\left[\left\langle\Psi\middle|\hat{H}\hat{A}\middle|\Psi\right\rangle-\left\langle\Psi\middle|\hat{A}\hat{H}\middle|\Psi\right\rangle\right]=\frac{i}{\hbar}\left[\left\langle\Psi\middle|\left[\hat{H},\hat{A}\right]\middle|\Psi\right\rangle\right]$$

- בכתיב ערכי התצפית לכל אופרטור $\hat{A}$: $\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle=\frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\hat{H},\hat{A}\right]\right\rangle$

❖ לאופרטור (המיקום) תלוי בזמן : $\langle v\rangle=\frac{d}{dt}\langle\hat{r}\rangle=\frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\hat{H},\hat{r}\right]\right\rangle$

✓ מסקנות :

✓ כל אופרטור שמתחלף עם ההמילטוניאן - $\hat{H}$ הינו קבוע בזמן.

✓ הדבר תקף לכל הצגה של $\hat{H}$ (גם למשל עבור בעיה עם כוח שלא ניתן לתאור ע"י פוטנציאל).

✓ אופרטור המיקום $\hat{r}$ אינו מתחלף עם $\hat{H}$ ולכן כמובן גם איננו בעל ערך תצפית קבוע בזמן.

- חוקי השימור :

א. חוק שימור ההסתברות (מסה) – $\int_{-\infty}^{\infty}\Psi^*\Psi\cdot d^3r=1$ ללא תלות בזמן.

הדבר נובע מכך שאופרטור היחידה מתחלף עם ההמילטוניאן.

ב. חוק שימור האנרגיה – האנרגיה המבוטאת באמצעות ההמילטוניאן $\hat{H}$ הינה קבועה בזמן מכיוון שהוא תמיד מתחלף עם עצמו.

ג. חוק שימור התנע הזויתי – עבור פוטנציאל מרכזי (סימטרי כדורי) אופרטור התנע הזוויתי $\hat{L}$ מתחלף עם $\hat{H}$, כלומר: $\left[\hat{H},\hat{L}_u\right]=0\,,\forall u\in\{x,y,z\}$ לכן התנע נשמר ולא תלוי בזמן.

אופרטורים צמודים הרמיטית (Hermitian Conjugate):

- הגדרה: אופרטור בעל ערך תצפית מרוכב והמקיים :

$$\langle\Psi|\hat{a}^\dagger|\Psi\rangle=\left(\langle\Psi|\hat{a}|\Psi\rangle\right)^*$$

- תכונות של אופרטורים צמודים הרמיטית:

א) $\langle\Phi|\hat{a}^\dagger\Psi\rangle=\left(\langle\hat{a}\Phi|\Psi\rangle\right)\quad or\quad\langle\Phi|\hat{a}\Psi\rangle=\left(\langle\hat{a}^\dagger\Phi|\Psi\rangle\right)$

ב) לכל אופרטור $\hat{a}$: $\left(\hat{a}^\dagger\right)^\dagger=\hat{a}$ ולאופרטור הרמיטי $\hat{A}$: $\hat{A}^\dagger=\hat{A}$

ג) עבור שני אופרטורים $\hat{A},\hat{B}$ לא מתחלפים : $\hat{a}=\hat{A}\hat{B}\quad;\quad\hat{a}^\dagger=\hat{B}\hat{A}$

ד) הוכח בתרגיל בית 5 כי: $\left(\hat{a}\hat{b}\right)^\dagger=\hat{b}^\dagger\hat{a}^\dagger$

ה) לשני אופרטורים הרמיטיים $\hat{A},\hat{B}$: $\hat{a}=\hat{A}+i\hat{B}\quad;\quad\hat{a}^\dagger=\hat{A}-i\hat{B}$

- הגדרה: אופרטור ריבוע הרמיטי : $\hat{N}=\hat{a}^\dagger\hat{a}$
- תכונות של אופרטור ריבוע הרמיטי:

א) האופרטור הינו הרמיטי בעצמו : $\langle\Phi|\hat{N}\Psi\rangle=\langle\Phi|\hat{a}^\dagger\hat{a}\Psi\rangle=$

$$=\langle\hat{a}\Phi|\hat{a}\Psi\rangle=\langle\hat{a}^\dagger\hat{a}\Phi|\Psi\rangle=\langle\hat{N}\Phi|\Psi\rangle$$

ב) חיובי תמיד : $\langle N\rangle=\langle\Psi|\hat{a}^\dagger\hat{a}\Psi\rangle=\langle\hat{a}\Psi|\hat{a}\Psi\rangle\geq 0$

פריסת פונקצית הגל במישור פוריה:

- $|\Psi\rangle=\sum_{n=1}^{N}a_n|n\rangle+|R_N\rangle\ ,\ a_n=\langle n|\Psi\rangle\ ,\ \lim_{N\to\infty}|R_N\rangle=0$
- ערך תצפית של האנרגיה (או כל תוצר אחר של אופרטור) :

$$\langle\mathcal{E}\rangle=\sum_{n=1}^{N}|a_n|^2\mathcal{E}_n+\langle R_N|R_N\rangle\langle\mathcal{E}_R\rangle$$

- התכנסות נקודתית :

$$0\leq\langle R_N|R_N\rangle\leq\frac{1}{\mathcal{E}_N}\left(\langle\mathcal{E}\rangle-\sum_{n=1}^{N}|a_n|^2\mathcal{E}_n\right)\xrightarrow[\mathcal{E}_n\to\infty]{}0$$

- מכפלה פנימית : נתון: $|\Psi\rangle=\sum_{n=1}^{\infty}a_n|n\rangle\ ;\ |\Phi\rangle=\sum_{n=1}^{\infty}b_n|n\rangle$ אזי $\langle\Psi|\Phi\rangle=\sum_{n=1}^{\infty}a_n^*b_n$ עבור $|\Psi\rangle$ ו- $|\Phi\rangle$ א"ג, המ"פ תתאפס, אחרת
- משפט פרסבל :

$$\langle\Psi|\Psi\rangle=\sum_{n=1}^{N}|a_n|^2+\langle R_N|R_N\rangle\xrightarrow[N\to\infty]{}\sum_{n=1}^{\infty}|a_n|^2\underset{if\ normalized}{=}1$$

✓ רישום דואלי: אם $\{\psi_n(r)\}$ קבוצה שלמה (סגורה)

$$\begin{cases}|\Psi\rangle\leftrightarrow\Psi(r)\\|n\rangle\leftrightarrow\psi_n(r)\end{cases}\quad and\quad|\Psi\rangle=\sum_n|n\rangle\cdot a_n=\sum_n|n\rangle\langle n|\Psi\rangle$$

$$\Rightarrow\Psi(r)=\sum_n\psi_n(r)\int\psi_n^*(r')\Psi(r')d^3r'=$$

$$=\int\left[\sum_n\psi_n^*(r')\psi_n(r)\right]\Psi(r')d^3r'=\int\delta(r-r')\Psi(r')d^3r'$$

- המשמעות ההסתברותית של מקדמי פוריה $|a_n|^2$:

המשתנה המדיד מתואר ע"י אופרטור הרמיטי $\hat{A}$. בכל מדידה של המשתנה, התוצאה האפשרית היא רק ע"ע של האופרטור.

נסמן את הו"ע של $\hat{A}$: $|n\rangle$, וע"ע n.

ההסתברות שבמהלך מדידה של $\hat{A}$ המערכת תתגלה במצב $|n\rangle$, כלומר ההסתברות שתוצאת המדידה תהיה n נתונה ע"י: $\left|\langle n|\Psi\rangle\right|^2=|a_n|^2$ (אם במצב זה אין ניוון)

במידה וכן קיים ניוון יש לסכם את כל הערכים הנ"ל (עבור כל מצב ע"מ לקבל את ההסתברות להתממשות של הע"ע הנ"ל.

❖ נתון כי בבור פוטנציאל אינסופי:

1) מתקיים רק הו"ע הראשון (בהסת' 1), כלומר $\Psi=\Psi_1(x)$

אזי בהצגת ו"ע שמלכסנים את $\hat{H}$: $\Psi=\begin{pmatrix}1\\0\\\vdots\end{pmatrix}$

כלומר יש 100% למדוד את Ψ_1 ו- 0% למדוד את כל $i\neq 1$ Ψ_i

2) עבור $\Psi=\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Psi_1+\Psi_2\right)$ נקבל: $\Psi=\begin{pmatrix}1/\sqrt{2}\\1/\sqrt{2}\\\vdots\end{pmatrix}$

- שימושים שונים באופרטורים :

$$\sum_n \langle n|\Phi\rangle\langle\Psi|n\rangle = \sum_n \langle\Psi|n\rangle\langle n|\Phi\rangle = \left\langle\Psi\left|\left[\sum_n |n\rangle\langle n|\right]\right|\Phi\right\rangle \equiv \langle\Psi|\Phi\rangle$$

$$\hat{A} = \hat{1}\hat{A}\hat{1} = \left[\sum_n |m\rangle\langle m|\right]\hat{A}\left[\sum_n |n\rangle\langle n|\right] = \sum_m\sum_n |m\rangle\langle m|\hat{A}|n\rangle\langle n| = \sum_m\sum_n |m\rangle A_{mn}\langle n|$$

$$\langle\Phi|\hat{A}|\Psi\rangle = \langle\Phi|\left(\hat{A}|\Psi\rangle\right) = \sum_{i=1}^n \phi_i^* \sum_{j=1}^n a_{ij}\psi_j = \sum_{i=1}^n\sum_{j=1}^n a_{ij}\phi_i^*\psi_j$$

וקטורי מצב ואופרטורים מטריציים:

- וקטורי מצב מנורמלים מהווים וקטורי יחידה ב"כיוונים" שונים.

אם $\{\phi\}_{n=1}^{\infty}$ - ו"ע א"נ, אזי : $\langle\phi_i,\phi_j\rangle = \int \phi_i^*\phi_j d^3r = \delta_{ij}$

$$|\phi_1\rangle = \begin{pmatrix}1\\0\\ \ldots\end{pmatrix};\ |\phi_1\rangle = \begin{pmatrix}0\\1\\ \ldots\end{pmatrix}\ \ldots$$ - זהו סט פורס (בסיס)

✓ באופן כללי אוסף כל הפ"ע של אופרטור הרמיטי מהווה בסיס.

- ייצוג וקטור מצב במרחב גילברט:

$$f(x) = f_1\phi_1(x) + f_2\phi_2(x) + \ldots \quad , \quad f_i = \langle\phi_i, f\rangle = const$$

$$|f\rangle = \begin{bmatrix}f_1\\f_2\\ \ldots\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\langle\phi_1|f\rangle\\ \langle\phi_2|f\rangle\\ \ldots\end{bmatrix} = f_1\begin{pmatrix}1\\0\\ \ldots\end{pmatrix} + f_2\begin{pmatrix}0\\1\\ \ldots\end{pmatrix} + \ldots$$

- שליפת איבר מהמטריצה (אלכסונית עם ע"ע): $A_{ij} \triangleq \langle\phi_i|\hat{A}|\phi_j\rangle$

- $$\langle f|g\rangle = \left(f_1^*, f_2^*, \ldots\right)\begin{pmatrix}g_1\\g_2\\ \ldots\end{pmatrix} = \underbrace{f^{T*}\cdot g}_{scalar} = \left(f^{T*}\cdot g\right)^T = g^T\cdot f^*$$

- ייצוג אופרטור הפועל על ווקטורי מצב $|\Phi\rangle = \hat{A}|\Psi\rangle$ שקול ל:

$$\begin{bmatrix}\phi_1\\\phi_2\\\phi_3\\ \vdots\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}A_{11} & A_{12} & A_{13} & \cdots\\ A_{21} & A_{22} & A_{23} & \cdots\\ A_{31} & A_{32} & A_{33} & \cdots\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}\psi_1\\\psi_2\\\psi_3\\ \vdots\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\sum_{j=1}^n A_{1j}\psi_j\\ \sum_{j=1}^n A_{2j}\psi_j\\ \vdots\end{bmatrix}$$

- שימושי: הפעלת אופרטור מורכב מהטיפוס $\hat{C} = \hat{A}\hat{B}$ שקולה להפעלה של מטריצה שהינה מכפלת המטריצות

✓ אם $\hat{A}$ - אופרטור הרמיטי, אז אברי האלסון שלו A_{ii} הם ממשיים.

- הגדרת <u>מכפלה חיצונית</u> : $\hat{P}_{mn} = |m\rangle\langle n|$

✓ הפעלת אופרטור זה שקולה להפעלת $\langle n|$ ואז הכפלה בוקטור המצב $|m\rangle$ כפי שמתואר:

$$\hat{P}_{mn}|\Psi\rangle = \left[|m\rangle\langle n|\right]|\Psi\rangle \equiv |m\rangle\left[\langle n|\Psi\rangle\right]$$

- אופרטור היחידה : $\mathbf{1} = \sum_n \hat{P}_{nn} = \sum_n |n\rangle\langle n|$

- רישום מטריצי של משוואת שרדינגר: $\hat{H}|\Psi\rangle = \mathcal{E}|\Psi\rangle$:

$$\begin{pmatrix}H_{11} & H_{12} & \ldots\\ H_{21} & H_{22} & \vdots\\ \vdots & \ldots & \ddots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\ \vdots\end{pmatrix} = \mathcal{E}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\ \vdots\end{pmatrix} \qquad H_{mn} = \langle m|H|n\rangle$$

- אם הפונקציות בעמודות הן פונק' עצמיות של $\hat{H}$, מתקבל ייצוג אלכסוני $H_{mn} = \varepsilon_n\delta_{mn}$

$$\begin{pmatrix}\varepsilon_1 & 0 & 0\\ 0 & \varepsilon_2 & 0\\ 0 & 0 & \ddots\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\ \vdots\end{pmatrix} = \varepsilon\begin{pmatrix}a_1\\a_2\\ \vdots\end{pmatrix}$$

- מט' גזירה לא הרמיטית: $$D_1 = \begin{pmatrix}1 & -1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 1 & -1\\ 0 & 0 & 0 & \ldots\end{pmatrix} \neq \left(D_1^*\right)^T$$

- מט' גזירה הרמיטית : $$D_2 = \begin{pmatrix}0 & i & 0 & 0\\ -i & 0 & i & 0\\ 0 & -i & 0 & i\\ 0 & 0 & -i & 0\end{pmatrix} = \left(D_2^*\right)^T$$

ערכים עצמיים וטרנספורמציה אוניטרית – ליכסון:

- ליכסון של אופרטור : $\left(\hat{H}\right)' = \hat{U}^{-1}\left(\hat{H}\right)\hat{U}$

(בתג סימנו את המטריצה האלכסונית) , כאשר מוגדר :

$$\hat{U} = \begin{bmatrix}\langle 1|1'\rangle & \langle 1|2'\rangle & \langle 1|3'\rangle & \cdots\\ \langle 2|1'\rangle & \langle 2|2'\rangle & \langle 2|3'\rangle & \cdots\\ \langle 3|1'\rangle & \langle 3|2'\rangle & \langle 3|3'\rangle & \cdots\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots\end{bmatrix}$$

$$\hat{U}^{-1} = \hat{U}^{\dagger} = \begin{bmatrix}\langle 1'|1\rangle & \langle 1'|2\rangle & \langle 1'|3\rangle & \cdots\\ \langle 2'|1\rangle & \langle 2'|2\rangle & \langle 2'|3\rangle & \cdots\\ \langle 3'|1\rangle & \langle 3'|2\rangle & \langle 3'|3\rangle & \cdots\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots\end{bmatrix}$$

- אכן קיבלנו כי המטריצות הצמודות הרמיטית גם הופכיות כי :

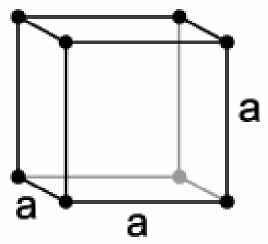
$$\left(\hat{U}\hat{U}^{\dagger}\right)_{mn} = \sum_{l'}\langle m|l'\rangle\langle l'|n\rangle = \langle m|n\rangle = \delta_{mn}$$

- אינווריאנטות: תחת כל טרנספורמציה כזאת העקבה $Tr\left(\hat{A}\right) = \sum_n A_{nn}$ והדטרמיננטה $|A|$ נשארים קבועים !

<u>סריג ברווה (Bravais):</u> - אוסף נקודות מתמטי כאשר בכ"א יכול להיות אטום אחד, שניים במרחק נתון או קבוצת אטומים.

- <u>הגדרות שקולות:</u>
  1) סידור נקודות בדידות במרחב כך שמכל נקודה נשקף "נוף" זהה.
  הסידור נעשה באופן זהה ועקבי ביחס למיקום הנקודות והכיוונים.
  2) אוסף נקודות במרחק בעלות קואורדינטה $\vec{R}=n_1\vec{a}_1+n_2\vec{a}_2+n_3\vec{a}_3$, כאשר $n_1,n_2,n_3\in\mathbb{Z}$
  ו- $\vec{a}_1,\vec{a}_2,\vec{a}_3$ הם **<u>וקטורים פרימיטיביים</u>** בלתי תלויים הפורשים את הסריג ואינם באותו מישור.
- <u>דוגמאות לסריגי ברווה:</u>

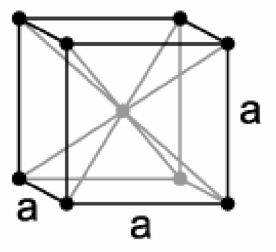
א) מבנה קובי פשוט – SC:



וקטורים פרימיטיביים:

$$\vec{a}_1=a\hat{x}$$
$$\vec{a}_2=a\hat{y}$$
$$\vec{a}_3=a\hat{z}$$

ב) מבנה ממורכז גוף BCC – Body Centered Cubic.



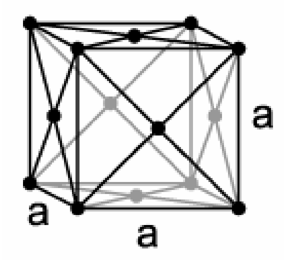
וקטורים פרימיטיביים:

$$\vec{a}_1=a\hat{x}\quad;\quad\vec{a}_2=a\hat{y}\quad;\quad\vec{a}_3=\frac{a}{2}\left(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z}\right)$$

או

$$\vec{a}_1=\frac{a}{2}\left(\hat{y}+\hat{z}-\hat{x}\right)\quad;\quad\vec{a}_2=\frac{a}{2}\left(\hat{z}+\hat{x}-\hat{y}\right)\quad;\quad\vec{a}_3=\frac{a}{2}\left(\hat{x}+\hat{y}-\hat{z}\right)$$

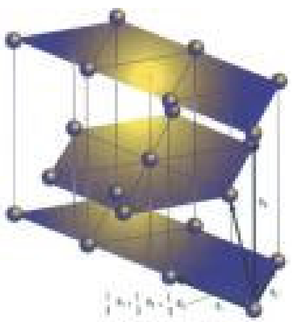
ג) מבנה ממורכז פנים FCC – Face Centered Cubic.

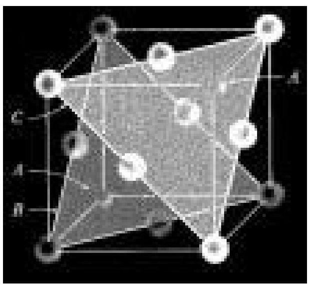


וקטורים פרימיטיביים:

$$\vec{a}_1=\frac{a}{2}\left(\hat{y}+\hat{z}\right)$$
$$\vec{a}_2=\frac{a}{2}\left(\hat{z}+\hat{x}\right)$$
$$\vec{a}_3=\frac{a}{2}\left(\hat{x}+\hat{y}\right)$$

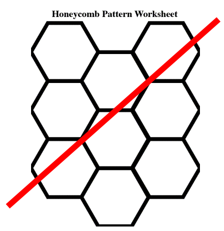
ד) מבנה הקסהגונלי:





גם ע"י צורות משולש ניתן ליצור סריג ברווה.
באותו הזמן ניתן לראותו כסריג FCC רגיל אשר מסתכלים עליו במישורים אחרים.

ה) תצורת כוורת איננה מהווה סריג ברווה מכיוון שלא מכל נקודה נשקף אותו "נוף". למשל עבור צלע אופקית, משתי קצוותיה רואים נופים הפוכים (בכיוונים).
למרות זאת המבנה יכול להיווצר בתוצאה מסריג שפוט עם בסיס חד-אטומי (באלכסון ביחס לכיוון סידור נקודות הסריג).



<u>תכונות של סריגי ברווה:</u>

א) לכל נקודת סריג יש מספר קבוע ושווה של נקודות ("שכנים") הקרובות ביותר.מספר זה מאפיין את הסריג ונקרא coordination number : $FCC \to 12 \;\;;\;\; BCC \to 8 \;\;;\;\; BC \to 6$

ב) צפיפות נקודות הסריג (ליח' שטח) במישור מסויים של הסריג הינה: $n = \dfrac{N}{A_{unit\ cell}} = \dfrac{V/v}{V/d} = d/v$

כאשר $d = 2\pi/k$ מרחק בין מישורים – <u>קובע צפיפות</u> ו- v - נפח התא הפרימיטיבי (מניחים כקבוע מסויים לכל המבנים הגבישיים).

ג) הצפיפות הגדולה ביותר של נקודות הסריג מתקבלת במישורי $\{111\}$ במבנה FCC ובמישורי $\{110\}$ במבנה BCC.

- <u>תא יחידה פרימיטיבי (primitive cell):</u> (עמוד 71)

אלמנט נפח אשר אם מוסט עפ"י כל הווקטורים המגדירים את סריג ברווה, ימלא את כל המרחב ללא ללא חפיפה. בכל תא פרימיטיבי נמצאת נקודת סריג אחת בלבד.

אם צפיפות הנקודות היא n ונפח התא הפרימיטיבי הוא v אזי מתקיים: $nv = 1 \Rightarrow v = 1/n$.

נפח התא הפרימיטיבי v איננו תלוי לכן בבחירת התא.

- <u>תא יחידה / תא יחידה קונבנציונלי (unit cell):</u> (עמוד 73)

אלמנט נפח המקיים סימטריות מסוימות (פשוטות בד"כ) אשר אם מוסט עפ"י תת-קבוצה של ווקטורי סריג ברווה, מכסה את כל המרחב ללא חפיפה. בד"כ גדול יותר מתא פרימיטיבי ולא חייב להיות מוסט על פני כל הווקטורים.

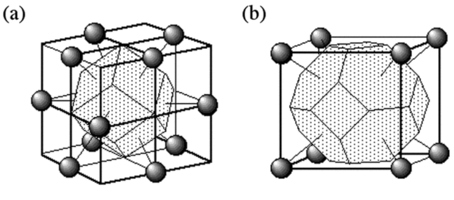
- <u>תא יחידה פרימיטיבי של Wigner-Seitz:</u> (עמוד 73)

אוסף הנקודות במרחב הקרובות ביותר לנקודת סריג מסוימת.

זהו תא פרימיטיבי (הסימטרי ביותר)

לכן בעל כל תכונותיו, בפרט הוא כולל נקודת סריג אחת בלבד.

$FCC:(a) \;,\; BCC:(b)$



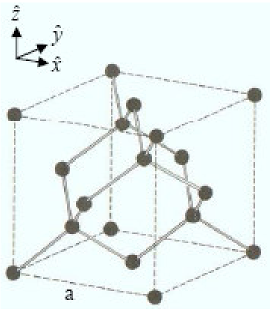
rhombic dodecahedron truncated octahedron

- <u>מבנה הגביש / סריג עם בסיס:</u> (עמוד 75)

ע"מ להדגיש את הסימטריה הקובית של BCC/FCC ניתן להציג אותם ע"י סגיר קובי פשוט עם בסיס, כאשר:

וקטורי הבסיס הם: $BCC:\; 0,\; \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$ וגם $FCC:\; 0,\; \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}),\; \frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z}),\; \frac{a}{2}(\hat{z}+\hat{x})$

- <u>מבנה יהלום</u> (המבנה ניתן לתאור בשתי דרכים):



א) שילוב של 2 מבני FCC המוסתים אחד מהשני בוקטור $\frac{a}{4}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$.

ב) מבנה FCC יחיד עם בסיס דו-אטומי. וקטורי הבסיס הם: $\frac{a}{4}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z}),\; 0$.

כלומר בכל נקודת גביש ישנו אטום, וכן יש אטום בהיסט מכל נקודת גביש.

✓ הנקודות הקרובות ביותר לנקודה $\frac{a}{4}(\hat{x}+\hat{y}+\hat{z})$ הן: $\frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{z}) \;,\; \frac{a}{2}(\hat{y}+\hat{z}) \;,\; \frac{a}{2}(\hat{x}+\hat{y}) \;,\; 0$.

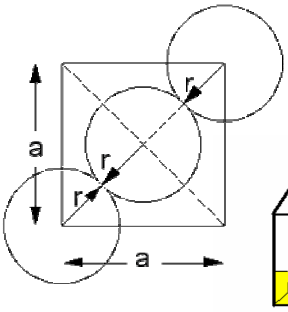
והזווית בין כל הנקודות הנ"ל שווה $\cos(\alpha_{12}) = \dfrac{\vec{v}_1\cdot\vec{v}_2}{|\vec{v}_1|\cdot|\vec{v}_2|} = -\dfrac{1}{3} \;\Rightarrow\; \alpha_{12} = 109.47^o$, כאשר $\vec{v}_1,\vec{v}_2$ - הווקטורים בין הנקודות ה"ל.

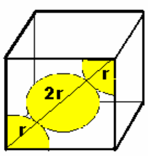
- <u>צפיפות המבנה הגבישי (APF (Atomic Packing Fraction:</u>

ניתן למדוד את היחס של הנפח המנוצל (התפוס ע"י אטומים) לבין הנפח של התא הקונבנציונלי:

עבור N מספר האטומים הנכנסים בתא קונבנציונלי, a - אורך צלע התא, נקבל:

$$APF = \frac{V_{atom}}{V_{cell}} = \frac{N\cdot\frac{4}{3}\pi r^3}{a^3}$$





המבנה	יחסי הגדלים	N	APF
ממורכז פנים - FCC	$4r = \sqrt{2}a$	$8\cdot\frac{1}{8}+6\cdot\frac{1}{2}=4$	$\frac{16}{3}\pi\left(\frac{r}{a}\right)^3 = 74\%$
ממורכז גוף - BCC	$4r = \sqrt{3}a$	$8\cdot\frac{1}{8}+1=2$	$\frac{8}{3}\pi\left(\frac{r}{a}\right)^3 = 68\%$
קובי פשוט - SC	$2r = a$	$8\cdot\frac{1}{8}=1$	$\frac{4}{3}\pi\left(\frac{r}{a}\right)^3 = 52\%$
יהלום - Diamond	$2r = \frac{\sqrt{3}}{4}a$	$8\cdot\frac{1}{8}+6\cdot\frac{1}{2}+4=8$	$\frac{32}{3}\pi\left(\frac{r}{a}\right)^3 = 34\%$

שריג הופכי:

<u>הגדרה:</u> סריג המוגדר ע"י סט הווקטורים $\vec{K}$ אשר מתאר את הגלים המישוריים (מהמשפחה $e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}$) בעלי מחזוריות של סריג ברווה המוגדר ע"י סט הווקטורים $\vec{R}$. $\boxed{e^{i\vec{K}\cdot(\vec{r}+\vec{R})}=e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}} \Rightarrow e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}}=1}$

- ✓ <u>מישור הפאזה הקבועה של הגלים הנ"ל הם המישורים המקבילים של הסריג הישיר</u>.
- ✓ הסריג ההופכי מהווה בעצמו סריג ברווה אם"ם הסריג הישיר $(\vec{R})$ הינו סריג ברווה.
- ✓ אם הסריג הישיר מיוצג ע"י <u>הווקטורים הפרימיטיביים</u> $\vec{a}_1,\vec{a}_2,\vec{a}_3$ אזי הווקטורים הפרימיטיביים של הסריג ההופכי:

$$\boxed{\vec{b}_1=2\pi\frac{\vec{a}_2\times\vec{a}_3}{\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)} \quad , \quad \vec{b}_2=2\pi\frac{\vec{a}_3\times\vec{a}_1}{\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)} \quad , \quad \vec{b}_3=2\pi\frac{\vec{a}_1\times\vec{a}_2}{\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)}}$$

- ✓ מתקיים היחס בין הווקטורים הפרימיטיביים של הסריג הישיר וההופכי:

$$\boxed{\vec{b}_i\cdot\vec{a}_j=2\pi\delta_{ij}=\begin{cases}2\pi & , i=j\\ 0 & , i\neq j\end{cases}}$$

לכן אוסף הווקטורים המייצגים את הסריג ההופכי :

$$\vec{k}=k_1\vec{b}_1+k_2\vec{b}_2+k_3\vec{b}_3 \quad , \quad k_1,k_2,k_3\in\mathbb{Z}$$

- ✓ הסריג <u>ההופכי של הסריג ההופכי</u> הינו הסריג הישיר, כי

$$e^{i\vec{G}\cdot\vec{K}}=e^{i\vec{K}\cdot\vec{G}}=1=e^{i\vec{K}\cdot\vec{R}} \quad \Rightarrow \quad \vec{G}=\vec{R}$$

- ✓ מתקיים הקשר הבא בין הווקטורים הפרימיטיביים:

$$\boxed{\vec{b}_1\cdot(\vec{b}_2\times\vec{b}_3)=\frac{(2\pi)^3}{\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)}}=2\pi\frac{\vec{a}_2\times\vec{a}_3}{\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)}\cdot(\vec{b}_2\times\vec{b}_3)$$

לכן אם <u>נפח תא היחידה של הסריג הישיר</u>, הינו:

$$V_{unit\ cell}=\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)=\vec{a}_3\cdot(\vec{a}_1\times\vec{a}_2)=\vec{a}_2\cdot(\vec{a}_3\times\vec{a}_1)$$

אזי <u>נפח תא היחידה של הסריג ההופכי</u> הינו:

$$V_{reciprocal\ cell}=\vec{b}_1\cdot(\vec{b}_2\times\vec{b}_3)=\frac{(2\pi)^3}{V_{u\,c}}=\frac{(2\pi)^3}{\vec{a}_1\cdot(\vec{a}_2\times\vec{a}_3)}$$

- ✓ קבלת סריג ישיר ממהופכי ע"י:

$$\boxed{\vec{a}_1=2\pi\frac{(\vec{b}_2\times\vec{b}_3)}{\vec{b}_1\cdot(\vec{b}_2\times\vec{b}_3)}}$$

- ✓ דוגמאות של סריגים הופכיים:

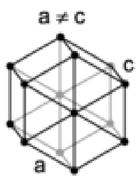
א. לסריג קובי פשוט (SC) $\quad \vec{a}_1=a\hat{x}\ ,\ \vec{a}_2=a\hat{y}\ ,\ \vec{a}_3=a\hat{z}$

הסריג ההופכי : $\vec{b}_1=\frac{2\pi}{a}\hat{x}\ ,\ \vec{b}_2=\frac{2\pi}{a}\hat{y}\ ,\ \vec{b}_3=\frac{2\pi}{a}\hat{z}$

ב. עבור סריג FCC בעל צלע קוביה באורך a נקבל סריג הופכי BCC בעל צלע קוביה באורך $4\pi/a$:

ג. עבור סריג BCC בעל צלע קוביה באורך a נקבל סריג הופכי FCC בעל צלע קוביה באורך $4\pi/a$.

ד. לסריג simple hexagonal בעל אורכים מאפיינים a,c נקבל סריג הופכי מאותו טיפוס, עם הקבועים המאפיינים: $\frac{2\pi}{c},\frac{4\pi}{\sqrt{3}a}$.



- <u>אזור ברילואן הראשון – First Brillouin Zone:</u>

<u>הגדרה:</u> התא הפרימיטיבי של Wigner-Seitz של סריג הופכי.

- ❖ FBZ של BCC הינו התא של Wigner-Seitz של סריג FCC.
- ❖ FBZ של FCC הינו התא של Wigner-Seitz של סריג BCC.

- <u>משטחי (מישורי) הסריג</u>

<u>הגדרה:</u> ע"י כל 3 נקודות אשר אינן על ישר אחד ניתן להגדיר משפחת משטחי סריג מקבילים אשר כוללים את כל נקודות הסריג.

- <u>משפט:</u> לכל משפחה של מישורים בסריג, הנמצאים במרחק d, קיימים ווקטורים מהסריג ההופכי הניצבים למישורים, והקצר ביותר מבין ווקטורי הסריג ההופכי הינו באורך $\frac{2\pi}{d}$. ולהיפך, לכל וקטור מהסריג ההופכי $\vec{K}$ קיימת משפחה של מישורים הניצבים לו ושהמרחקים ביניהם d, כאשר אורך הווקטור הקצר ביותר השייך לסריג ההופכי והמקביל ל- $\vec{K}$ הוא $\frac{2\pi}{d}$.

<u>הוכחת המשפט:</u>

$\Leftarrow$ עבור מישור העובר בראשית $(\vec{k}\cdot\vec{r}=0)$ נובע $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}=1$ כלומר אותו k שייך לסריג ההופכי. נסתכל על e^{ikr} כבעל גל מישורי עם אורך גל $\lambda=d$. כמו כן $\lambda=\frac{2\pi}{|k|}$ ולכן $|k|=\frac{2\pi}{d}\Rightarrow\vec{k}=\frac{2\pi}{d}\hat{n}$

- $\Rightarrow$ נניח $\vec{K}$ הווקטור הקצר ביותר והמקביל לווקטור הסריג ההופכי. ניקח אוסף גלים מישוריים e^{iKr} אשר מקבלים את הערך 1 על מישורים מסויימים (ובפרט על זה העובר בראשית). מישורים אלה ניצבים ל- $\vec{K}$ (עפ"י הגדרת גל מישורי) ונמצאים במרחק $d=\frac{2\pi}{K}$ אחד מהשני. מכיוון שווקטורי הסריג הישיר $\vec{R}$ מקיימים $e^{iKR}=1$ לכל K מישורים אלה חייבים להתלכד עם מישורי הסריג הישיר והמרחק ביניהם חייב להיות d (ולא גדול ממנו), אחרת נקבל עפ"י חלק א' כי קיים $k=\frac{2\pi}{nd}$ קצר יותר מ-K וזו סתירה להנחה כי K הוא הקצר ביותר. מש"ל.

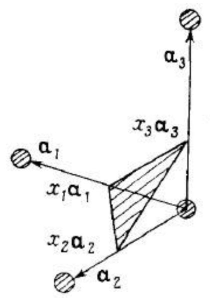
- **אינדקסי מילר (Miller Indices)**:

הגדרה: אלו הן הקואורדינטות שלמות של וקטור הסריג ההופכי מהצורה $h\vec{b}_1+k\vec{b}_2+l\vec{b}_3$. זהו וקטור הקצר ביותר, מתוך הווקטורים הפרימיטיביים היוצרים את הסריג ההופכי, הניצב למישור הסריג המדובר.

הגדרה (אלטרנטיבית): אם המישור מוגדר ע"י $\vec{K}\cdot\vec{r}=D$ אזי הוא חותך את הווקטורים הפרימיטיביים של הסריג הישיר בנקודות $x_1\vec{a}_1$, $x_2\vec{a}_2$ ו-$x_3\vec{a}_3$ כאשר נדרש $\vec{K}\cdot(x_1\vec{a}_1)=D$. נקבע את אינדקסי מילר כך שיתקיים:

$\vec{K}\cdot\vec{a}_1=2\pi h$, $\vec{K}\cdot\vec{a}_2=2\pi k$, $\vec{K}\cdot\vec{a}_3=2\pi l$ ולכן נובע

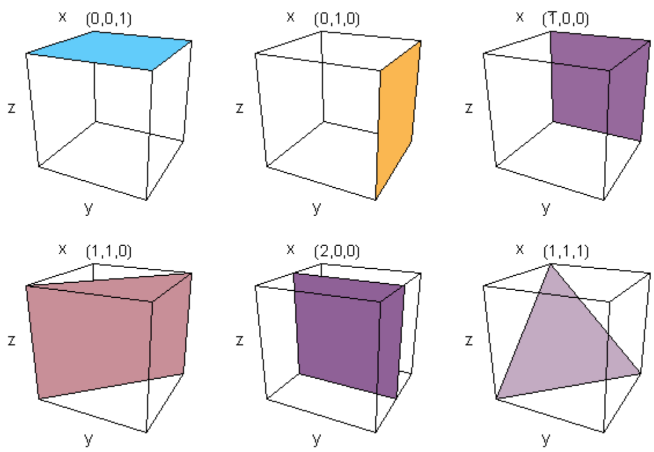
$$x_1=\frac{D}{2\pi h}\ ,\ x_2=\frac{D}{2\pi k}\ ,\ x_3=\frac{D}{2\pi l}$$



✓ מתקיים יחס פרופורציה:

$$(h,k,l)=\alpha\left(\frac{1}{x_1},\frac{1}{x_2},\frac{1}{x_3}\right)\ ,\ \alpha\geq 1\text{ - נבחר כך ש- }h,k,l\in\mathbb{Z}$$

❖ משטחי סריג ואינדקסי מילר המתאימים למשטחים אלו:



✓ ניתן לכתוב $\bar{n}$ במקום $-n$ באינדקסי מילר: $(1,-2,3)=(1\bar{2}3)$

✓ בסריג קובי, האינדקסים הבאים שקולים ומייצגים אותו מישור $(001),(010),(100),(00\bar{1}),(0\bar{1}0),(\bar{1}00)$ (בסיבוב נק' הסתכלות).

❖ דוגמה עבור סריג קובי:

$$\vec{k}=\frac{2\pi}{a}\left(h\hat{x}+k\hat{y}+l\hat{z}\right)\ \Rightarrow\ |k|=\frac{2\pi}{a}\sqrt{h^2+k^2+l^2}$$

המרחק בין המישורים בסריג הישיר: $d=\frac{2\pi}{|k|}=\frac{a}{\sqrt{h^2+k^2+l^2}}$

- הגדרת פוטנציאל מחזורי:

$$\begin{cases}V(x+a)=V(x) & ,\quad 1D\\ V(\vec{r}+\vec{R})=V(\vec{r}) & ,\quad 3D\end{cases}$$

- **משפט בלוך**:

מצבים עצמיים (פתרונות של מש' שרדינגר) של H עבור פוטנציאל מחזורי נתונים ע"י: $\boxed{(1)\quad \Psi(x)=e^{ikx}\cdot u_k(x)}$

כאשר $u_k(x)=u_k(x+a)$, a - מחזוריות הפוטנציאל 1D.

באופן שקול מתקיים: $\boxed{(2)\quad \Psi(x+a)=e^{ika}\cdot\Psi(x)}$

✓ $\boxed{k}$ - הינו <u>התנע הגבישי</u> !!! (אולי היה נוח יותר לכתוב q...)

✓ גם הפוטנציאל $V=0$ מחזורי ולכן אלק' חופשי $\Psi(x)=e^{ikx}$ מתאים ומקיים את המשפט, ואז מסיקים כי $u_k(x)\equiv 1$.

✓ פונקצית הגל עצמה אינה מחזורית, אך $|\Psi(x)|$ - הסת' מחזורית

- <u>הוכחת משפט בלוך</u>:

○ הגדרת אופרטור הזזה במרחק a: $T_af(x)=f(x+a)$

○ נקח מש' שרדינגר עם פוטנציאל מחזורי: $H\Psi(x)=\mathcal{E}\Psi(x)$

○ $$(T_aH)\Psi(x)=T_a(H\Psi)=H(x+a)\Psi(x+a)=$$
$$=H(x)\Psi(x+a)=(HT_a)\Psi(x)$$

✓ עבור H של פוטנציאל מחזורי: $T_aH=HT_a$ (מתחלפים).

○ <u>משפט עזר</u>: אם T ו- H מתחלפים, אזי ניתן לבחור וקטורים עצמיים של H כך שיהיו גם ו"ע של T.

הוכחה: עם לשתי מט' ע"ע שונים, אזי $HT=TH$ מתקיים לגבי כל איברי המטריצה $\sum_j H_{ij}T_{jk}=\sum_j T_{ij}H_{jk}$, אבל $H_{ij}=0\ \forall i\neq j$ (H - אלכסונית) ולכן: $H_{ii}T_{ik}=T_{ik}H_{kk}$

$$\Rightarrow T_{ik}\underbrace{(H_{ii}-H_{kk})}_{\neq 0}=0\Rightarrow T_{ik}=0\quad\forall i\neq k\Rightarrow\ \text{T אלכסונית}$$

○ נשתמש במשפט עזר עבור מש' שרדינגר. Ψ הוא פ"ע (=ו"ע) של H. כיוון ש- T_a נתחלף עם H, אותו Ψ הוא גם ו"ע של T_a כלומר $T_a\Psi=\Psi(x+a)=C\Psi$

○ נדרוש $|\Psi(x+a)|^2=|\Psi(x)|^2$ ולכן $|C|=1\Rightarrow C=e^{ib}$

○ ונרשום $C=e^{ika}$, עם אותו a של המחזור.

✓ לבסוף נציב ונקבל את המשפט: $\Psi(x+a)=e^{ika}\Psi(x)$

- <u>התנע הגבישי</u> $k=\frac{1}{ia}\ln\left[\frac{\Psi(x+a)}{\Psi(x)}\right]+\frac{2\pi n}{a}\ ,\ n=0,\pm1,\ldots$

✓ k ניתן לתיחום בקטע $-\frac{\pi}{a}<k<\frac{\pi}{a}$ ללא איבוד אינפורמציה.

✓ $\Psi_k=\Psi_{k+\frac{2\pi n}{a}}$ כלומר $\varepsilon(k)=\varepsilon\left(k+\frac{2\pi n}{a}\right)$ - מחזורי.

✓ אורך אזור ברילואן הראשון (FBZ) לכן הוא $\frac{2\pi}{a}$.

- **<u>דיאגרמת E-K:</u>**

אם נציב את הניסוח השני של משפט בלוך במשוואת שרדינגר, נקבל משוואה דיפרנציאלית לפי הפונקציה $u(x)$:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{1}{i}\left[\left(\frac{d}{dx}+k\right)^2+V(x)\right]u_k(x)=\mathcal{E}(k)u_k(x)$$

עם תנאי שפה מחזורי: $u_k(x+n)=u_k(x)$

ועבור פוטנציאל מחזורי נתון פותרים מד"ר במשתנה x ומקבלים את פסי האנרגיה $\mathcal{E}(k)$ - <u>כל נק' עליה היא פתרון מש' שרדינגר</u>.

- **<u>משפט המהירות של אלקטרון בלוך:</u>**

מהירותו של אלק' בפס n מחזורי: $\boxed{v_{n,1D}(k)=\left.\frac{\partial\omega}{\partial k}\right|_{k=k_0}=\frac{1}{\hbar}\frac{d\mathcal{E}}{dk}}$

✓ עבור אלקטרון חופשי מתקיים $\mathcal{E}(k)=\frac{\hbar^2k^2}{2m}$ ולכן:

$$v=\frac{1}{\hbar}\frac{d}{dk}\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right)=\frac{1}{\hbar}\frac{\hbar^2}{2m}2k=\frac{\hbar k}{m}=\frac{p}{m}$$

✓ **<u>מהירות זו קבועה בזמן</u>** היות ופתרנו משוואת שרדינגר סטציונרית. לכן תחת פוטנציאל מחזורי האלקטרון אינו מתפזר

✓ **<u>המהירות מתאפסת במרכז וקצה אזור ברילואן !!!</u>**

- <u>הוכחת המשפט</u>: עפ"י בלוך: $\Psi(k,x)=e^{ikx}u(k,x)$.

  - נצא ממשוואת שרדינגר סטציונרית: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi}{dx^2}(\mathcal{E}-V)\Psi$
  - נסמן $\chi\triangleq e^{ikx}\frac{\partial u}{\partial k}$, $\frac{\partial\Psi}{\partial k}=\frac{\partial}{\partial k}\left(e^{ikx}u(k,x)\right)=ix\Psi+\chi$
  - נגזור את משוואת שרדינגר לפי k ונקבל:

$$\frac{\partial}{\partial k}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}=\frac{\partial^2}{\partial x^2}\frac{\partial\Psi}{\partial k}=\frac{\partial\Psi}{\partial x}\left(i\Psi+ix\frac{\partial\Psi}{\partial x}+\frac{\partial\chi}{\partial x}\right)=$$

$$=i\frac{\partial\Psi}{\partial x}+i\frac{\partial\Psi}{\partial x}+ix\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\chi}{\partial x^2}=2i\frac{\partial\Psi}{\partial x}+ix\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\chi}{\partial x^2}$$

$$\Rightarrow-\frac{\hbar^2}{2m}\left(2i\frac{\partial\Psi}{\partial x}+ix\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\chi}{\partial x^2}\right)=\frac{\partial}{\partial k}\left[\left(\mathcal{E}(k)-V\right)\Psi\right]=$$

$$=\left[\mathcal{E}(k)-V\right](ix\Psi+\chi)+\frac{d\mathcal{E}}{dk}\Psi$$

  - כיוון ש- Ψ הוא פתרון של משוואת שרדינגר נקבל:

$$\Rightarrow-\frac{i\hbar^2}{m}\frac{\partial\Psi}{\partial x}=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\chi}{\partial x^2}-V\chi+\mathcal{E}\chi+\frac{d\mathcal{E}}{dk}\Psi$$

$$-\frac{i\hbar^2}{m}\frac{\partial\Psi}{\partial x}=\left(\mathcal{E}-\hat{H}\right)\left|\chi\right\rangle+\frac{d\mathcal{E}}{dk}\Psi$$

  - נכפיל ב- Ψ^* ונבצע אינטגרציה על כל המרחב:

$$-\frac{i\hbar^2}{m}\int\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}dx=\underbrace{\left\langle\Psi\right|\mathcal{E}-\hat{H}\left|\chi\right\rangle}_{=0}+\frac{d\mathcal{E}}{dk}\underbrace{\left\langle\Psi|\Psi\right\rangle}_{=1}$$

$$\Rightarrow\int J\,dx=-\frac{i\hbar^2}{2m}\int\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial x}-\Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial x}\right)dx\equiv v=\frac{1}{\hbar}\frac{d\mathcal{E}}{dk}$$

- **<u>המודל הסמי-קלאסי:</u>**

✓ המוגל מניח כי האלק' נשאר באותו הפס (לא רוחש אנרגיה אינסופית עקב האצה מושלמת בשדה, לכן לא תקף ב- $V=0$.

✓ כמו כן חייב להתקיים: (a-מחזוריות הגביש) $eEa\ll\mathcal{E}_g^2(k)/\mathcal{E}_F$

- <u>מיקום האלקטרון</u>: נרצה להציג את אלקטרון בלוך כחבילת גלים.

$$\Psi(x,t)=\int g(k)\Psi(x)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}dk$$

כאשר את $g(k)$ בוחרים כך ש- $\Delta k\ll\frac{2\pi}{a}$ $\Leftarrow$ u משתנה מהר מאד ולכן ניתן לקחת אותו בממוצע כקבוע.

✓ מהדרישה הנ"ל בעקרון אי-הוודאות: $\Delta x\Delta k>\frac{1}{2}\Rightarrow\Delta x\gg a$

לכן לא ניתן למקם אלק' עפ"י יחידה אחת (מחזור פוטנציאל יחיד), אלא על פני כמה.

- <u>הגדרת שדה חשמלי מיקרוסקופי ומקרוסקופי:</u>

פוטנציאל מיקרו-סקופי: נובע מהפעלת כוחות של אטומים ואלק' אחד על השני – זהו הפוטנציאל המחזורי.

פוטנציאל מקרו-סקופי: נובע מהפעלת שדה חיצוני או V_{BI}. הוא משתנה לאט ביחס לפוטנציאל האטומים.

- <u>משוואת התנועה של אלק' ממוקם תחת השפעת שדה מקרוסקופי:</u>

אנרגית האלקטרון: $\mathcal{E}_{tot}=\mathcal{E}(k)-q\varphi_{macro}(x)$

אם אין התנגשויות של אלקטרונים ואטומים: $\frac{d\mathcal{E}_{tot}}{dt}=0$

$$\Rightarrow\frac{d\mathcal{E}(k)}{dt}=\frac{d\mathcal{E}}{dk}\frac{dk}{dt}=q\frac{d\varphi(x,t)}{dt}=q\frac{d\varphi}{dx}\frac{dx}{dt}$$

$$\Rightarrow\hbar v\frac{dk}{dt}=-qEv\Rightarrow\boxed{\hbar\frac{dk}{dt}=-e\left(E+\frac{1}{c}v_n(k)\times H(r,t)\right)}$$

והדבר אכן דומה לחוק השני של ניוטון כי $\hbar\cdot dk=dp$

- <u>ההבדלים בין משוואת התנועה הסמי-קלאסית לזו של ניוטון:</u>

1. F - אינו הכוח הפועל על האלק', אלא נגזרת הפוטנציאל המקרוסקופי בלבד (הכוח האמיתי זה נגזרת הפוטנציאל הכולל).
2. k - אינו תנע, אלא תנע גבישי.

- **<u>מסה אפקטיבית</u>:**

$$\mathcal{E}=\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}\Rightarrow\boxed{m^*=\hbar^2\left(\left.\frac{d^2\mathcal{E}}{dk^2}\right|_{k_0}\right)^{-1}}\Rightarrow v=\frac{\hbar k}{m^*}$$

✓ <u>משמעות המסה האפקטיבית</u>: הקשר בין התנע הגבישי למהירות

✓ $k=\frac{m^*v}{\hbar}\Rightarrow\hbar\frac{dk}{dt}=m^*\frac{dv}{dt}=-eE=F$

✓ עבור כוח קבוע בזמן מאינטגרציה נקבל: $k=-\frac{eE}{\hbar}t+k_0$

- **<u>הקירוב הפרבולי:</u>**

סביב נקודות אקסטרמום של דיאגרמת $E-K$ ניתן לקרב את $\mathcal{E}(k)$ לפרבולה ע"י טיילור:

$$\mathcal{E}(k)\cong E_0\pm\frac{1}{2}\frac{d^2\mathcal{E}}{dk^2}(k-k_0)^2=E_0\pm\frac{\hbar^2}{2m^*}(k-k_0)^2$$

+ (פלוס) במקרה של מינימום , - (מינוס) במקרה של מקסימום.

<u>אוסילציות בלוך</u>: F-כוח, ΔE - רוחב הפס : $\boxed{x_{\max}=\Delta E/F}$

$\boxed{\text{בחישוב מספר מצבים להוסיף } \times 2 \text{ בגלל ספירת הספין !!!}}$

- **<u>חישוב מצבי אנרגיה ותנע גבישי מותרים תחת ת"ש מחזוריים:</u>**

עבור קופסה שנפחה L^3 (כאשר L גדול כרצוננו).

נבחר ת"ש מחזוריים (Karman) מהצורה: $\Psi(x+L)=\Psi(x)$

וע"י הפעלת בלוק N פעמים:

$$\Psi(x+Na)=e^{iNak}\Psi(x)\Rightarrow k=\frac{2\pi}{a}\frac{n}{N}=\frac{2\pi}{L}n=\Delta k\cdot n$$

✓ במקרה התלת ממדי: $k_u=\frac{2\pi}{L}n_u \quad | \; u\in\{x,y,z\}\,,\; n\in\mathbb{Z}$

✓ <u>בתוך FBZ יש לכן N מצבים מותרים בכל פס</u> והם חוזרים על עצמם מחוצה לו – לכן אין צורך (ואפשרות מיקום) לצאת ממנו.

רוחב כל מצב $=\Delta k=\frac{2\pi}{Na}$

✓ נפח של מצב מותר במרחב k הוא: $\frac{1}{2}\left(\frac{2\pi}{L}\right)^d$

L - מימד אורך אמיתי של הסריג (מצטמצם עבור "ליח' אורך")

- **<u>אופן מילוי הפסים:</u>**

א. תמיד מתחילים ממילוי האנרגיות הנמוכות ביותר באותו פס.

ב. כאשר נגמר המקום באותו פס, עוברים לאנרגיה הנמוכה ביותר בפס הבא.

ג. עוצרים כאשר נגמרים האלקטרונים.

ד. אם הפס האחרון מלא חלקית בלבד – זוהי מתכת.

אם הפס האחרון מלא בדיוק – זהו מבודד/ מל"מ.

<u>זרם בקירוב הסמי-קלאסי:</u>

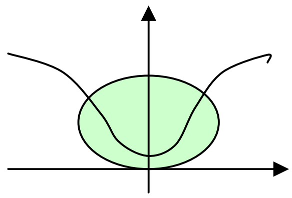
עבור אלמנט נפח $\Omega=dxdydz$, $n=\frac{1}{\Omega}$ - צפיפות

והמהירות $v_i=\frac{1}{\hbar}\frac{d\varepsilon}{dk}$. אנו מכירים את הקשר: $j=nqv$ לכן

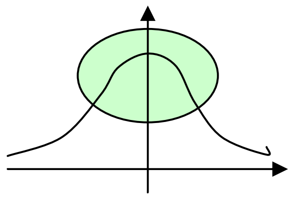
<u>סכימת המצבים:</u> $\sum_{\substack{full\\states}}v_i=\sum_{\substack{all\\states}}v_i-\sum_{\substack{empty\\states}}v_i$

✓ הסכימה תתבצע על מה שנוח יותר לסכם (ממה שיש פחות) <u>כאשר כך המצבים אינו משפיע על הזרם (בגלל סימטריות)</u>.

✓ בנוסף ניתן להשתמש בקירוב הפרבולי רק כאשר מסכמים על המצבים הנמצאים בקרבת האקסטרמום של הפרבולה:



סיכום על אלקטרונים (המצבים המלאים)



סיכום על חורים (המצבים הריקים)

✓ בגלל הסידור הסימטרי בפס מלא לחלוטין לא יהיה זרם.

✓ בפס המלא חלקית תחת שדה יש היסט ולכן מהירות (זרם) נטו.

<u>נגדיר זרם אלקטרונים/ חורים:</u> $J=-\frac{1}{\Omega}q\sum_{\substack{full\\states}}v_i=+\frac{1}{\Omega}q\sum_{\substack{empty\\states}}v_i$

- **<u>פונקצית צפיפות מצבי אנרגיה ליחידת נפח</u>**: (בפס n)

$$g_n(\varepsilon)d\varepsilon=\frac{2}{V}\cdot\begin{pmatrix}Number\ of\ Legal\\ States\ at\ \varepsilon<\varepsilon(k)<\varepsilon+d\varepsilon\end{pmatrix}$$

- $$\Rightarrow g_n(\varepsilon)d\varepsilon=\frac{2}{V}\frac{\begin{pmatrix}Volume\ at\\ k\ domain\end{pmatrix}}{\begin{pmatrix}Volume\ of\\ \text{single state}\end{pmatrix}}=\frac{2}{V}\frac{dk(\varepsilon)}{\frac{(2\pi)^3}{V}}=\frac{dk(\varepsilon)}{4\pi^3}$$

- אנרגית אלקטרון: $\mathcal{E}(k)=\mathcal{E}_c+\hbar^2\left(\frac{k_x}{2m_x^*}+\frac{k_y}{2m_y^*}+\frac{k_z}{2m_z^*}\right)$

- אנרגית חורים: $\mathcal{E}(k)=\mathcal{E}_v-\hbar^2\left(\frac{k_x}{2m_x^*}+\frac{k_y}{2m_y^*}+\frac{k_z}{2m_z^*}\right)$

- **<u>ריכוזים</u>**: האלקטרונים בטמפ' $T=0^\circ$: $n=\int_0^{\varepsilon_F}g_e(\varepsilon)d\varepsilon$

$$n_c(T)=\int_{\varepsilon_c}^{\infty}g_c(\varepsilon)f_{FD}(\varepsilon)d\varepsilon=\int_{\varepsilon_c}^{\infty}g_c(\varepsilon)\frac{1}{e^{(\varepsilon-\mu)/K_BT}+1}d\varepsilon$$

$$p_v(T)=\int_{-\infty}^{\varepsilon_v}g_v(\varepsilon)\left(1-f_{FD}(\varepsilon)\right)d\varepsilon$$

- <u>קירוב מקסוול-בולצמן</u>: $\mu-\mathcal{E}_v\gg k_BT\ ;\ \mathcal{E}_c-\mu\gg k_BT$

$$\Rightarrow f_{FD}(\varepsilon)=\frac{1}{e^{(E-E_F)/KT}+1}\underset{(E-E_F)>3KT}{\approx}e^{-(E-E_F)/KT}$$

- $$g_{C,V}(\varepsilon)=\sqrt{2\left|\mathcal{E}-\mathcal{E}_{C,V}\right|}\frac{m_{C,V}^{*\ 3/2}}{\hbar^3\pi^2}$$

✓ <u>לאחר הקירוב</u>: $n_C(T)=N_C(T)e^{-(\mathcal{E}_c-\mu)/k_BT}$

$$N_C(T)=\int_{\mathcal{E}_C}^{\infty}g_C(\varepsilon)e^{-(\mathcal{E}-\mathcal{E}_c)/k_BT}d\varepsilon=\frac{1}{4}\left(\frac{2m_C^*k_BT}{\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$$

$$p_V(T)=P_V(T)e^{-(\mu-\mathcal{E}_V)/k_BT}$$

$$P_V(T)=\int_{-\infty}^{\mathcal{E}_C}g_V(\varepsilon)e^{-(\mathcal{E}_V-\mathcal{E})/k_BT}d\varepsilon=\frac{1}{4}\left(\frac{2m_V^*k_BT}{\pi\hbar^2}\right)^{3/2}$$

❖ מצא k מקס' בגז אלק' קוונטי בריכוז n ובטמפ' אפס:

$$n=\int_0^{\varepsilon_F}2g(\varepsilon)d\varepsilon=\frac{k^3}{3\pi^2}\Rightarrow k_{\max}=\left(3\pi^2n\right)^{1/3}$$

❖ מצא את ריכוז המצבים המותרים של האלק' בקליפה ברדיוס k:

$$\frac{dn}{dk}=\frac{k^2}{\pi^2}\Rightarrow dn=2\frac{4\pi k^2dk}{(2\pi)^3}$$

❖ מצא את צפיפות מצבי האנרגיה המותרים של אלק' באנרגיה ε:

$$g(\varepsilon)=\frac{dn}{d\varepsilon}=\frac{dn}{dk}\frac{dk}{d\varepsilon}=\frac{k^2}{\pi^2}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\frac{1}{2\sqrt{\varepsilon}}=\frac{m}{\hbar^2\pi^2}\sqrt{\frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}}$$

- <u>כיוון האצת החורים</u>: $\mathcal{E}=\mathcal{E}_{\max}-\frac{\hbar^2}{2m^*}(k-k_0)^2$

$$v=\frac{1}{\hbar}\frac{d\mathcal{E}}{dk}=-\frac{\hbar(k-k_0)}{m^*}\Rightarrow a=\dot{v}=-\frac{\hbar}{m^*}\frac{dk}{dt}=-\frac{F}{m^*}=+\frac{eE}{m^*}$$

תרגול 1 - חזרה על התורה הא"מ, אנרגיה ותנע:

❖ תרגיל 1: חשב את התנע שנמסר לאלקי' ע"י הגל הא"מ.

$$\vec{E} = E_0 \cos(k_z z - \omega t)\,\hat{x}$$

• משוואות השדה הא"מ: $\vec{B} = \frac{E_0}{c}\cos(k_z z - \omega t)\,\hat{y}$

• משוואות מקסוול בריק:

$$\nabla\cdot\vec{B} = 0 \qquad \nabla\times\vec{B} = \frac{1}{c}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$

$$\nabla\cdot\vec{E} = 0 \qquad \nabla\times\vec{E} = \frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$$

✓ בגל מישורי $\vec{\nabla} = j\vec{k}$ לכן $\nabla\times\vec{E} = j|k|\,\hat{z}\times\vec{E} = j\omega\vec{B}$

• כוח לורנץ: n צפיפות אלק', $\vec{f} = n\cdot\vec{F} = n\cdot e\left(\vec{E}+\vec{v}\times\vec{B}\right)$

• הכוח הפועל על יח' נפח: $\vec{f} = ne\vec{E} + \underbrace{ne\vec{v}}_{j\triangleq\{\text{current density}} \times\vec{B}$

• כוח ממוצע (בכיוון $\hat{z}$):

$$\left\langle\vec{f}\right\rangle = \left\langle\vec{j}\times\vec{B}\right\rangle = \left\langle\sigma\vec{E}\times\vec{B}\right\rangle = \left\langle\tfrac{\sigma}{c}E_0^2\cos^2(\omega t)\right\rangle\hat{z} = \frac{\sigma}{2c}E_0^2\hat{z}$$

• הספק אנרגיה ממוצע: $\langle W\rangle = \left\langle\vec{j}\cdot\vec{E}\right\rangle = \frac{\sigma}{2}E_0^2$

✓ התנע שנמסר אלקטרון: $\underbrace{\underbrace{T}_{[time]}\cdot\underbrace{f}_{[force]}}_{[momentum]} = \frac{T\langle W\rangle}{c} \Rightarrow P = \frac{\mathcal{E}}{c}$

✓ קיבלנו כי תנע הפוטון נמסר לאלקטרון

❖ תרגיל 2: הוכח שפוטון אינו יכול להתבלע באלק' חופשי הנמצא במנוחה התחלתית.

• עבור אלק' לא יחסותי: $E_e = \frac{p^2}{2m}\ ,\ p=\hbar k \Rightarrow E_e = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$

• עבור הפוטון מתקיים: $E_p = pc = \hbar kc$

○ נניח בשלילה כי הדבר אפשרי.

○ משימור ותנע: $p_i = \hbar k'_p = p_f = \hbar k_e \Rightarrow k'_p = k_e$

○ משימור האנרגיה: $E_i = \hbar ck'_p = E_f = \frac{\hbar^2k_e^2}{2m_e} \Rightarrow k_e = \frac{2mc}{\hbar}$

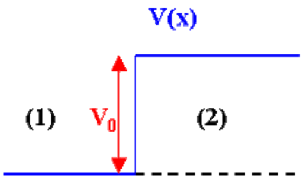
○ סתירה להנחת אי היחסותיות $v_e = \frac{p_e}{m_e} = \frac{\hbar k_e}{m_e} = 2c \Rightarrow$

✓ גם עבור אלקטרון יחסותי התופעה אינה אפשרית כיוון שאז:

$$\underbrace{\left(\cancel{m_e c^2}\right)}_{0\ \text{at large energy}} = p^2c^2 - E^2 \Rightarrow pc = E$$

והדבר אינו אפשרי מכיוון שאין חיתוך בגרפי האנרגיה באינסוף.

תרגול 2 – מעבר של פונקציית גל דרך מדרגת פוטנציאל סופית:



מקרה I - $\boxed{E>V_0}$

תחום (1) - $x<0$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(x) - E\Psi(x) = 0 \Rightarrow \nabla^2\Psi(x)+k_1^2\Psi(x)=0$$

כאשר מתקיים: $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\hbar k_1)^2}{2m} \Rightarrow k_1^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$

תחום (2) - $x\ge 0$:

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(x) - (E-V_0)\Psi(x) = 0 \Rightarrow \nabla^2\Psi(x)+k_2^2\Psi(x)=0$$

כאשר מתקיים: $E-V_0 = \frac{p^2}{2m} = \frac{(\hbar k_2)^2}{2m} \Rightarrow k_2^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}$

ניחוש פתרון:

$$\Psi = \begin{cases} Ae^{ik_1x}+Be^{-ik_1x} & ,\ x<0 \\ Ce^{ik_2x} + \underbrace{\cancel{De^{-ik_2x}}}_{not\ physical} & ,\ x\ge 0\end{cases}$$

משיקולי רציפות: $\Psi(0^-)=\Psi(0^+)\ ;\ \Psi'(0^-)=\Psi'(0^+)$

נובע כי:

$$\begin{cases} A+B=C \\ k_1(A-B)=k_2C\end{cases} \Rightarrow \frac{C}{A} = \frac{2k_1}{k_1+k_2}\ ;\ \frac{B}{A} = \frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}$$

• הזרמים $j_I = \frac{\hbar k_1}{M}|A|\ ;\ j_R = -\frac{\hbar k_1}{M}|B|\ ;\ j_I = \frac{\hbar k_2}{M}|C|$

• מקדם העברה: $T = \frac{j_T}{j_I} = \frac{k_2}{k_1}\left|\frac{C}{A}\right|^2 = \frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}$

• מקדם החזרה: $R = \frac{-j_R}{j_I} = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left(\frac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\right)^2 = 1-\frac{4k_1k_2}{(k_1+k_2)^2}$

✓ וכמובן שמתקיים: $R+T=1$

מקרה II - $\boxed{E<V_0}$ - מציבים $\rho = -ik_2$ ואז:

פתרון פונקציית הגל הינו מהצורה

$$\Psi = \begin{cases} Ae^{ik_1x}+Be^{-ik_1x} & ,\ x<0 \\ Ce^{-\rho x} + \cancel{De^{\rho x}} & ,\ x\ge 0\end{cases}$$

ע"י דרישת הרציפות נקבל: $\left(\frac{B}{A}\right) = \frac{k_1-i\rho}{k_1+i\rho}\ ;\ \left(\frac{D}{A}\right) = \frac{2k_1}{k_1-i\rho}$

עבור $x>0$ הפ' ממשית לכן: $j_T = \frac{\hbar}{2mi}\left(\Psi^*\nabla\Psi - \Psi\nabla\Psi^*\right) = 0$

ולכן מקדמי ההעברה וההחזרה כעת: $R = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = 1\ ;\ T=0$

<u>חלקיק בבור פוטנציאל אינסופי – חד-מימדי:</u>

- נניח פוטנציאל מהצורה : $V(x)=\begin{cases}0 & , \ 0<x<L \\ \infty & , \ else\end{cases}$
- ניחוש פתרון פונקצית הגל: $\Psi(x)=\begin{cases}Ae^{ikx}+Be^{-ikx} & , 0<x<L \\ 0 & , \ else\end{cases}$
- תנאי השפה של הבעיה: $\Psi(0)=\Psi(L)=0 \Rightarrow A=B, kL=n\pi$
- פתרון מדויק אחרי נירמול: $\Psi(x)=\sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \ , \ n\in\mathbb{N}$
- רמות האנרגיה בבור: $\mathcal{E}=\frac{\hbar^2 k^2}{2M}\Rightarrow \mathcal{E}_n=\frac{\hbar^2\pi^2}{2ML^2}n^2 \ , \ n=1,2,...$

✓ לכן החלקיק לא יכול לקרוס לאנרגיה אפס בתוך הבור.
✓ אין ניוון ברמות האנרגיה השונות.

<u>חלקיק בבור פוטנציאל אינסופי – תלת-מימדי:</u>

- נניח פוטנציאל מהצורה : $V(x)=\begin{cases}0 & , \ 0<x,y,z<L \\ \infty & , \ else\end{cases}$
- פתרון: $\Psi(x)=A(k)\sin(k_x x)\sin(k_y y)\sin(k_z z)$

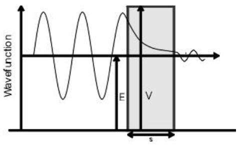
$$k_x L=n_x\pi \quad ; \quad k_y L=n_y\pi \quad ; \quad k_z L=n_z\pi$$

- רמות האנרגיה בבור: $\mathcal{E}=\frac{\hbar^2k^2}{2M}=\frac{\hbar^2}{2M}\left(k_x^2+k_y^2+k_z^2\right)$

$$\mathcal{E}_n=\underbrace{\frac{\hbar^2\pi^2}{2ML^2}}_{\mathcal{E}_1}\left(n_x^2+n_y^2+n_z^2\right), \ n_x,n_y,n_z=1,2,...$$

✓ ישנו ניוון ברמות אנרגיה, למשל מדרגה 6 עבור $\mathcal{E}=14\mathcal{E}_1$

<u>תרגול 3 - מצבים סטציונריים של פונקצית הגל</u>



<u>מינהור דרך מחסום פוטנציאל</u> $E<V_0$

- ניחוש פתרון: $\Psi(x)=\begin{cases}Ae^{ikx}+Be^{-ikx} & , x<0 \\ Ce^{-\rho x}+De^{\rho x} & , 0<x<x_0 \\ Ee^{ikx} & , x>x_0\end{cases}$
- תנאי השפה דורשים רציפות פונקצית הגל ונגזרתה:

$$\Psi(0^+)=\Psi(0^-) \ ; \ \Psi'(0^+)=\Psi'(0^-)$$
$$\Psi(x_0)=\Psi(x_0) \ ; \ \Psi'(x_0)=\Psi'(x_0)$$

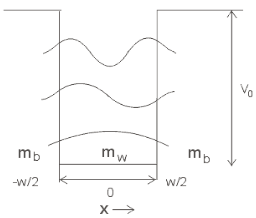
- מהפעלת 4 תנאי השפה נקבל (תחת הנחה כי $\rho x_0\gg 1$) :

$$4ik\rho A=\left[(\rho+ik)^2\cancel{e^{-\rho x_0}}-(\rho-ik)^2e^{\rho x_0}\right]\cdot Ee^{ikx_0}$$

- מקדם ההעברה: $T=\frac{j_T}{j_I}=\left|\frac{E}{A}\right|^2=\frac{16E(V_0-E)}{V_0^2}e^{-2\rho x_0}$

✓ מגדיר $\delta=1/2\rho$ מרחק שהסיכוי מעבר אחריו קטן פי e :

$$\delta=\frac{1}{2\rho}=\left[\frac{\hbar^2}{8M(V_0-E)}\right]^{1/2}\approx 1\overset{0}{A}\left(\frac{m_e}{M}\frac{1eV}{V_0-E}\right)^{1/2}\approx 1\overset{0}{A}$$



<u>בור פוטנציאל סימטרי סופי</u> $E<V_0$

- נחפש פתרונות זוגיים מהצורה:

$$\Psi(x)=\begin{cases}A\cos(kx) & , |x|<a \\ Be^{-\rho|x|} & , |x|\geq a\end{cases}$$

- ת"ש דורשים רציפות הפונק' ונגזרתה בנקודה $x=a$:

$$Ae^{-\rho a}=B\cos(ka) \quad ; \quad A\rho e^{-\rho a}=Bk\sin(ka)$$

- ע"מ לקבל פתרונות לא טריויאליים נדרוש התאפסות הדטרמיננט של המערכת : $\begin{pmatrix}e^{-\rho a} & -\cos(ka) \\ \rho e^{-\rho a} & k\sin(ka)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A \\ B\end{pmatrix}=0$

נקבל לכן: $-e^{-\rho a}k\sin(ka)+\rho e^{-\rho a}\cos(ka)=0$

ומכאן: $\frac{\rho}{k}=\frac{\sqrt{k_0^2-k^2}}{k}=tg(ka)$: $k_0^2\triangleq k^2+\rho^2=\frac{2MV_0}{\hbar^2}$

✓ פתרון המשוואה שקיבלו הינו גרפי בלבד – קוונטיזיציה של k

במינהור עבור $E>V_0$ נקבל עבור ההצבה $iq=\rho$:

$$T=\frac{1}{\cos^2(x_0q)+\left(\frac{k^2+q^2}{2kq}\right)\sin^2(x_0q)}$$

$$T_{\max}=\frac{4E(E-V)}{4E(E-V)+V^2}$$

תרגול 4 – חבילת גלים א"מ ללא דיספרסיה:

<u>תרגיל:</u> נתונה פונק' הגל המישור התנע $G(k-k_0)$ עבור גל א"ם בואקום. תארו התפתחות בזמן של פונק' הגל בעזרת התמרת פורייה.

$$\Psi(x,t)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int G(k-k_0)e^{i(kx-\omega t)}dk= \quad , \quad \omega=kc$$

$$=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int\left(G(k-k_0)e^{-i(ct)k}\right)e^{ikx}dk=$$

$$=F^{-1}\left\{G(k-k_0)e^{-i(ct)k}\right\}=g(x-ct)e^{ik_0(x-ct)}$$

גאוסיאן: $F\left\{e^{-\alpha^2k^2}\right\}=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int e^{-\alpha^2k^2}e^{ikx}dk=...=\frac{1}{\alpha\sqrt{2}}e^{-\left(\frac{x}{2\alpha}\right)^2}$

תרגול 5 – ערכי תצפית ואופרטורים:

- <u>משפט השלמות:</u> כל פונקצית גל ניתן לרשום כסכום של פונציות עצמיות של אופרטור הרמיטי.

❖ למשל אם ניקח את אופרטור התנע: $p=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ ופ"ע e^{ikx}

אז $\Psi(x)=\int_{-\infty}^{\infty}G_k e^{ikx}$

❖ <u>תרגיל 1</u>:נוכיח כי <u>במצב קשור</u> התנע פרופורציונית לערך התצפית של האנרגיה הקינטית. $Var(p)=\langle p^2\rangle-\underbrace{\cancel{\langle p\rangle^2}}_{\text{bound state}}=2M\langle\mathcal{E}\rangle$

❖ <u>תרגיל 2</u>: הוכח כי עבור חבילת גלים גאוסית המקיימת $G_k=\exp\left[-\left(\frac{k-k_0}{2\Delta k}\right)^2\right]$ ערך התצפית של התנע הוא $\langle p\rangle=\hbar k_0$

פתרון: $\Psi_x=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}G_k\exp(ikx)dk$

$$\langle\hat p\rangle=\int\Psi_x^*\hat p\Psi_x dx=\int dx\left(\int G_k^*e^{-ikx}dk\right)\left(-i\hbar\tfrac{\partial}{\partial x}\right)\left(\int G_{k'}e^{ik'x}dk'\right)$$

$$=\int dk\int dk' G_k^*G_{k'}\int e^{-ikx}(-i\hbar\cdot ik')e^{ik'x}dx=$$

$$=\int dk\int dk' G_k^*G_{k'}(\hbar k')\underbrace{\int e^{-i(k-k')x}dx}_{\delta(k-k')}=\int dk|G_k|^2(\hbar k)$$

$$=\int\exp\left(-2\left(\frac{k-k_0}{2\Delta k}\right)^2\right)\hbar k\cdot dk\underset{\substack{\tilde k\triangleq k-k_0\\ d\tilde k=dk}}{=}$$

$$=\hbar\int\left(\tilde k+k_0\right)\exp\left[-2\left(\frac{\tilde k^2}{2\Delta k}\right)^2\right]d\tilde k=$$

$$=\underbrace{\cancel{\hbar\int\tilde k\exp\left[-2\left(\frac{\tilde k^2}{2\Delta k}\right)^2\right]d\tilde k}}_{even\,\bullet\,odd\ function}+\underbrace{\hbar k_0\int\exp\left[-2\left(\frac{\tilde k^2}{2\Delta k}\right)^2\right]d\tilde k}_{=1\text{ as gausian normalization}}$$

$$=\hbar k_0$$

תרגול 6 - אופרטורים הרמיטיים

<u>תרגיל 1</u>: אם $\hat A$ אופרטור המתאר מדיד פיזיקאלי, הע"ע שלו חייבים להיות ממשיים ולכן $\langle A\rangle$ ממשי, כלומק $\langle A\rangle^*=\langle A\rangle$.

מה ניתן להסיק מכך על הביטוי $\left\langle f\middle|\hat A\middle|g\right\rangle$?

<u>פתרון:</u> $\langle A\rangle$ ממשי לכן $\left\langle h\middle|\hat A\middle|h\right\rangle$ ממשי. נציב $h=f+\lambda g$, $\lambda\in\mathbb{C}$

$$\Rightarrow 0=\mathrm{Im}\left\{\left\langle h\middle|\hat A\middle|h\right\rangle\right\}=\mathrm{Im}\left\{\left\langle f+\lambda g\middle|\hat A\middle|f+\lambda g\right\rangle\right\}=$$

$$=\mathrm{Im}\left\{\underbrace{\left\langle f\middle|\hat A\middle|f\right\rangle}_{\text{Real}}+\lambda\underbrace{\left\langle f\middle|\hat A\middle|g\right\rangle}_{\triangleq a_1+ib_1}+\lambda^*\underbrace{\left\langle g\middle|\hat A\middle|f\right\rangle}_{\triangleq a_2+ib_2}+\lambda\lambda^*\underbrace{\left\langle g\middle|\hat A\middle|g\right\rangle}_{\text{Real}}\right\}=$$

עבור $\lambda=1$: $0=\mathrm{Im}\{a_1+ib_1+a_2+ib_2\}\Rightarrow b_1=-b_2$

עבור $\lambda=i$: $0=\mathrm{Im}\{ia_1-b_1-ia_2+b_2\}\Rightarrow a_1=a_2$

$$\Rightarrow 0=\langle f|A|g\rangle=\langle g|A|f\rangle^*\Rightarrow\boxed{\langle f|Ag\rangle=\langle Af|g\rangle}$$

וזוהי תכונת ההרמיטיות.

<u>תרגיל 2</u>: הוכח כי אופרטור התנע הוא הרמיטי בהצגת המקום.

נזכיר כי $\hat p_x=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ וכעת ע"י אינטגרציה בחלקים $\langle\Phi|\hat p\Psi\rangle=$

$$=\int\Phi^*(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi(x)dx=\underbrace{\cancel{-i\hbar\Phi^*\Psi\Big|_{-\infty}^{\infty}}}_{\text{bounded state}}+i\hbar\int\frac{\partial\Phi^*}{\partial x}\cdot\Psi dx=$$

$$=\int\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\Phi(x)\right)^*\cdot\Psi(x)dx=\langle\hat p\Phi|\Psi\rangle$$

<u>תרגיל 3</u>: אם $\hat A$ הרמיטי , מה זה אומר על מטריצה A_{ij}?

ידוע כבר מקודם כי: $\left\langle f\middle|\hat Ag\right\rangle=\left\langle\hat Af\middle|g\right\rangle$ נחקור את הביטוי $\left\langle f\middle|\hat A\middle|g\right\rangle$ בכתיב מטריצי: נזכיר כי $\langle f|=\left(|f\rangle^T\right)^*$

וכעת לכל אופרטור (גם לא הרמיטי): $\left\langle f\middle|\hat A\middle|g\right\rangle=\left\langle f\middle|\hat Ag\right\rangle=$

$$=f^{T*}\cdot\left(\hat Ag\right)=g^TA^T\cdot f^*=\left(g^{T*}A^{T*}f\right)^*=\left\langle g\middle|\hat A^{T*}\middle|f\right\rangle^*$$

ואם נשתמש בהרמיטיות:

$$\begin{cases}\left\langle f\middle|\hat Ag\right\rangle=\left\langle\hat Af\middle|g\right\rangle=\left\langle g\middle|\hat A\middle|f\right\rangle^*\\ \left\langle f\middle|\hat Ag\right\rangle=\left\langle g\middle|\hat A^{T*}\middle|f\right\rangle^*\end{cases}$$

ולכן קיבלנו: $\boxed{\hat A=\hat A^{T*}}$ שוב את תכונת ההרמיטיות $\left(A_{ij}=A_{ji}^*\right)$

תרגול 7 - יחסי חילוף, תלות זמנית של ערך התצפית ומשפטים שונים

תרגיל 1: חישוב יחסי חילוף מיקום – תנע:

❖ חישוב יחס החילוף נעשה בד"כ ע"י הכפלה ב- Ψ והפעלת אופרטורים עליה בזה אחר זה. לדוגמא: חישוב היחס $\left[\hat{p}_x^2,\hat{x}\right]$:

$$\left[\hat{p}_x^2,\hat{x}\right]\Psi=\left(-i\hbar\right)^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(x\Psi\right)-x\left(-i\hbar\right)^2\frac{\partial^2}{\partial x^2}\left(\Psi\right)=$$

$$=\ldots=-2i\hbar\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\right)\Psi=-2i\hbar p_x\Psi\Rightarrow\boxed{\left[\hat{p}_x^2,\hat{x}\right]=-2i\hbar p_x}$$

❖ $$\left[f\left(r\right),\hat{p}_u\right]=+i\hbar\left(\frac{\partial f}{\partial u}\right),\left[g\left(p\right),\hat{u}\right]=-i\hbar\left(\frac{\partial g}{\partial p_u}\right)$$

❖ יחסי החילוף בין תנע ומיקום: $\boxed{\left[\hat{r},\hat{p}\right]=\hat{r}_u\hat{p}_v-\hat{p}_v\hat{r}_u=i\hbar\delta_{u,v}}$

תרגיל 2: חשב את התלות הזמנית של ערך תצפית המיקום – המהירות.

$$\langle v\rangle=\frac{d}{dt}\langle r\rangle=\frac{i}{\hbar}\left\langle\Psi\left|\left[\hat{H},\hat{r}\right]\Psi\right.\right\rangle=\frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\hat{H},\hat{r}\right]\right\rangle$$

$$\Rightarrow\langle v_x\rangle=\frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\hat{H},\hat{x}\right]\right\rangle$$

$$\hat{H}=\frac{1}{2M}\left(p_x^2+p_y^2+p_z^2\right)+V\Rightarrow\frac{i}{\hbar}\left\langle\left[\hat{H},x\right]\right\rangle=\frac{1}{2M}\left[p_x^2,x\right]$$

השתנות איטית :

$$\Rightarrow\langle v_x\rangle=\frac{1}{M}\langle p_x\rangle=\frac{1}{M}\int\Psi^*p_x\Psi dx=\frac{p_x}{M}$$

תרגיל 3: משפט ארנסט (חוק II של ניטון)

$$\underbrace{m\cdot\frac{d^2}{dt^2}\langle r\rangle}_{a}=-\underbrace{\langle\nabla V\rangle}_{F}$$

הוכחה:

$$\left[V,p_x\right]\Psi=-i\hbar\left(V\frac{\partial}{\partial x}-\frac{\partial}{\partial x}V\right)\Psi=\ldots=i\hbar\frac{\partial V}{\partial x}\Psi$$

$$\Rightarrow m\cdot\frac{d^2}{dt^2}\langle r\rangle=\frac{d}{dt}\langle p_x\rangle=\frac{i}{\hbar}\langle[H,p_x]\rangle=\frac{i}{\hbar}\langle[V,p_x]\rangle=-\frac{\partial V}{\partial x}$$

תרגול 11- אלקטרון בפוטנציאל מחזורי

תרגיל 1:

נניח נתון פוטנציאל מחזורי מהצורה: $U\left(x\right)=\sum_{n=-\infty}^{\infty}v\left(x-na\right)$

כאשר v - פונקציה רציפה השווה לאפס מחוץ לתחום $\left(-\frac{1}{2}a,\frac{1}{2}a\right)$ ובתחום זה גדולהמאפס ומקיימת $v\left(x\right)=v\left(-x\right)$.

מהן האנרגיות המותרות לקיום מצבי אלקטרון בפוטנציאל זה.

פתרון: נניח כי האלקטרון מגיע משמאל אזי : $\Psi_l=\begin{cases}e^{ikx}+re^{-ikx}\\ te^{ikx}\end{cases}$

ואם הא לקטרון מגיע מימין אזי : $\Psi_r=\begin{cases}te^{ikx}\\ e^{-ikx}+re^{ikx}\end{cases}$

הפתרון הכללי היותר נתון לכן ע"י: $\Psi=A\Psi_r+B\Psi_l$

הערה: מעתה k יציין אנרגיה (כי $\left(\mathcal{E}\left(k\right)=\frac{\hbar^2k^2}{2m}\right.$ ו- q - תנע גבישי.

עפ"י בלוך נדרוש :

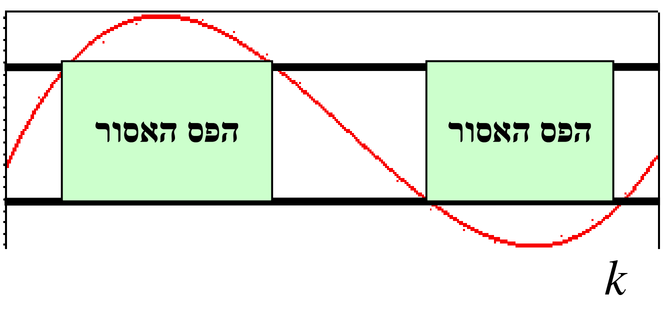
$$\Psi\left(x+a\right)=e^{iqa}\Psi\left(x\right)$$
$$\Psi'\left(x+a\right)=e^{iqa}\Psi'\left(x\right)$$

נבחר להשתמש בנקודה $x=\frac{a}{2}$ ולכן :

$$\begin{pmatrix}\Psi_l\left(\frac{a}{2}\right)-e^{iqa}\Psi_l\left(-\frac{a}{2}\right) & \Psi_r\left(\frac{a}{2}\right)-e^{iqa}\Psi_r\left(-\frac{a}{2}\right)\\ \Psi_l'\left(\frac{a}{2}\right)-e^{iqa}\Psi_l'\left(-\frac{a}{2}\right) & \Psi_r'\left(\frac{a}{2}\right)-e^{iqa}\Psi_r'\left(-\frac{a}{2}\right)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}A\\ B\end{pmatrix}=0$$

ע"מ לקבל פתרון לא טריויאלי נדרוש $\det=0$ ונקבל:

$$\underbrace{\cos\left(qa\right)}_{\le1}=\underbrace{\frac{1}{|t|}}_{\ge1}\underbrace{\cos\left(ka+\delta\right)}_{\le1}\triangleq f\left(k\right)\quad,\quad t=|t|e^{i\delta}$$



תרגול 12- אלקטרון בפוטנציאל מחזורי של רכבת הלמים

נספח מתמטי:

- קירוב סטרלינג:

$$N!\cong(2\pi N)^{1/2}N^N e^{-N} \;\Rightarrow\; \ln N!\cong N\ln N-N$$

- וורונסיאן (Weronskian) של פונקציה גזירה :

$$W\equiv\begin{vmatrix}\Psi_1 & \Psi_2\\ \Psi_1' & \Psi_2'\end{vmatrix}=\Psi_1\Psi_2'-\Psi_2\Psi_1'$$

עבור שתי פונקציות בת"ל <u>עם אותה אנרגיה</u> הוורונסיאן איננו מתאפס באף נקודה.

- לפלסיאן:

$$\nabla^2=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

- אינטגרל על גאוסיאן:

$$\int_{-\infty}^{\infty}e^{-\alpha^2(x+\beta)^2}dx=\frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}$$

- התמרות פורייה של גאוסיאן:

$$F\left\{e^{-\alpha^2k^2}\right\}=\frac{1}{\alpha\sqrt{2}}\cdot e^{-\frac{x^2}{4\alpha^2}}\;;\; F^{-1}\left\{e^{-\frac{x^2}{4\alpha^2}}\right\}=\alpha\sqrt{2}\cdot e^{-\alpha^2k^2}$$

- <u>זהויות וקטוריות:</u>

$$(\vec a\times\vec b)\cdot(\vec c\times\vec d)=(\vec a\cdot\vec c)\cdot(\vec b\cdot\vec d)-(\vec a\cdot\vec d)\cdot(\vec b\cdot\vec c)$$

$$\vec a\times\vec b\times\vec c=\vec b\cdot(\vec a\cdot\vec c)-\vec c\cdot(\vec a\cdot\vec b)$$

- שטח אליפסה בעלת צירים a,b: $S=\pi ab$

- נפח אליפסואיד בעל צירים $\frac{\sqrt{2m_xE}}{\hbar},\frac{\sqrt{2m_yE}}{\hbar},\frac{\sqrt{2m_zE}}{\hbar}$:

$$V=\frac{4}{3}\pi\frac{\sqrt{8m_xm_ym_zE^3}}{\hbar^3}$$

<u>רוחב ההתפלגות:</u>

הרוחב מאופיין את השונות (Variance) :

$$(\Delta A)^2=\left\langle\left(A-\langle A\rangle\right)^2\right\rangle=\left\langle A^2\right\rangle-\langle A\rangle^2$$

הרוחב האמיתי של הגאוסיאן של ההתפלגות הינו פעמיים סטיית תקן (STDV) : $2(\Delta A)$

דוגמה: השונות של התנע -

$$(\Delta p)^2=\left\langle\left(p-\langle p\rangle\right)^2\right\rangle=\left\langle p^2\right\rangle-\langle p\rangle^2=2M\left\langle\mathcal{E}_{kin}\right\rangle-\langle p\rangle^2$$

- **<u>חוק II של ניוטון:</u>** $\vec F=-e\vec E=m\vec a \qquad (q=-e)$

- **<u>מודל דרודה:</u>**

משוואת הזרם: $\vec j=\sigma\vec E=-ne\vec v$

מהירות ממוצעת: $\langle\vec v\rangle=\langle\vec v_0+a t\rangle=\underbrace{\langle\vec v_0\rangle}_{=0}+a\tau=-\frac{e\vec E}{m}\tau$

ניידות: $\langle\vec v\rangle=-\mu E \quad , \quad \mu=\frac{q\tau}{m^*}$

מוליכות: $\sigma=\frac{ne^2\tau}{m}$

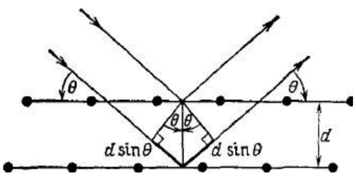
(המוליכות גדלה עם הטמפ' עבור מל"מ וקטנה עבור מתכת)

זמן רלקסציה (בין התנגשויות):

d - מרחק בין אטומי החומר $\qquad \tau=\frac{d}{v_{thermic}}$

מהירות תרמית: $E=\frac{m^*v_{th}^2}{2}=\frac{3}{2}k_BT \;\Rightarrow\; v_{thermic}=\sqrt{\frac{3k_BT}{m^*}}$

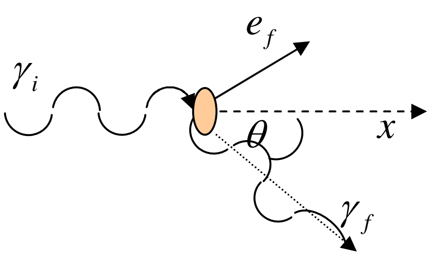
- **<u>פיזור בראג:</u>** $\text{n}\lambda=2\text{d}\sin\theta$



n - סדר הפיזור.
λ - אורך הגל של הקרן הפוגעת.
d - מרחק בין מישורים.
θ - זווית הפיזור.

- **<u>פיזור קומפטון:</u>** $(*) \quad \Delta\lambda=2\lambda_C\sin^2\frac{\theta}{2}\;;\;\lambda_C=\frac{2\pi\hbar}{m_ec}$

תנע : $p=\frac{h\nu}{c}$



משימור תנע : $p_{e,f}^2=\left(\frac{h\nu_i}{c}\right)^2+\left(\frac{h\nu_f}{c}\right)^2-2\frac{h\nu_i}{c}\frac{h\nu_f}{c}\cos\theta$

משימור אנרגיה : $p_{e,f}^2=\frac{\left(h\nu_i-h\nu_f+m_ec^2\right)^2-m_e^2c^4}{c^2}$

מכאו ואחרי חישוב נקבל את (*)

דוגמה לחישוב יחסי חילוף מטריציים:

אופרטור המיקום הינו למעשה אופרטור הדגימה במרווחי מקום Δx. המטריצה אלכסונית ממשית, לכן הרמיטית:

בהצגת המקום :
$$\hat{r}=x\xrightarrow[matrix]{}\hat{r}=\Delta x\begin{pmatrix}1 & & & & 0\\ & 2 & & & \\ & & 3 & & \\ & & & \ddots & \\ 0 & & & & N\end{pmatrix}=\underline{\underline{R}}_{N\times N}\Delta x\ \Rightarrow\ \hat{r}\Psi=\begin{pmatrix}\Delta x\Psi\\ 2\Delta x\Psi\\ 3\Delta x\Psi\\ \vdots\\ N\Delta x\Psi\end{pmatrix}$$

אופרטור התנע מבוטא באמצעות מטריצת הנגזרת ההרמיטית:

$$\hat{p}=-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\xrightarrow[matrix]{}\hat{p}=-\frac{\hbar}{2\Delta x}\begin{pmatrix}0 & i & 0 & \cdots & 0\\ -i & 0 & i & \cdots & \vdots\\ 0 & -i & 0 & \cdots & \vdots\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & i\\ 0 & 0 & 0 & -i & 0\end{pmatrix}=-\frac{i\hbar}{2\Delta x}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0 & \cdots & 0\\ -1 & 0 & 1 & \cdots & \vdots\\ 0 & -1 & 0 & \cdots & \vdots\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 1\\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0\end{pmatrix}\triangleq-\frac{i\hbar}{2\Delta x}\underline{\underline{D}}$$

$$\left[\hat{r},\hat{p}\right]=\Delta x\underline{\underline{R}}\cdot\left(-\frac{i\hbar}{2\Delta x}\underline{\underline{D}}\right)-\left(-\frac{i\hbar}{2\Delta x}\underline{\underline{D}}\cdot\Delta x\underline{\underline{R}}\right)=-\frac{i\hbar}{2}\underline{\underline{R}}\cdot\underline{\underline{D}}+\frac{i\hbar}{2}\underline{\underline{D}}\cdot\underline{\underline{R}}=-\frac{i\hbar}{2}\left(\underline{\underline{R}}\cdot\underline{\underline{D}}-\underline{\underline{D}}\cdot\underline{\underline{R}}\right)=$$

$$=-\frac{i\hbar}{2}\begin{pmatrix}0 & -1 & 0 & \cdots & 0\\ -1 & 0 & -1 & \cdots & \vdots\\ 0 & -1 & 0 & \cdots & \vdots\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & -1\\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0\end{pmatrix}=i\hbar\frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 1 & 0 & \cdots & 0\\ 1 & 0 & 1 & \cdots & \vdots\\ 0 & 1 & 0 & \cdots & \vdots\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 1\\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0\end{pmatrix}\triangleq i\hbar\underline{\underline{B}}_{N\times N}$$

$\underline{\underline{B}}_{N\times N}$ - מבטאת את הגודל הממוצע, אך פונקצית הגל רציפה, לכן הממוצע מתכנס לערך הפונקציה בנקודת הביניים

לכן : $\underline{\underline{B}}_{N\times N}\Psi=\Psi$, כלומר קיבלנו את יחס החילוף המוכר לנו: $\left[\hat{r},\hat{p}\right]=i\hbar$

<u>רשימת דוגמאות ובעיות בספר:</u>

- פיזור קומפטון של אלקטרון ע"י פוטון - ע"מ 10 – פרק (1•1)
- צפיפות פוטונים באלומת אור: $N_\lambda = \left(u/\hbar\omega\right)\lambda^3 = S\lambda^4/2\pi\hbar c^2 \sim 2\cdot 10^{-6}$ - ע"מ 18 - פרק (1•2)
- החזרה ע"י קיר פוטנציאל אינסופי הנע עפ"י $x_0 = v_0 t$ - <u>פתרון</u> פונקצית גל במרחב – ע"מ 27 – פרק (1•3)
- אנרגיה פוטנציאלית של אוסילטור הרמוני – ע"מ 30 – פרק (1•3)

  <u>להוכיח</u> כי עבור $V(x) = \frac{1}{2}M\omega^2 x^2$ מקבלים $\left|\Psi(x,t)\right|^2 \propto \exp\left[-\frac{M\omega}{\hbar}\left(x - a\cdot\sin\omega t\right)^2\right]$
- פתרון של מעבר של פונקצית גל דרך מחסום פוטנציאל סופי, מקדם העברה/ החזרה – ע"מ 33 – פרק (1•4).

  נתון $V(x) = \begin{cases} 0 & x<0 \\ V_0 & x>0 \end{cases}$ כאשר $\mathcal{E} > V_0$

  מקדם החזרה : $R = -\frac{j_R}{j_I} = \left|\frac{B}{A}\right|^2 = \left|\frac{k-k'}{k+k'}\right|^2$; מקדם העברה : $T = \frac{j_T}{j_I} = \frac{k'}{k}\left|\frac{C}{A}\right|^2 = \frac{4kk'}{\left(k+k'\right)^2} = 1 - R$
- פתרון של מעבר של פונקצית גל דרך מדרגת פוטנציאל סופית, מקדם העברה/ החזרה – ע"מ 36 – פרק (1•4).

  נתון $V(x) = \begin{cases} V_0 & 0<x<w \\ 0 & else \end{cases}$ כאשר $\mathcal{E} < V_0$
- פתרון מלא של בעיית בור פוטנציאל אינסופי חד-מימדי - ע"מ 54 – פרק (2•2)
- פתרון מלא של בעיית בור פוטנציאל אינסופי תלת-מימדי - ע"מ 57 – פרק (2•2)
- צפיפות מצבים קוונטיים עבור בור פוטנציאל אינסופי תלת-מימדי - ע"מ 59 – פרק (2•2)
- פתרון מלא של בעיית בור פוטנציאל סופי חד-מימדי - ע"מ 60 – פרק (2•2)
- יחסי חילוף בין פונקציה לאופרטור התנע והמיקום (להוכיח את התשובה הסופית) - ע"מ 197 – פרק (7•3)

- <u>מספר פוטונים (של אור שמש) שיש בקובייה שצלעה שווה לאורך הגל של הפוטונים</u>: $N_\lambda = \frac{I}{hc\nu}\lambda^3 \sim 10^{-5}$
  - ✓ מסקנה: מכיוון שמספרם זניח, הפוטון מתאבך עם עצמו.