

**הגדרה של סריג:**

(1) אוסף אינסופי מסודר ומחזורי של נקודות שכל תכונותיו אינן תלויות בנקודה עליו בה נמצאים.

(2) אוסף הנקודות המוגדרות (יחסית לאחת מהן) ע"י אוסף הוקטורים

$$\left\{ \vec{T} \mid \vec{T} = \sum_{i=1}^d n_i \vec{a}_i, n_i \in \mathbb{Z}, \{a_i\}_{i=1}^d \text{span } \mathbb{R}^d \right\}$$

כאשר  $d$  מציין את מספר המימד  $i$  הבעיה (1, 2, או 3).

**• כאשר הבסיס מכיל אטום אחד הסריג נקרא סריג Bravais.**

**וקטורים פרימיטיביים:**  $\{a_i\}_{i=1}^d$  שלישית הוקטורים בעלי הנפח הקטן ביותר.

**תא יחידה:** קבוצת נקודות המכילה נקודת סריג ונקודות שאינן נקודות סריג שבחזרה עליה ניתן לבנות את השריג כולו, ללא רווחים וללא חפיפות.

**תא ויגנר-זייטס (Wigner-Seitz):** נעביר קווים מהאטום המרכזי אל שכניו ונבנה אנכים אמצעיים לקווים אלו, השטח הכלוא הוא תא ויגנר-זייטס והוא תא היחידה הקטן ביותר.

**חלוקת הסריגים השונים לקבוצות:**

**2D - יש חמישה סוגי סימטריה (סיבוב):**  $\frac{2\pi}{1}, \frac{2\pi}{2}, \frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{4}, \frac{2\pi}{6}$

**2D - חמישה סריגים שונים:**

(1) כללי  $\alpha \neq 90^\circ, |\vec{a}_1| \neq |\vec{a}_2|$

(2) ריבוע  $\alpha = 90^\circ, |\vec{a}_1| = |\vec{a}_2|$  בעל סימטריה סיבוב מסדר 4.

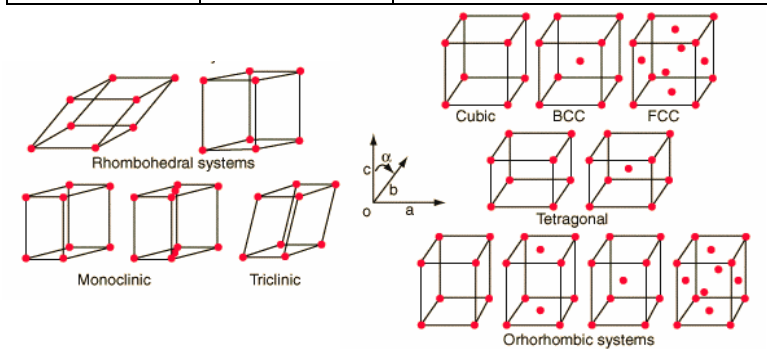
(3) הקסגונאלי  $\alpha = 120^\circ, |\vec{a}_1| \neq |\vec{a}_2|$  בעל סימטריה סיבוב מסדר 3 ו-6.

(4) מלבני  $\alpha = 90^\circ, |\vec{a}_1| \neq |\vec{a}_2|$  בעל סימטריה סיבוב מסדר 2.

(5) מלבני ממורכז - זהה למלבני אך הבסיס בעל שני אטומים.

**3D - סוגי הסריגים ניתנים על ידי החלוקה הבאה**

שם לועזי	מספר (תתי קבוצות)	מגבלות צירים וזוויות
Triclinic	1	$ \vec{a}_1  \neq  \vec{a}_2  \neq  \vec{a}_3 , \alpha \neq \beta \neq \gamma$
Monoclinic	2	$ \vec{a}_1  \neq  \vec{a}_2  \neq  \vec{a}_3 , \alpha = \beta = 90^\circ \neq \gamma$
Orthorhombic	4	$ \vec{a}_1  \neq  \vec{a}_2  \neq  \vec{a}_3 , \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Tetragonal	2	$ \vec{a}_1  =  \vec{a}_2  \neq  \vec{a}_3 , \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Cubic	3 SC, BCC, FCC	$ \vec{a}_1  =  \vec{a}_2  =  \vec{a}_3 , \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Trigonal	1	$ \vec{a}_1  =  \vec{a}_2  =  \vec{a}_3 , \alpha = \beta = \gamma < 120^\circ \neq 90^\circ$
Hexagonal	1	$ \vec{a}_1  =  \vec{a}_2  =  \vec{a}_3 , \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ$



**וקטורים פרימיטיביים של קבוצת הסריגים הקובית**

Face Centered Cubic	Body Centered Cubic	Simple Cube
$\vec{a}_1 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y})$	$\vec{a}_1 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{y} - \hat{z})$	$\vec{a}_1 = a\hat{x}$
$\vec{a}_2 = \frac{1}{2}a(\hat{y} + \hat{z})$	$\vec{a}_2 = \frac{1}{2}a(-\hat{x} + \hat{y} + \hat{z})$	$\vec{a}_2 = a\hat{y}$
$\vec{a}_3 = \frac{1}{2}a(\hat{x} + \hat{z})$	$\vec{a}_3 = \frac{1}{2}a(\hat{x} - \hat{y} + \hat{z})$	$\vec{a}_3 = a\hat{z}$
<b>בכל תא 4 אטומים</b>	<b>בכל תא 2 אטומים</b>	<b>אטום אחד בתא</b>
$V_{FCC} = \frac{a^3}{4}$ בעל נפח	$V_{BCC} = \frac{a^3}{2}$ בעל נפח	$V_{SC} = a^3$ בעל נפח
<b>הסריג ההופכי הוא BCC</b> $a \rightarrow 4\pi/a$	<b>הסריג ההופכי הוא FCC</b> $a \rightarrow 4\pi/a$	<b>הסריג ההופכי</b> $a \rightarrow 2\pi/a$

**סריג הופכי במרחב k - אנליזה פורייה**

כל סריג מחזורי ניתן לתאר אותו על ידי טור פורייה:  $n(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}$

נדרוש:  $n(\vec{r}) = n(\vec{r} + \vec{T})$  ונקבל:  $e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} = 1$  כלומר  $\vec{G}\cdot\vec{r} = 2\pi N$

**הגדרה:**  $\vec{A} = 2\pi \frac{\vec{b} \times \vec{c}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$   $\vec{B} = 2\pi \frac{\vec{c} \times \vec{a}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$   $\vec{C} = 2\pi \frac{\vec{a} \times \vec{b}}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$

**תכונות:**  $\vec{A} \cdot \vec{a} = 2\pi$   $\vec{B} \cdot \vec{b} = 2\pi$   $\vec{C} \cdot \vec{c} = 2\pi$

• כאשר  $\vec{A}, \vec{B}, \vec{C}$  מגדירים תא יחידה פרימיטיבי במרחב ההופכי.

• וקטורי הבסיס לא מופיעים בשריג ההופכי (אין להם משמעות שם).

• כל וקטור במרחב ההופכי הוא מהצורה  $\vec{G} = h\vec{A} + k\vec{B} + l\vec{C}$

כך ש-  $h, k, l \in \mathbb{Z}$  ומתקיים  $\vec{G} \cdot \vec{T} = 2\pi N$   $N \in \mathbb{Z}$

**תכונות הסריג ההופכי:**

(I) כל וקטור  $\vec{G}$  בסריג ההופכי ניצב לקבוצת מישורים בסריג המקורי.

$$(u, v, w) \text{ כל הנקודות } \vec{G} \cdot \vec{T} = 2\pi(hu + kv + lw) = 2\pi N$$

המקיימות את השוויון  $2\pi N$  נמצאות על מישור אחד.

(II) אם ל-  $(h, k, l)$  מכה משותף  $n$  אז המרחק בין מישורים מקבילים

$$d_{(hkl)} = \frac{2\pi}{|\vec{G}|} n \text{ הוא המקורי}$$

• **אינדקסי מילר** -  $(h, k, l)$  מגדירים מישורים בסריג המקורי.

(III) נפח תא היחידה בסריג ההופכי  $V = \vec{A} \cdot (\vec{B} \times \vec{C}) = \frac{8\pi^3}{\vec{a} \cdot (\vec{b} \times \vec{c})}$

(IV) הסריג ההופכי של הסריג ההופכי הוא הסריג המקורי.

(V) **איזור ברוליאן הראשון** - תא היחידה בשיטת ויגנר זייטס בסריג ההופכי.

**משפחת מישורים** - כל המישורים בעלי אותו מרחק אחד מהשני.

**אוסף מישורים** - כל המישורים בעלי אותו מרחק אחד מהשני ואותו נורמל.

**עקיפה (פיזור) מסריגים**

• הפיזיקה נכונה לפיזור של חלקיקים בעלי אורך גל בסדר גודל קבוע הסריג.

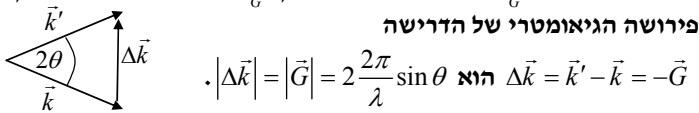
• שלוש שיטות פיזור: אלומה לא מונוכרומטית, גביש מסתובב, ואבקה שנורת עליה קרן מונוכרומטית.

• **הנחה:** הפיזור אלסטי  $|\vec{k}| = |\vec{k}'|$

**הסיכוי שחלקיק עם מספר קוונטי k יתפזר ל- k':**

$$P = |M|^2 = \left| \langle \Psi_{\vec{k}'}(\vec{r}) | n(\vec{r}) | \Psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \rangle \right|^2 = \left| \int \frac{e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}} n(\vec{r}) \frac{e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}} d^3r \right|^2$$

$$M = \frac{1}{V} \int n(\vec{r}) e^{i(\vec{k}' - \vec{k})\cdot\vec{r}} d^3r = \sum_{\vec{G}} \frac{n_{\vec{G}}}{V} \int e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} e^{i(\vec{k}' - \vec{k})\cdot\vec{r}} d^3r = \sum_{\vec{G}} n_{\vec{G}} \delta(\vec{G} + \vec{k}' - \vec{k})$$



**הצהרות שונות לפיזור בראג:**  $2\vec{k} \cdot \vec{G} = G^2$   $\Delta\vec{k} = \vec{G}$   $2d \sin \theta = n\lambda$

• נקודה בשריג ההופכי שנמצאת על מישור בראג מקיימת התנאים לעיל.

**תנאי Laue לפיזור:**  $\vec{a} \cdot \Delta\vec{k} = 2\pi h$   $\vec{b} \cdot \Delta\vec{k} = 2\pi k$   $\vec{c} \cdot \Delta\vec{k} = 2\pi l$

**גורם המבנה של תא היחידה עם בסיס**

• הסיכוי לפיזור:  $S_{\vec{G}} = \int_V n(\vec{r}) e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} d^3r = N \int_{\text{Single Cell}} n(\vec{r}) e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} d^3r$

כאשר  $S$  קובע כמה פיזור יהיה בגביש,  $N$  - מספר תאי היחידה בגביש.

• את הבסיס ניתן לתאר כאוסף נקודות:  $n(\vec{r}) = \sum_j n_j (\vec{r} - \vec{r}_j)$

$$\frac{S_{\vec{G}}}{N} = \int \sum_j n_j (\vec{r} - \vec{r}_j) e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} d^3r = \sum_j e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_j} \int n_j(\vec{\rho}) e^{-i\vec{G}\cdot\vec{\rho}} d^3\rho$$

**גורם הצורה האטומית:**  $f_j(\vec{G}) = \int_{\text{Cell}} n_j(\vec{\rho}) e^{-i\vec{G}\cdot\vec{\rho}} d^3\rho = -\frac{1}{e} \int_{\text{Cell}} \rho_j(\vec{r}) e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} d^3r$

**אמפליטודת הפיזור הכללית (תא יחידה):**  $S_{\vec{G}} = \sum_j f_j e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}_j}$

**עוצמת הפיזור:**  $I \propto \sum_{\vec{G}} |S_{\vec{G}}|^2$

• **לשים לב!** העוצמה הוא סכום העוצמות מהמישורים השונים עם אותו  $\vec{G}$

• **לשים לב!** גם אם תנאי Laue מתקיים  $S_{\vec{G}}$  יכול להתאפס (אם יש בסיס).

**קיבול חום ואנרגיות של פונונים**

**קיבול חום:**  $C_V = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T}$

**אנרגיית הפונונים (באנלוג מוחלט לפוטונים, פיתוח קוונטי):**

$$E = \sum_{\vec{k}} \left( n_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} \hbar \omega_{\vec{k}} + \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{\vec{k}} \hbar \omega_{\vec{k}}}_{E_0} \quad (\text{אנרגיית יסוד})$$

$n_{\vec{k}}$  - מספר הפונונים לכל מספר גל  $\vec{k}$ .

**הגדרה:**  $E_0$  - נקודת הייחוס לכן האנרגיה של פונונים:

**נוסחה לבניית פונון עבור גלים עומדים:**  $n_{\vec{k}} = \frac{1}{4} \frac{\rho V u_0^2 \omega_{\vec{k}}}{\hbar} - \frac{1}{2}$  כאשר  $V$  נפח הסריג,  $\rho$  - צפיפות המסה ו- $u_0$  אמפליטודה.

**מספר  $\vec{k}$  אפשריים** בסריג בנפח  $V$  הוא  $\frac{V}{Q}$  כאשר זה מייצג את סה"כ תאי היחידה בסריג,  $Q$  - נפח תא היחידה.

• **פונונים הם בוזונים** לכן יש להם התפלגות בוזא:  $f_{BE} = \langle n \rangle = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}$

לכן מתקיים (עבור כל ה- $\vec{k}$ ):  $\bar{E} = \sum_{\vec{k}} \sum_{d \text{ - On all branches inside FBZ}} \langle n(\omega_d(\vec{k})) \rangle \hbar \omega_d(\vec{k})$

כאשר  $\bar{E}$  הוא אנרגיה ממוצעת לפי המקום והזמן,  $d$  - כל הענפים.

• עבור **טמפרטורה גבוהה** נמצא את האנרגיה ע"י סכימה רגילה (ולא באינטגרציה). כאשר  $\langle n(\omega_d) \rangle = f_{BE}$ .

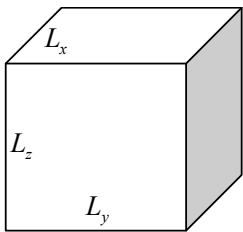
• אם לכל הפולריזציות אותו יחס דיספרסיה אז יש ניוון ולכן האנרגיה הממוצעת אז היא:

$$\bar{E} = d \sum_{\vec{k}} \langle n(\omega_{\vec{k}}) \rangle \hbar \omega_{\vec{k}}$$

או בצורה האינטגרלית:  $\bar{E} = d \int_0^{\omega_0} \hbar \omega D(\omega) f(\omega) d\omega$

**קיבול חום סגולי:**  $C_V = \frac{1}{V^d} \frac{\partial}{\partial T} \left( \sum_{d \text{ - On all branches inside FBZ}} \sum_{\vec{k}} \langle n(\omega_d(\vec{k})) \rangle \hbar \omega_d(\vec{k}) \right)$

**צפיפות אופני תנודה ליחידת אנרגיה:**



$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} n$$

$$k_y = \frac{2\pi}{L_y} m \quad n, m, l \in \mathbb{Z}$$

$$k_z = \frac{2\pi}{L_z} l$$

(1D)  $D(\vec{k}) dk = 2 \frac{L_x}{2\pi} dk = \frac{L_x}{\pi} dk$

(2D)  $D(\vec{k}) dk = \frac{L_x}{2\pi} \frac{L_y}{2\pi} d^2 k = \frac{A}{(2\pi)^2} d^2 k = \frac{2\pi A}{(2\pi)^2} k dk$

(3D)  $D(\vec{k}) dk = \frac{L_x}{2\pi} \frac{L_y}{2\pi} \frac{L_z}{2\pi} d^3 k = \frac{V}{(2\pi)^3} d^3 k = \frac{4\pi V}{(2\pi)^3} k^2 dk$

$$D(\omega) d\omega = D(\vec{k}) dk = \left( \frac{L}{2\pi} \right)^d d^d k \Rightarrow D(\omega) = D(\vec{k}) \left( \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k=k(\omega)} \right)^{-1}$$

אנו דנים ב- $k$  ימים גדולים ולכן  $\sum_{\vec{k}} f(\vec{k}) \rightarrow \int D(\vec{k}) f(\vec{k}) dk$

• כדי לקבל את צפיפות התדירות ליחידת נפח מוכלל, מחלקים בנפח המוכלל של הגביש בהתאם למימדים -  $V_d \equiv L_x, A, V$

• צפיפות ליחי' אנרגיה ליחי' נפח מוכלל = מספר אופני התנודה ליחידת נפח מוכלל על קו שווה תדירות:  $g(\omega) = \frac{D(\omega)}{V_d}$

**הערה** - כאשר ל- $D(\omega)$  ישנה סינגולריות ב- $\omega \left( k = \frac{\pi}{a} \right)$  - נקרא Van-Hove

**פונונים**

**פונונים** - תנודות גליות של אטומים.  
**הנחות שונות בפתרון פונונים:**

1. תנועת האטום הנתונה ע"י הפונקציה  $u_{n,m,l}(\vec{R})$  היא בסדר גודל קטן יותר מהמרחק האופייני בין האטומים.
2. האטום ב- $\vec{R}$  יושב במינימום פוטנציאל ← תנודות קטנות של האטום.
3. האינטראקציה היא רק בין שכנים קרובים.
4. תנאי השפה מחזוריים.

**תהליכים שונים בפתרון בעיות פונונים:**

1. בקירוב של סריג גדול מציעים פתרון מחזורי כאשר  $\vec{R} = (na, mb, lc)$ :  
 $u_{n,m,l}^{j,b} = \epsilon_b^j e^{i(\vec{R}\vec{k} - \omega t)} = \epsilon_b^j e^{i(nak_x + mbk_y + lck_z - \omega t)} \quad j = \{x, y, z\}$
2. מספר האטומים בבסיס ו- $\vec{R}$  מחבר בין נקודות השריג (ללא הבסיס). קבוע ה"קפיץ" הוא הנגזרת השנייה בנקודת המינימום של הפוטנציאל.
3. ממחזוריות נקבל תנאים על  $k_j$  כפונק' של מס' תאי היחידה בכל מימד.

$$k_j = \frac{2\pi}{a N_j} m \Leftrightarrow \left\{ \frac{2\pi}{a N_j} \leq k_j \leq \frac{2\pi}{a}, 1 \leq m \leq N_j, m \in \mathbb{Z} \right\}$$

עובדים בתוך FBZ לכן מגדירים  $\left\{ \frac{\pi}{a} \leq k_j \leq \frac{\pi}{a}, -\frac{N_j}{2} \leq m \leq \frac{N_j}{2}, m \in \mathbb{Z} \right\}$

- מהגדרה אחרונה נובע תנאי לפיסיקה הנ"ל  $\lambda \geq 2a$
- 3. פתרון כללי:  $u_{n,m,l}^j = \sum_k \epsilon_b^j e^{i(nak_x + mbk_y + lck_z - \omega t)}$

**4. שלבים לקבלת קשר דיספרסיה:**

- a. כותבים פוטנציאל כולל של כל האטומים - הפוטנציאל של הגביש (עבור קפיצים  $U = \frac{1}{2} \tilde{k} (\Delta u)^2$ )
- b. כותבים את משוואת הכוחות עבור אטום בודד - כלומר את התרומה של השכנים הקרובים בלבד,  $M_b \ddot{u}_{n,m,l}^j = - \frac{\partial U}{\partial u_{n,m,l}^j}$
- c. מצביעים את הפתרון מסעיף 1, ומקבלים את  $\omega(\vec{k})$

**הערה:** במידה ויש מספר אטומים בבסיס ו/או תנועה במישור האטומים, מקבלים לאחר ההצבה מערכת משוואות מהצורה  $(A - \omega^2 I) \vec{\epsilon} = 0$ .

על מנת לקבל פתרון לא טריוויאלי דורשים  $|A - \omega^2 I| = 0$ , מקבלים שלכל אופן תנודה בריבוע (ע"ע) מתאים ו"ע המתאר את התנודות היחסיות של  $\epsilon_b^j$ .

**מהירות החבורה** -  $V_g = \frac{\partial \omega(\vec{k})}{\partial \vec{n}} = \nabla \omega(\vec{k}) \cdot \hat{n}$

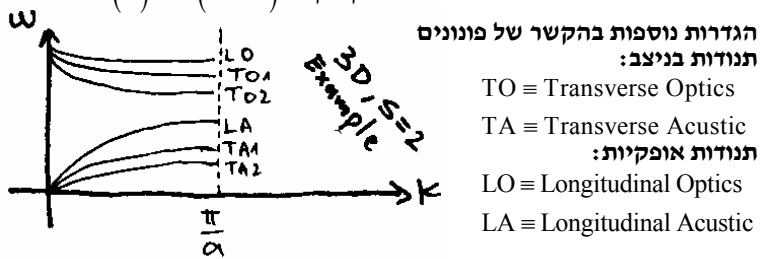
**פירוש:** כאשר היא תלויה ב- $k$  נקבל שאחרי ההפרעה לא נוהה כבר את המבנה התחתלי, שני מקרים חשובים של מהירות החבורה:

1.  $ka \ll 1 \leftarrow$  יחס ליניארי  $\leftarrow V_g = V_{\text{Sound}} = \text{Const}$
2.  $ka \sim \pi \leftarrow \omega = \text{Const} \equiv \omega_0$  גל עומד.

**ענף אקוסטי** - ענף שמקיים  $\omega(\vec{k} = 0) = 0$ , מספר הענפים האקוסטיים הוא כמספר מימדי הגביש ( $d$ ) שבהם האטומים חופשיים לנוע.

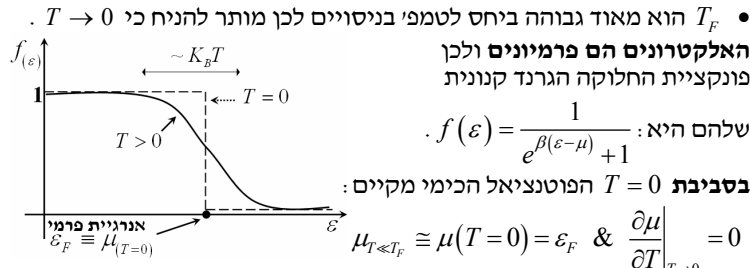
**דוגמא:** ב-2D - תנודות שבהן היחס  $\epsilon_1 / \epsilon_2$  חיובי יוצר גלי לחץ (גלי קול).  
**ענף אופטי** - ענף שמקיים  $\omega(\vec{k} = 0) \neq 0$

מספר הענפים האופטיים  $d(s-1)$  כאשר  $s$  הוא מס' האטומים בבסיס.  
**דוגמא:** ב-2D - בתנודות שבהן היחס  $\epsilon_1 / \epsilon_2$  שלילי והמטענים הפוכים, נוצר מומנט דיפול משתנה שמקרין (או ניתן לערעור) שדה א"מ.  
**חשוב!** לגביש שניתן לתיאור ע"י סריג ללא בסיס - אין ענף אופטי.  
• כתוצאה מתנאי השפה המחזוריים ניתן לקבל  $\omega(\vec{k}) = \omega(\vec{k} + \vec{G})$



**הגדרות:** מומנטום פרמי:  $\bar{p}_F = \hbar k_F$  אנרגיית פרמי:  $\epsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m_e}$

טמפרטורת פרמי:  $T_F = \frac{\epsilon_F}{K_B}$  מהירות פרמי:  $V_F = \frac{p_F}{m_e}$



האלקטרונים הם פרמיונים ולכן פונקציית החלוקה הגרנד קנונית שלהם היא:

$$f(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1}$$

בסביבת  $T = 0$  הפוטנציאל הכימי מקיים:

$$\mu_{T \ll T_F} \approx \mu(T=0) = \epsilon_F \quad \& \quad \left. \frac{\partial \mu}{\partial T} \right|_{T \rightarrow 0} = 0$$

מרוכות מאוד סביב  $\mu$  ולכן  $\left. \frac{\partial f(\epsilon)}{\partial T} \right|_{T \rightarrow 0}$

צפיפות האלקטרונים:  $D(\epsilon) = V_d \cdot g(\epsilon) = 2 \frac{V_d}{(2\pi)^d} \pi (2k)^{d-1} \frac{1}{d\epsilon/dk}$

עבור  $T = 0$  מספר האלקטרונים הוא:  $N_{el} = \int_0^{\epsilon_F} D(\epsilon) d\epsilon$

מנוסחא זו מוצאים אנרגיית פרמי או  $\mu_{T=0}$  כפונק' מס' האלקטרונים.

מספר האלקטרונים בטמפרטורה כלשהי:  $N_{el} = \int_0^{\infty} D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon$

מנוסחא זו מוצאים את הפוטנציאל הכימי עבור  $T \neq 0$  כפונקציה של  $T$ .

צפיפות המצבים ליחידת אנרגיה לחלקיק בודד בתיבה ללא ספין		
$D_{1D}(\epsilon) = \frac{L}{\pi \hbar} \sqrt{\frac{m}{2\epsilon}}$	$D_{2D}(\epsilon) = \frac{mS}{2\pi \hbar^2}$	$D_{3D}(\epsilon) = \frac{mV}{2\pi^2 \hbar^3} \sqrt{2m\epsilon}$

קיבול חום של אלקטרונים: נמדד ביחס לאנרגיית מצב היסוד.

$$\Delta E = \int_{\epsilon_F}^{\infty} (\epsilon - \epsilon_F) D(\epsilon) f(\epsilon) d\epsilon - \int_0^{\epsilon_F} (1 - f(\epsilon)) (\epsilon - \epsilon_F) D(\epsilon) d\epsilon$$

•  $(1 - f(\epsilon))$  - מבטא את הסיכוי למצוא מצב ריק מתחת ל- $\epsilon_F$ .

קיבול החום:  $C_V^{el} = \frac{\partial(\Delta E)}{\partial T} \approx \frac{\pi^2}{3} K_B^2 T D(\epsilon_F) \stackrel{\ln 3D}{=} \frac{\pi^2}{2} NK_B \left( \frac{T}{T_F} \right)$

• רק  $N \left( \frac{T}{T_F} \right)$  אלקטרונים אקטיביים מבחינה פיסיקלית.

**מוליכות חשמלית**

כאשר על מערכת של אלקטרונים מתחיל לפעול כוח חיזוני, כדור פרמי זז במרחב הפאזה, לאחר שהכוח מפסיק לעבוד המערכת חוזרת לשיווי משקל, הזמן שלוקח לכדור פרמי לחזור מסומן ע"י  $\tau$ .

מודל דרודה:  $\frac{d\bar{p}}{dt} = \bar{F}_{ext} - \frac{\bar{p}}{\tau} = -e \left( \bar{E} + \frac{\bar{p}}{mc} \times \bar{H} \right) - \frac{\bar{p}}{\tau}$

•  $\tau$  - הזמן האופייני שלוקח לכדור פרמי לחזור לראשית.

• המקור של  $\tau$ : (1) פיזור אלקטרון מפנוון  $\tau_{\text{phonon}}$

(2) אי נקיונות של הסריג  $\tau_{\text{Impurities}}$

• לכן  $\tau$  הכולל:  $\frac{1}{\tau_{\text{tot}}} = \frac{1}{\tau_{\text{phonon}}} + \frac{1}{\tau_{\text{Impurities}}}$

• מודל דרודה **בנו** רק עבור גדלים ממוצעים בלבד ( $\bar{p} = \bar{p}_{\text{Average}}$ )

מצב סטציונרי - אין תלות בזמן, כלומר,  $\dot{\bar{p}} = 0$ .

צפיפות הזרם -  $\vec{j} = -en_e \bar{v} = -en_e \bar{p} = -en_e \bar{v}$ ,  $\vec{j} = -en_e \bar{v}$

חוק אוהם -  $\vec{j} = \sigma \vec{E}$ , צורה אחרת לכתביה  $\vec{E} = \vec{\rho} \vec{j}$ . כאשר  $\vec{\sigma}$  הוא טנזור המוליכות ו- $\vec{\rho}$  הוא טנזור ההתנגדות. ומתקיים:  $\vec{\sigma} = \vec{\rho}^{-1}$ .

• מתוך מודל דרודה נחץ  $\vec{E}$  כפונקציה של  $\vec{p}$ , ומתוך צפיפות הזרם את  $\vec{E}$  כפונקציה של  $\vec{j}$ . מטריצת המקדמים שתתקבל תהיה  $\vec{\rho}$ .

• קבועים שנהוג להשתמש:  $\omega_c = \frac{eB}{m_e c}$   $\sigma_0 = \frac{n_e e^2 \tau}{m_e} = \frac{1}{\rho_0}$

•  $m_e$  - מסה ציקלוטרונית,  $\omega_c$  - תדירות ציקלוטרונית.

**שלבים במציאת צפיפות המצבים**

- א. מוצאים את  $n(\omega)$  כלומר, את צפיפות המצבים עד תדירות  $\omega$ .
- ב. גוזרים לפי  $\omega$  ומקבלים את  $g(\omega)$ .

$$n(\omega) = \frac{1}{V_d} \left( \text{Volume in Space } \vec{k} \text{ up to frequency } \omega \right) \Rightarrow g(\omega) = \frac{dn(\omega)}{d\omega} = \frac{(2\pi)^d}{V_d}$$

קיבול חום בטמפרטורות גבוהות:  $C^V = (\text{Number of Modes}) K_B \frac{N}{V_d}$

• חשוב!!!  $N$  הוא מספר האטומים בסריג, ולא מספר תאי היחידה.

**מודל Debay-Einstein**

הנחת Debay - קירוב לינארי של המוד האקוסטי  $\omega(k) = V_S k$  - כאשר  $\omega_D$  קצת גם גבולות התדירות משתנים, מ- $\omega_0$  &  $\omega_D \rightarrow 0$  &  $\omega_D = 0$ .

מוצאים ע"י כך שמעגלים (ב-3D) את ה-FBZ לכדור בעל רדיוס  $k_D$ , ואת  $k_D$  נמצא מהדרישה שמספר תאי היחידה ישמר. כלומר  $N = \frac{4\pi}{3} k_D^3 \left( \frac{2\pi}{L} \right)^3$

• חשוב!  $N$  הוא מספר תאי היחידה ומתקיים:  $n = \frac{N}{V_d} = \frac{N}{L^d} = \frac{1}{a^d}$

הערה: בסריג מלבני  $\frac{1}{a^d} \rightarrow \frac{1}{a_x \cdot a_y \cdot \dots \cdot a_d}$

• במודל Debay  $N \rightarrow N \cdot S$ ,  $S$  - מספר האטומים בבסיס.

תדירות Debay:  $\omega_D = V_S k_D = V_S \sqrt[3]{\frac{6\pi^2 N}{V}}$

טמפרטורת Debay:  $\theta_D \equiv \frac{\hbar \omega_D}{K_B} = \frac{\hbar V_S}{K_B} \sqrt[3]{\frac{6\pi^2 N}{V}}$

• טמפ' דבאיי מהווה נקודת ייחוס ע"מ לקבוע האם  $T$  גבוהה/נמוך.

קיבול חום סגולי בקירוב Debay:  $C_{Debay}^V = \frac{\partial}{\partial T} \left( \int_0^{\omega_D} g(\omega) f(\omega) \hbar \omega d\omega \right)$

דוגמא לקיבול חום ב-3D:  $C_{Debay}^V = 9NK_B \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\left(\frac{\theta_D}{T}\right)} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx$

צפיפות המצבים ליחידת תדר ושטח מוכלל בקירוב דבאי - $\omega = V_S k$		
$g_{1D}(\omega) = \frac{1}{\pi V_S}$	$g_{2D}(\omega) = \frac{\omega}{2\pi V_S^2}$	$g_{3D}(\omega) = \frac{\omega^2}{2\pi^2 V_S^3}$

**מודל איינשטיין**

הנחת איינשטיין: קירוב המוד האופטי ע"י תדירות קבועה  $\omega_E \equiv \omega_{\text{Optic}} (\vec{k} = 0)$

קיבול החום של המוד האופטי:  $C_{Optic}^V = d \frac{NK_B}{V_d} \frac{e^{\beta \hbar \omega_E} (\beta \hbar \omega_E)^2}{(e^{\beta \hbar \omega_E} - 1)^2}$

• חשוב! בהנחה שבבסיס יש יותר מאטום אחד (אחרת אין ענף אופטי).

• מודל איינשטיין רלוונטי רק בטמפ' גבוהות כי בטמפ' נמוכות הענף האופטי לא מאוכלס בתדרים גבוהים.

קיבול החום הכולל:  $C_{Total}^V = C_{Debay}^V + C_{Optic}^V$

**אלקטרונים במוצק (מתכות)**

בקירוב ראשון האלקטרונים במתכת הם גז של חלקיקים חופשיים בעלי ספין בתיבה. (כאשר לכל דרגת חופש אנרגיה ממוצעת של  $K_B T/2$ ).

משוואת המצבים של האלקטרונים היא משוואת שרדינגר:  $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi = E \Psi$

עם תייש מחזוריים  $\psi(x, y, z) = \psi(x + L, y, z)$  וכנייל עבור  $y$  ו- $z$ .

הפתרון שמתקבל הוא  $\psi = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$  כאשר  $k_i = 2\pi/L n_i$ ,  $n_i \in \mathbb{Z}$ .

התנע שלהם הוא:  $\vec{p} = \hbar \vec{k}$  והאנרגיה שלהם היא:  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

על מנת לקבל את  $k_F$  נסתכל על הטמפרטורה  $T = 0$  בה האלקטרונים

מאכלסים רמות היסוד ומספרם:  $n = \frac{N_{\text{electrons}}}{V_d} = \frac{2}{(2\pi)^d} \left( \text{Volume in Space } \vec{k} \text{ up to energy fermi} \right)$  (המכפלה ב-2 נובעת מהספין)

צפיפות האלקטרונים:  $n_e = S \frac{N}{V_d} = S \frac{2}{a^d}$  ( $S$  מספר הבאטום).

ערכו וליקטו פבל בבלי יואש מור בשיתוף עם עמנואל מרזכי

- עבור  $B = 1 [Tesla]$  נקבל  $\mu_B B = 1 [K]$ , במעבדה ניתן ליצור מקסימום שדה מגנטי בעוצמה של 100 טסלה כלומר  $100^{\circ} K$  ו-  $T_F \sim O(10^5)$ , לכן הגודל  $\mu_B B \ll \epsilon_F$ , לא משתנה כתוצאה מ-  $\vec{B}$ .
- בעקבות ההזנחה (1):  $N = N_+ + N_- \cong \int_0^{\epsilon_F} D(\epsilon) d\epsilon$
- בעקבות ההזנחה (2):  $M = \mu_B (N_+ - N_-) = \mu_B^2 D(\epsilon_F) B$
- חשוב: גם  $M$  ו-  $\chi$  לא תלויים בטמפרטורה.

**דוגמא ב-3D:**  $M = \mu_B^2 B \frac{3N}{2K_B T_F} \Rightarrow \chi = \mu_B^2 \frac{3N}{2K_B T_F}$

**קירוב זומפרלד**

אנחנו מעוניינים לחשב גדלים מצורה:  $I = \int_{-\infty}^{\mu} \frac{H(\epsilon)}{e^{(\epsilon-\mu)/K_B T} + 1} d\epsilon$

כאשר  $H(\epsilon)$  היא פונקציה ששואפת ל-0 ב-  $\epsilon \rightarrow -\infty$  ומתבררת לא יותר מהר מחוק החזקה ב-  $\epsilon \rightarrow \infty$ .

פיתוח זומפרלד:  $I = \int_{-\infty}^{\mu} H(\epsilon) d\epsilon + \frac{\pi^2}{6} H'(\mu) (K_B T)^2 + \frac{7\pi^4}{360} H'''(\mu) (K_B T)^4 + \dots$

- כל האיברים הבאים הם מהצורה  $a_m H^{(2m-1)} (K_B T)^{2m}$  כאשר  $a_m = \left(2 - \frac{1}{2^{2(m-1)}}\right) \zeta(2m)$  ו-  $\zeta(2m)$  היא פונקציה זיטא של רימן.
- דוגמאות לפיתוחים של הפוטנציאל הכימי וצפיפות האנרגיה עד סדר רביעי בטמפרטורה לפי קירוב זומפרלד:

$\mu = \epsilon_F - \frac{\pi^2}{6} \frac{g'(\epsilon_F)}{g(\epsilon_F)} (K_B T)^2 - \frac{\pi^4}{36} \left( \frac{1}{2} \left( \frac{g'(\epsilon_F)}{g(\epsilon_F)} \right)^3 + \frac{7}{10} \frac{g'''(\epsilon_F)}{g(\epsilon_F)} - \frac{g'(\epsilon_F)g''(\epsilon_F)}{g^2(\epsilon_F)} \right) (K_B T)^4$

$u = u_0 + \frac{\pi^2}{6} g(\epsilon_F) (K_B T)^2 - \frac{\pi^4}{24} \left( \frac{g'(\epsilon_F)}{g(\epsilon_F)} \right)^2 - \frac{7}{5} g''(\epsilon_F) \right) (K_B T)^4$

- פיתוח לטור:  $\int_{-\infty}^{\mu} \epsilon g(\epsilon) d\epsilon \cong \int_{-\infty}^{\epsilon_F} \epsilon g(\epsilon) d\epsilon + \epsilon_F g(\epsilon_F) (\mu - \epsilon_F)$
- כאשר  $u_0$  היא האנרגיה ליחידת נפח בטמפרטורה  $T = 0$  (האיבר ה-1).
- מספר החלקיקים ליחידת נפח:  $\int_{-\infty}^{\epsilon_F} g(\epsilon) d\epsilon = N/V$

**פסי אנרגיה**

פתרון משוואת שרדינגר עבור חלקיק חופשי בנפח סופי ותנאי שפה מחזוריים:

$\epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$      $\vec{p} = \hbar \vec{k}$      $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$      $k_i = \frac{2\pi}{L_i} n_i$      $\forall n_i \in \mathbb{Z}$      $i = 1, 2, 3$

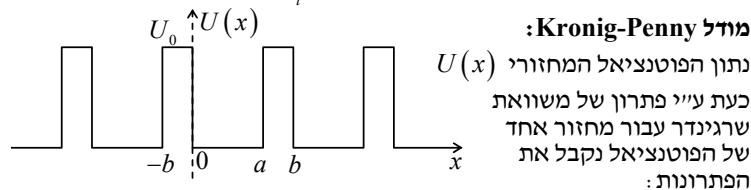
- צפיפות ההסתברות בנפח סופי  $\rho = \left| \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{\sqrt{V}} \right|^2 = \frac{1}{V}$  - סיכויי אחיד בכל הנפח הרעיוני: האלקטרון הנע בסריג בפוטנציאל מחזורי יקיים את משפט בלוך. משפט בלוך:

פתרון משוואת שרדינגר לפוטנציאל מחזורי הוא  $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r}) e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}$

•  $\vec{k}$  קשור למחזוריות הסריג:  $u_{\vec{k}}(\vec{r}) = u_{\vec{k}}(\vec{r} + \vec{T})$

•  $\vec{q}$  קשור למחזוריות הגביש:  $q_i = \frac{2\pi}{L_i} n$ ;  $n \in \mathbb{Z}$

**מודל Kronig-Penny**



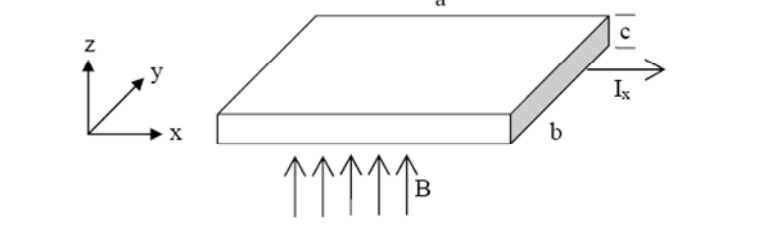
$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x^2} + U(x)u(x) = Eu(x) \Rightarrow u_{(x)} = \begin{cases} Ae^{iKx} + Be^{-iKx} & 0 < x < a & ; K^2 = \frac{2m\epsilon}{\hbar^2} \\ Ce^{Qx} + De^{-Qx} & -b < x < 0 & ; Q^2 = \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \end{cases}$

**אפקט הול** - מתוד מודל דרודה נקבל כי עבור מוליך שמימדיו  $a \times b \times c$  המחומר למקור מתח  $V$ , כך שהוא יוצר זרם בציר  $\hat{x}$ , ושדה מגנטי אחיד בציר  $\hat{z}$ , מחברים וולטמטר בדפנות המוליך (צלע  $c$ ) ומודדים מתח  $V_H$ .

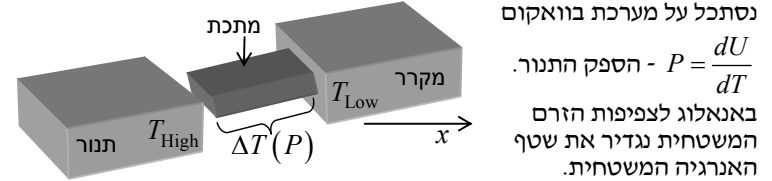
בממוצע אין לאלקטרונים תנע בכיוון  $\hat{z}$  &  $\hat{y}$ . וממודל דרודה מקבלים את הקשר,  $E_y = -\frac{eB\tau}{mc} E_x$ , עוד מתקיים  $V_H = E_y b$ .

מקדם הול:  $R_H = \frac{E_y}{J_x B} = -\frac{1}{enc}$

- בעזרת מקדם הול ניתן למדוד את צפיפות האלקטרונים.



**מוליכות חום של אלקטרונים**



נסתכל על מערכת בוואקום  $P = \frac{dU}{dT}$  - הספק התנור. באנאלוג לצפיפות הזרם המשטחית נגדיר את שטף האנרגיה המשטחית.

שטף האנרגיה:  $\frac{P}{A} = J_U = -k \frac{dT}{dx} = -(C_V \Delta T) n v = -C_V \frac{dT}{dx} \frac{dx}{\tau} = -C_V^2 \tau \frac{dT}{dx}$

- הנחה: אורך הדגם הוא כאורך הדרך החופשית  $v_x \tau = l$ .
- הנחה: עבור מהירות קבועה  $dx = l$  מכיוון שינוי הדרך של האלקטרון הוא כאורך הדרך החופשית.
- הנחה סמויה: מהירות אשר לא בכיוון  $\hat{x}$  אינה תורמת למוליכות לכן  $\overline{v_x^2} = \frac{1}{3} \overline{v^2}$  וכמו כן מתקיים  $v \rightarrow v_x$ .

- רק האלקטרונים בקליפה החיצונית משתתפים במוליכות,  $v^2 = v_F^2$ .
- לפונונים בקירוב Debay יש גם מהירות קבוע  $v = V_S$ .
- $C = C_V n$  - קיבול חום ליח' נפח.

מוליכות החום:  $k = \frac{1}{3} C_V \overline{v^2} \tau \Rightarrow k = \frac{1}{3} C_V \overline{v^2} \tau$

**Electrons:**  $k_{el} = \frac{1}{3} C_V l_{el}$

**Phonon:**  $k_{ph} = \frac{1}{3} C_V l_{ph}$

**סוספטביליות של גז אלקטרונים**

$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$      $\begin{cases} \vec{\mu} = g \mu_B \vec{S} & g \cong 2 \\ \mu_B = -\frac{q\hbar}{2mc} \end{cases}$      $\vec{\mu}$  - Magnetic Momentun     $\vec{S}$  - Spin of The Electron

- $q = -e$  - מטען של החלקיק - עבור אלקטרון
- תוספת זו של אנרגיה תגרום לשינוי ההתפלגות של האלקטרונים.

מומנט מגנטי כלי:  $M = \mu_B (N_+ - N_-)$

סוספטביליות:  $\chi = \frac{\partial M}{\partial H} \Big|_{H \rightarrow 0} \Rightarrow \chi = \frac{\partial M}{\partial B} \Big|_{B \rightarrow 0}$

- בדרך כלל השדה המגנטי אחיד ובכיוון  $\hat{z}$ .
- מתקיים  $N = N_+ + N_-$ .
- מספר האלקטרונים עם ספין  $|\uparrow\rangle$  -  $N_+$
- מספר האלקטרונים עם ספין  $|\downarrow\rangle$  -  $N_-$
- הפקטור חצי לפני האינטגרל בא לבטל את הפקטור 2 כתוצאה מהספין שנלקח בחשבון ב-  $D(\epsilon)$ .

**קירוב אלקטרונים כמעט חופשיים**,  $U(\vec{x}) \rightarrow 0$  משתמשים במשוואות למקדמי הפיתוח לגלים מישוריים:

$$\left(\varepsilon_{\vec{k}-\vec{G}_n}^0 - \varepsilon\right) C_{\vec{k}-\vec{G}_n} + \sum_m U_{\vec{G}_m-\vec{G}_n} C_{\vec{k}-\vec{G}_m} = 0 \quad \varepsilon_{\vec{k}-\vec{G}_n}^0 = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G}_n)^2$$

- כאשר באים לפתור בעיית ניוון בנקודה כלשהי  $\vec{k}$ , משאירים מכל המשוואות רק ה-  $C_{\vec{k}-\vec{G}_n}$  שוקטורי הסריג ההופכי שלהם הם "המקורות" התורמים לניוון בנקודה  $\vec{k}$ . ולכן מספר המשוואות שנפתור לקבלת פתרון לא טריוויאלי הוא כמספר וקטורי הסריג  $\{\vec{G}\}_m$  שתורמים לניוון.
- לשים לב** לדרגת הניוון של הנקודה  $\vec{k}$  כאשר מדובר על מציאת וקטורי סריג שתורמים לניוון.
- הניוון יכול להיות מוסר רק אם יש רכיבי פוריה  $U_{\vec{G}_m-\vec{G}_n}$  שאינם אפס.

- פער אנרגיה** נגרם כתוצאה מהסרת הניוון, ולכן אם הניוון נשמר אין פער. ע"מ שיפתח פער, המיני של הפס השני צ"ל גבוה מהמקסי של הפס הראשון.
- הפוטנ' חלש ולכן משמעותי בק ליד מישורי בראג, שם מחליק קווי האנרגיה.
- כאשר מחפשים התנהגות האנרגיה בסביבת נקודת הניוון  $\vec{k}$** , פותרים את אותה מערכת המשוואות כאשר הפעם  $\varepsilon_{\vec{k}-\vec{G}_1}^0 \neq \varepsilon_{\vec{k}-\vec{G}_2}^0 \neq \dots \neq \varepsilon_{\vec{k}-\vec{G}_n}^0$ .

**דוגמה לשני מקורות ניוון בסביבת  $\vec{k}$  עם הפרעה  $\Delta$** :  $\varepsilon_{1,2} = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} - \vec{G}_{1,2})^2$

$$0 = \begin{vmatrix} \varepsilon_1 - \varepsilon & \Delta \\ \Delta & \varepsilon_2 - \varepsilon \end{vmatrix} \Rightarrow \varepsilon = \frac{1}{2}(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \pm \sqrt{\frac{1}{4}(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + \Delta^2}$$

**אכלוס מצבים והולכה חשמלית:**

- בסריג חד מימדי פסי האנרגיה בקירוב של  $U(\vec{x}) \rightarrow 0$  מתחילים מפס קמור, אחריו קעור שוב קמור וכ"ל בגלל שעבור  $U(\vec{x}) = 0$  כך נראים פסי האנרגיה אבל ללא הפער הקטן בין הפסים. נניח  $N$  מצבים בפס, אז ב-  $T = 0$  באכלוס ייראה כך: תחילה  $2N$  אלקטרונים ראשונים ימלאו את הפס הראשון ואח"כ יתחיל מילוי הפס הבא מהאנרגיה הנמוכה והלאה.

- גביש מבודד** אם פסי האנרגיה מלאים/ריקים לגמרי, ואז אלקטרון לא יכול לנוע תחת שדה חשמלי חיצוני על פי עקרון האיסור של פאולי.
- גביש מוליך** אם אחד (או יותר) מפסי האנרגיה מלא חלקית (90%-10%).



- פסי האנרגיה כפי שצויר בדוגמה של המוליך אפשריים רק בסריג 1D, לא אפשרי בסריג 3D.
- גביש יהיה מוליך-למחצה** אם אחד (או יותר) מפסי האנרגיה יהיה מלא או ריק לגמרי ו-  $E_{\text{gap}} \equiv \Delta \approx K_B \cdot 300 [^{\circ}\text{K}]$  ניתן לשנות רמת מוליכות ע"י אור, טמפרטורה (קירור) וטעינת מטענים חיצוניים.

**תנע של פונק' בלוק:**  $\langle \vec{P}_B \rangle = \langle \psi_{\vec{k}} | -i\hbar \vec{\nabla}_{\vec{r}} | \psi_{\vec{k}} \rangle = \dots = \hbar \vec{k} + \sum_{\vec{G}} \hbar \vec{G} |c_{(\vec{k}-\vec{G})}|^2$

**טנזור המסה אפקטיבית ההופכי:**  $\left[ (\vec{M}^*)^{-1} \right]_{i,j} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_i \partial k_j}$

**משוואות התנועה בקירוב הסמי קלאסי:**  $\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} \varepsilon(\vec{k})$

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -e \left( \vec{E} + \frac{1}{c} \vec{v} \times \vec{H} \right) = \vec{M}_{\text{eff}}^* \frac{d\vec{v}}{dt} = \begin{cases} \hbar \dot{k}_x = -e(E_x + \beta_y H_z - \beta_z H_y) \\ \hbar \dot{k}_y = -e(E_y + \beta_x H_z - \beta_z H_x) \\ \hbar \dot{k}_z = -e(E_z + \beta_x H_y - \beta_y H_x) \end{cases}$$

- כוח חיצוני פועל על האלקטרונים/חורים ולא על הסריג.
- ע"מ למצוא  $\omega_c$  נציב  $\vec{v} = \vec{v}_0 e^{-i\omega_c t}$ , ובסוף ניקח החלק הממשי.

דרישה של רציפות, רציפות נגזרת ומחזוריות סריגית של  $a+b$ , נותן את **יחס הדיספרסיה**:

$$\frac{(Q^2 - K^2)}{2KQ} \sinh(Qb) \sin(Ka) + \cosh(Qb) \cos(Ka) = \cos[q(a+b)]$$

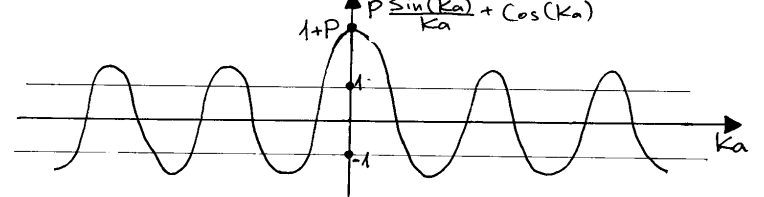
- נזכור כי בהינתן אנרגיה  $E$  ופוטנציאל  $U_0$  אנו יודעים גם את  $K$  ו-  $Q$  ולכן מקבלים יחס נפיצה לפאזה  $q = q(E)$ .

**אם נעבור לגבול של פונקציות זלתא, בתנאים:**  $\begin{cases} b \rightarrow 0 & Q \gg K \\ U_0 \rightarrow \infty & Qb \ll 1 \end{cases}$

נגדיר  $P \equiv \frac{Q^2 b a}{2}$ , ונציב את  $Q^2$  ולכן  $P \approx \frac{m U_0 b a}{\hbar^2}$ ,  $b = b_0 \varepsilon$ ,  $U_0 \equiv \frac{U_{00}}{\varepsilon} \Big|_{\varepsilon \rightarrow 0}$

**נקבל את יחס הדיספרסיה:**  $\frac{P}{Ka} \sin(Ka) + \cos(Ka) = \cos(qa)$

- בחישוב ישיר נדרוש קפיצה בנגזרת של  $\Delta \psi' = \frac{2m U_{00} b_0}{\hbar^2} \psi$ .



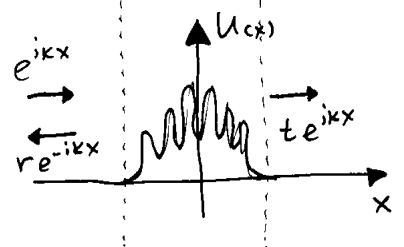
- $q$  המשתנה החשוב ולא  $K$ .
- בהינתן  $P$  מסוים (תכונה של החומר), ניתן לראות מהגרף כי עבור  $q$  מסוימים קיימים אזורים ללא פתרון (אנרגיות אסורות) ואילו עבור  $q$  אחרים לכל  $q$  מסוים יש מספר  $K$ -ים מתאימים עם אנרגיות מתאימות.

**פוטנציאל מחזורי סימטרי חד-מימדי:**

עבור פוטנציאל בודד הפתרונות בשני האזורים, כאשר  $K^2 = \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2}$ :

$$\psi_{\text{Left}} = \begin{cases} e^{iKx} + re^{-iKx} & x \leq -a/2 \\ te^{iKx} & x \geq a/2 \end{cases}$$

$$\psi_{\text{Right}} = \begin{cases} te^{iKx} & x \leq -a/2 \\ e^{iKx} + re^{-iKx} & x \geq a/2 \end{cases}$$



- כמו כן ניתן להגדיר את המקדמים כך:  $t = |t| e^{i\delta}$ ,  $r = |r| e^{i\alpha}$
- $\Rightarrow |t|^2 + |r|^2 = 1$ ,  $e^{i\alpha} = \pm i e^{i\delta} \Rightarrow r = \pm i \sqrt{1 - |t|^2} e^{i\delta}$
- $K$  מייצג את אנרגיית האלקטרון ו-  $q$  וקטור גל דיסקרטי.

**יחס הדיספרסיה עבור מקרה זה הוא:**  $\cos(qa) = \frac{1}{|t|} \cos(Ka + \delta)$

- בשביל מחסום חלש  $\delta \sim 0$ ,  $|t| \sim 1$ , רוחב פער האנרגיה ה-  $n$  שווה בקירוב ל-  $2\pi n \frac{\hbar^2}{ma^2} |r|$

- בשביל מחסום חזק  $\delta \sim \pi$ ,  $|t| \sim 0$ , רוחב פס האנרגיה ה-  $n$  שווה בקירוב ל-  $\frac{2\hbar^2}{ma^2} \left| n\pi - \frac{\pi}{2} - \delta \right| |t|$

**פוטנציאל מחזורי כללי:**

מכיוון שהפוטנציאל אינוריאנטי תחת טרנסלציה של וקטור סריג ישיר ניתן להציגו באמצעות רכיבי פורייה:

$$U(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} U_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}$$

הנוסחה הכללית לרכיבי פורייה של הפוטנציאל נתונה ע"י:

$$U_{\vec{G}} = \frac{1}{V_{p.u.c}} \int_{p.u.c} U_{p.u.c}(\vec{r}) e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} dV \quad p.u.c = \text{primitive unit cell}$$

ע"י הצבת הפוטנציאל במשוואת שרדינגר + משחקים מתמטיים מקבלים

$$\left( \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} - \varepsilon \right) C_{\vec{k}} + \sum_{\vec{G}} U_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} = 0 \quad k: \text{מרוחב}$$

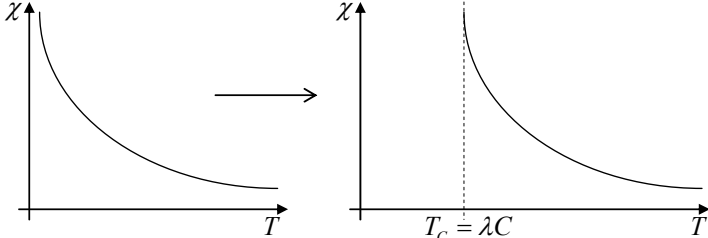
והפתרונות הם פונק' בלוק:  $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \left( \sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} \right) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \sum_{\vec{G}} C_{\vec{k}-\vec{G}} e^{i(\vec{k}-\vec{G}) \cdot \vec{r}}$

**איך נוצרים פרומגנטיים ( - משיכה חזקה למגנט)**

ניקח בחשבון אינטראקציות בין הספינים, כל ספין הוא לולאה קטנה היוצרת שדה מגנטי, ושדה חיזוני  $B_a$ , בכל נקודה ישנו שדה:  $B_a + B_{Exchange}$ .  
 כאשר  $B_E$  הוא רק בין שכנים ונניח יחס פרופורציה למגנטיזציה:  $B_E = \lambda M$ .  
 נקבל:  $M = \frac{C}{T - \lambda C} B_a$   $\left\{ M = \chi B = \frac{C}{T} (B_a + B_E) = \frac{C}{T} (B_a + \lambda M) \right\}$

הסוספטביליות  $\chi_E = \frac{C}{T - \lambda C}$  : מכאן  $T_{Critical} \equiv T_C = \lambda C = \frac{\lambda N g^2 \mu_B^2 J(J+1)}{3K_B}$

מסקנה: ב-  $T_C$  מתרחש מעבר פאזה של החומר לחומר פרומגנט.



מגנונים

מודל הייזנברג - Heisenberg:  $H = E = -2J \vec{S}_p \cdot \sum_{n.n.} \vec{S}_{n.n.}$

- $J > 0$  - פרומגנט,  $J < 0$  - אנטי פרומגנט.
- $n.n.$  - שכנים קרובים.
- $E = -\vec{\mu}_p \cdot \vec{B}_p \Leftrightarrow \vec{\mu}_p \equiv -\mu_B g \vec{S}_p$   $\vec{B}_p \equiv -\frac{2J}{\mu_B g} \sum_{n.n.} \vec{S}_{n.n.}$
- $\vec{S}$  הוא קלאסי, לא דיסקרטי, כאשר נעבוד נכון - באופן קוונטי, ניתן להראות ש-  $\vec{S} \rightarrow \langle \vec{S} \rangle$ .

מגנונים הם פרמיונים המקיימים סטטיסטיקה של בוזונים.

מספר המגנונים הממוצע:  $N_m = \int_{-\infty}^{\infty} D_m(\epsilon) \frac{1}{e^{\beta\epsilon} - 1} d\epsilon$

- $D_m(\epsilon)$  - צפיפות מצבי המגנונים ליחידת אנרגיה, לאנרגיות נמוכות ניתן להשתמש ביחס הדיספרסיה המקורב.

משוואת התנועה של אלקטרון  $p$ :  $\frac{d\vec{S}_p}{dt} = -\frac{\vec{\mu}_p \times \vec{B}_p}{\hbar} = \frac{2J}{\hbar} (\vec{S}_p \times \sum_{n.n.} \vec{S}_{n.n.})$

- כדי לפשט את המשוואה מניחים ש-  $\vec{S} \approx S\hat{z}$  וש-  $|S_x|, |S_y| \ll S$ .
- מניחים פתרון גלי (כמו בפונונים), מהצורה:

$S_{p,q,r}^j = S_0^j e^{i(\vec{R} \cdot \vec{k} - \omega t)} = S_0^j e^{i(pak_x + qbk_y + rck_z - \omega t)}$   $j = \{x, y, z\}$

המגנטיזציה ב-  $T$ :  $M(T) = M(0) \left(1 - \frac{\Delta M}{M(0)}\right) = M(0) \left(1 - \frac{N_m}{SN_{at}}\right)$

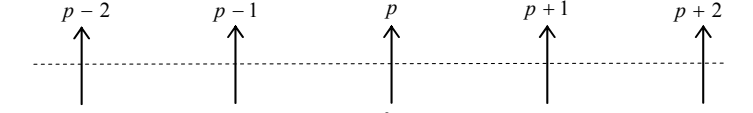
המגנטיזציה ב-  $T = 0$ :  $M(0) = g \mu_B N_{at} S$

- $N_{at} = \frac{V_d}{a^d}$  - מספר האטומים בגביש בעל נפח  $V_d$  עם קבוע סריג  $a$ .

$\Delta M \approx g \mu_B \frac{\langle S_x^2 + S_y^2 \rangle}{2S} \propto \sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} \propto T^3$

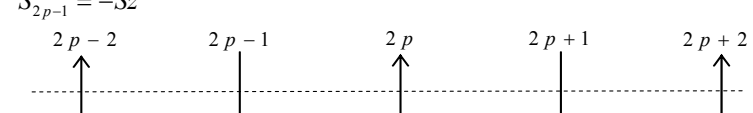
**2 דוגמאות בסיסיות:**

נתונה שרשרת חד מימדית של אטומים פרומגנטיים, כלומר לכל  $p$ :  $S_p^z = S\hat{z}$



יחס הדיספרסיה ( $J > 0$ ):  $\omega(k) = \frac{4JS}{\hbar} (1 - \cos(ka)) \approx \frac{2JSa^2}{\hbar} k^2$

נתונה שרשרת חד מימדית של אטומים אנטי פרומגנטיים, כלומר:



יחס הדיספרסיה ( $J < 0$ ):  $\omega = -\left(\frac{4JS}{\hbar}\right) \sqrt{(1 - \cos^2(ka))} \approx -\left(\frac{4JS}{\hbar}\right) a k$

משוואות התנועה עבור אלקטרון/חור:  $\epsilon^{\text{hole}}(\vec{k}_{\text{hole}}) = -\epsilon^{\text{electron}}(\vec{k}_{\text{electron}})$

$\hbar \dot{\vec{k}}_{\text{electron}} = -e \left[ \vec{E} + \frac{1}{\hbar c} (\vec{\nabla}_{\vec{k}} \epsilon^{\text{electron}}(\vec{k}_{\text{electron}})) \times \vec{H} \right]$   
 $\hbar \dot{\vec{k}}_{\text{hole}} = e \left[ \vec{E} + \frac{1}{\hbar c} (\vec{\nabla}_{\vec{k}} \epsilon^{\text{hole}}(\vec{k}_{\text{hole}})) \times \vec{H} \right]$   
 $\vec{k}_{\text{hole}} = -\vec{k}_{\text{electron}}$

- לחור אין מטען.
- על 2 אלקטרונים (בשתי פסים שונים לדוגמא) פועל כוח חיזוני ולשניהם אותו תזוזה  $\Delta k$  במרחב  $k$  אחרי פרק זמן מסויים, לעומת זאת לשניהם  $\Delta \epsilon$  שונה בגלל עקמומיות שונה של כל פס. נסביר זאת

ע"י מסה אפקטיבית שונה בכל פס:  $\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 \epsilon}{dk^2}$

**קירוב אלקטרונים בקשר החזק ושכנים הכי קרובים:**

יחס הדיספרסיה:  $\omega(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \left( E_s - \beta - \sum_{\vec{\delta} \in \text{Nearest neighbours}} \gamma(\vec{\delta}) \cos(\vec{k} \cdot \vec{\delta}) \right)$

$\beta = -\int d^3 r \Delta U(\vec{r}) |\phi(\vec{r})|^2 = \text{const}$  כאשר מתקיים:

- $\gamma(\vec{\delta}) = -\int d^3 r \phi^*(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}) \phi(\vec{r} - \vec{\delta})$
- $E_s$  היא האנרגיה של הרמה האטומית  $n$  עם אורביטל  $s$ .
- $\Delta U$  הפוטי שהאלקטרון מרגיש כתוצאה מהאטומים בגביש.
- ה-  $\delta$  של מיקומי השכנים הקרובים נקבע לפי הסריג האמיתי.
- $\phi(\vec{r}) = \phi(|\vec{r}|)$  עבור רמה  $s$  תלוי רק בגודל של  $\vec{r}$ .

לשים לב! לסימטריות של הבעיה ולתלות של  $\phi(\vec{r})$  ב-  $\vec{r}$  על מנת להקל

- על החישוב ע"י ביטול התלות של  $\gamma(\vec{\delta})$  ב-  $\vec{\delta}$  ובכך להוציא אותו מהסכימה, למשל במקרה של אורביטל  $s$ .
- עבור  $\gamma$  קטן יש פחות חפיפה בין  $\phi_s^\dagger(\vec{r} - \rho_m)$  &  $\phi_s(\vec{r})$ , כלומר האלקטרון קשור יותר חזק לאטום והמרחק בין האטומים גדול.

**מגנטיזציה**

$E = -\vec{\mu} \cdot \vec{B} = g \mu_B m B$   $\vec{\mu} = -g \mu_B \vec{J}$   $\mu_B = -\frac{q \hbar}{2mc}$   
 $s_p = 0.5 \rightarrow g \approx 2$

- $\vec{J}$  - תנע זוויתי כולל (ספין + תנע זוויתי).
- $\vec{J}$  - אופרטור תנע זוויתי ללא יחידות  $\hbar$ , כלומר:  $J_z |m\rangle = m |m\rangle$ .
- $(-g \mu_B)$  - מגנטיזציה אלקטרונים.

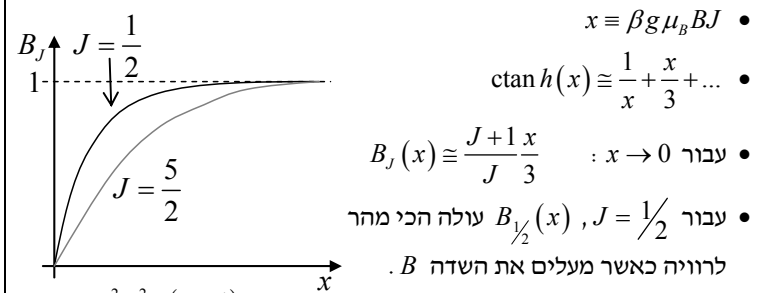
מגנטיזציה:  $M = N \sum_{m=-J}^J (-g \mu_B m P_m) = N \frac{\sum_{m=-J}^J (-g \mu_B m e^{-\beta g \mu_B m B})}{\sum_{m=-J}^J e^{-\beta g \mu_B m B}}$

- $P_m$  - ההסתברות למצב עם תנע זוויתי כולל  $m$ .

נעזר בקשר בין פ' החלוקה לאנרגיה החופשית:  $Z = e^{-\beta F} = \sum_{m=-J}^J e^{-\beta g \mu_B m B}$

לאחר עבודה, המגנטיזציה:  $M = -N \frac{\partial F}{\partial B} = N g \mu_B J B_J(\beta g \mu_B B J)$

פ' ברילואן:  $B_J(x) = \frac{2J+1}{2J} \text{ctanh}\left(\frac{2J+1}{2J} x\right) - \frac{1}{2J} \text{ctanh}\left(\frac{1}{2J} x\right)$



המגנטיזציה בגבול  $B \rightarrow 0$ :  $M = N \frac{g^2 \mu_B^2 J(J+1)}{3K_B T} B$

**סוספטביליות:**

$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} \Big|_{H \rightarrow 0} = \frac{C}{H = B/T}$   $C \equiv \frac{N \mu_{\text{eff}}^2}{3K_B}$   $\mu_{\text{eff}} = g \mu_B \sqrt{J(J+1)}$

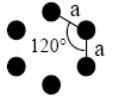
**הטמפ' הקריטית** בה הספינים מסתדרים מתקבלת ע"י הצבה של  $B$

$$m = \mu \langle S \rangle$$

**פתרונות של בעיות שונות**

1. קטור פרימיטיביים של **סריג הקסגוני** והסריג ההופכי לו.

$$\left. \begin{aligned} \vec{b}_1 &= \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left( \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{x} - \frac{1}{2} \hat{y} \right) & \vec{a}_1 &= a \left( \frac{1}{2} \hat{x} - \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{y} \right) \\ \vec{b}_3 &= \frac{2\pi}{c} \hat{z} & \vec{a}_3 &= c \hat{z} \\ \vec{b}_2 &= \frac{4\pi}{\sqrt{3}a} \left( \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{x} + \frac{1}{2} \hat{y} \right) & \vec{a}_2 &= a \left( \frac{1}{2} \hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{y} \right) \end{aligned} \right\} \text{ הרגיל: } , \text{ ההופכי:}$$



2. תיאור **מבנה כוורת** כשריג ברווה עם בסיס

$$\vec{a}_1 = a\sqrt{3}\hat{x}$$

וקטורי השריג:  $\vec{a}_2 = a \left( -\frac{\sqrt{3}}{2} \hat{x} + \frac{3}{2} \hat{y} \right)$ , וקטורי הבסיס:  $\vec{a}_1 = 0, \vec{a}_2 = a\hat{y}$

3. שרטוט **מישורי הסריג** ע"י אינדקסי מילר  $(h, k, l)$ :

$$a. (h, k, l) \rightarrow \left( \frac{1}{h}, \frac{1}{k}, \frac{1}{l} \right)$$

b. כופלים במספר הקטן ביותר על מנת לקבל לפחות קואורדינטה אחת שערכה 1, הנקודה שיצאה היא נקודות החיתוך עם הצירים.

4. בפיזור, כאשר מוצאים סריג הופכי נציג את  $\vec{G}$  בצורה של

$$\vec{G} = v_1 \hat{x} + v_2 \hat{y} + v_3 \hat{z}$$

ונדרוש תנאים על  $v_1, v_2, v_3$ . מתוך תנאים אלו נוכל למצוא ביתר קלות את כל הוקטורים שנותנים זווית פיזור מסויימת.

5. יחס הדיספרסיה של **שרשרת חד-מימדית חד-אטומית** עם מסה  $M$

$$\omega = 2\sqrt{\frac{\tilde{k}}{M}} \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right|$$

וקבוע כוח  $\tilde{k}$  ואורך תא היחידה  $a$ :

6. בשרשרת חד-מימדית וחד-אטומית עם **תנאי התחלה**, טריק נחמד:

$$\text{הכפלה ב-} \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{-ik'na}$$

שמוביל לסכימה של טור הנדסי, שימוש בקשר

$$\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N e^{i(k-k')na} = \delta_{k,k'} \quad m \in \mathbb{Z} \quad k - k' = \frac{2\pi}{Na} m$$

7. הפוטנציאל ויחס הדיספרסיה של **שרשרת חד-מימדית חד-אטומית** עם מסה  $M$  וקבוע כוח  $K_m$ , אורך תא היחידה  $a$  ועם  $N$  אטומים (גדול מאוד) בה לכל אטום יש אינטראקציה עם האטומים האחרים:

$$U = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N \frac{1}{2} K_m (u_n - u_{n+m})^2 \quad \omega = 2\sqrt{\frac{1}{M} \sum_{m=1}^N K_m \sin^2\left(\frac{mka}{2}\right)}$$

8. יחס הדיספרסיה ואמפליטודות של **שרשרת חד-מימדית דו-אטומית** עם מסות  $M_1, M_2$  וקבועי כוח  $k_1, k_2$  ואורך תא היחידה  $a$ :

$$\omega_{\pm}^2 = \frac{k_1 + k_2}{2\mu} \pm \frac{1}{2\mu} \sqrt{(k_1 + k_2)^2 - \frac{16k_1 k_2 \mu^2}{M_1 M_2} \sin^2\left(\frac{ka}{2}\right)}$$

$$\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_2} = -\frac{k_1 + k_2 e^{-ika}}{M_1 \omega^2 - k_1 - k_2} \quad \mu = \frac{M_1 M_2}{M_1 + M_2}$$

9. יחס הדיספרסיה של **סריג מלבני** המורכב מאטומים זהים בעלי מסה  $M$  עם מרחקים שונים,  $a$  בכיוון  $\hat{x}$  ו- $b$  בכיוון  $\hat{y}$ , וקבועי הכוח שונים לכל כיוון, עבור תנועה **בניצב** למישור הסריג (הקשר בין האטומים הוא

$$\omega = \sqrt{\frac{4}{M} \left[ k_1 \sin^2\left(\frac{k_x a}{2}\right) + k_2 \sin^2\left(\frac{k_y b}{2}\right) \right]}$$

רק בכיוונים של הצירים):

10. מטריצת העייע הוייע של **סריג דו-מימדי חד-אטומי** עם מסה  $M$  עם מרחק וקבוע הכוח זהים לכל כיוון, ו- $\vec{k}$  בהתאמה עבור תנועה במישור הסריג (הקשר בין האטומים הוא בכיוון הצירים וכמו כן באלכסון):

$$\mathbf{B} \equiv \begin{pmatrix} 2 - \cos(k_x a) - \cos(k_x a) \cos(k_y a) & \sin(k_x a) \sin(k_y a) \\ \sin(k_x a) \sin(k_y a) & 2 - \cos(k_y a) - \cos(k_x a) \cos(k_y a) \end{pmatrix}$$

$$\tilde{\omega}^2 \equiv \frac{M \omega^2}{2\tilde{k}} \Rightarrow (\mathbf{B} - \tilde{\omega}^2 \mathbf{I}) \begin{pmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_y \end{pmatrix} = 0$$

**משמעות הוייע והעייע:** הוייע יתנו כיוון אמפליטודת התנועה, והעייע יהיו ריבועי התדירויות של כל אופן תנועה בסיסי.

**קבועים וקשרים פיזיקליים**

$$m_{electron} = 9.11 \cdot 10^{-31} [Kg] \quad hc = 12,400 [A \cdot eV]$$

$$N_{Avogadro} = 6.022 \cdot 10^{23} [mole^{-1}] \quad \hbar = 1.054 \cdot 10^{-34} [J \cdot sec]$$

$$V_{One Cell} = a^3 = \frac{N \cdot (\text{Molar Weight})}{N_{Avogadro} \cdot \rho} \quad K_B = 1.3807 \cdot 10^{-23} [J / ^\circ K]$$

$$T = \frac{1}{f} = \frac{2\pi}{\omega} = \nu \quad \lambda = \frac{c}{\nu} = 2\pi \frac{c}{\omega}$$

**הערות חשובות**

1. **מסה מולרית:**  $M = \rho \cdot V_{(unit cell)} \cdot N_{avogadro}$

2. עבור פוט' מהצורה  $V = a\delta(x - x_0)$  מתקיים:

$$\Psi'(x_{0+}) - \Psi'(x_{0-}) = \frac{2ma}{\hbar^2} \Psi(x_0)$$

3. **צפיפות אופני התנודה הכוללת:**  $g(\omega) = \sum_{all\ branches} g_i(\omega)$

ומתקיים כי בכל ענף צפיפות תאי היחידה ליחידת נפח היא:  $n = \frac{N}{V_d}$

$$\text{כלומר מתקיים: } n = \int_{-\infty}^{\infty} g_i(\omega) d\omega$$

$$4. \text{ קיבול חום בטמפ' גבוהות: } C_V = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \left( \sum_{\substack{On\ all\ k \\ inside\ FBZ}} \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \right) = k_B \frac{N}{V_d}$$

5. **קיבול חום בטמפ' נמוכות,** הפונק'  $\frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial T}$  מרוכזת מאוד סביב הפוט' הכימי כלומר סביב  $\varepsilon_F$  ולכן מתקיים:

$$C_V = \int_0^{\infty} (\varepsilon - \varepsilon_F) g(\varepsilon) \frac{\partial f}{\partial T} d\varepsilon \cong g(\varepsilon) \int_0^{\infty} (\varepsilon - \varepsilon_F) \frac{\partial f}{\partial T} d\varepsilon$$

6. **בקירוב אלקטרוניים חופשיים** כשמחפשים אנרגיה בסביבה של נק'  $\vec{k}_1$

נגדיר  $\vec{k} = \vec{k}_1 + \vec{q}$  כאשר  $\vec{q}$  היא ההזזה. עבור פוט'  $\Delta$  שנובע מהמקורות,

$$\text{מתקיים } \left( \frac{q_i}{k_i} \right)^2 \ll \left( \frac{2m\Delta}{\hbar^2 k_i^2} \right)^2$$

ולכן נפתח האנרגיה לטור טיילור.

$$\left[ (\vec{M}^*)^{-1} \right]_{i,j} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial q_i \partial q_j}$$

7. **כשמחפשים מסה אפקטיבית** האנרגיה בנק'  $\vec{k}_0$  תשתנה מ-

$$\varepsilon_0 = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k}_0 - \vec{G}_i)$$

ל-  $\varepsilon_i = \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{k}_0 - \vec{G}_i)$  כאשר  $\vec{G}_i$  נקבעים ע"פ כיוון המסה האפקטיבית המבוקשת. מוצאים את האנרגיה לפי

$$\text{הנוסחה: } \varepsilon = \frac{1}{2} (\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \pm \sqrt{\frac{1}{4} (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + \Delta^2}$$

ההנחה כי  $\vec{k} \rightarrow 0$  ומכאן מוצאים המסה האפקטיבית כרגיל.

8. **"המקורות" התורמים לנייון ב-**  $\vec{k}_0$  הם וקטורי הסריג ההופכי הקרובים ביותר ל-  $\vec{k}_0$  כאשר אחד מהם נמצא באיזור ברילואן הראשון!

9. עבור פוט'  $V$ , ע"מ לקבל תנאי למערכת במנוחה נדרוש:  $\frac{\partial V}{\partial r} = 0$  ואילו

$$\text{קבוע הקפיץ הוא } 0 = \left. \frac{\partial^2 V}{\partial r^2} \right|_{r=a}$$

כאשר  $a$  נקודת מינימום של הפוטנציאל.

$$10. \text{ המגנטיזציה הממוצעת: } \langle m \rangle = \mu \langle S_z \rangle = \sum_k \mu_k S_z \text{Pr}_k = \frac{\sum_k \mu S_z e^{-\beta \varepsilon_k}}{\sum_k e^{-\beta \varepsilon_k}}$$

עבור  $H = -D \sum_i (S_z^i)^2 - \lambda \sum_{i,j=n.n.} S_z^i S_z^j$ , בקירוב השדה הממוצע כל

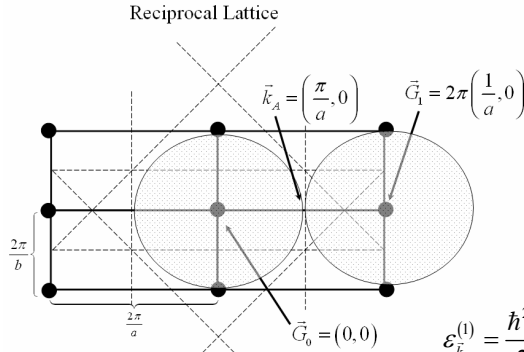
$$\text{ספין מרגיש שדה מגנטי משני הכיוונים, } B = 2 \frac{\lambda}{\mu} \langle S \rangle = 2 \frac{\lambda m}{\mu^2}$$

**11. אנרגיה וקיבול חום של SC עם ניוון באופני התנודה:**

$$E = \frac{3}{5} \pi^4 N K_B \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3 T \quad \left. \begin{array}{l} T \ll \theta_D \\ C_V \approx 234 N K_B \left( \frac{T}{\theta_D} \right)^3 \end{array} \right\} \quad \left. \begin{array}{l} E = 3 N K_B T \\ C_V = 3 N K_B \end{array} \right\} T \gg \theta_D$$

$$U_{\vec{G}} = \begin{cases} U_0/2 & ; \vec{G} \in \{\vec{G}_1, \vec{G}_2, \vec{G}_3, \vec{G}_4\} \\ 0 & ; \text{otherwise} \\ U_0/4 & ; \vec{G} \in \{\vec{G}_5, \vec{G}_6, \vec{G}_7, \vec{G}_8\} \end{cases}$$

מכאן שמקדמי פורייה הם



דרגת הניוון הראשון  
בנקודה  $\vec{k}_A$  היא: 2  
ווקטורי הסריג  
ההופכי המתאימים

$$\vec{G}_0 = (0,0)$$

$$\vec{G}_1 = 2\pi \left( \frac{1}{a}, 0 \right)$$

הם:

$$\vec{G}_1 = 2\pi \left( \frac{1}{a}, 0 \right)$$

אנרגיית הניוון היא:

$$\varepsilon_{\vec{k}_A}^{(1)} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{\pi}{a} \right)^2 \equiv \varepsilon_0$$

נציב במשוואות למקדמי הפיתוח לגלים מישוריים:

$$\vec{G}_0: (\varepsilon_{\vec{k}_A - \vec{G}_0}^0 - \varepsilon) C_{\vec{k}_A - \vec{G}_0} + U_{\vec{G}_0 - \vec{G}_0} C_{\vec{k}_A - \vec{G}_0} + U_{\vec{G}_1 - \vec{G}_0} C_{\vec{k}_A - \vec{G}_1} = 0$$

$$\vec{G}_1: (\varepsilon_{\vec{k}_A - \vec{G}_1}^0 - \varepsilon) C_{\vec{k}_A - \vec{G}_1} + U_{\vec{G}_0 - \vec{G}_1} C_{\vec{k}_A - \vec{G}_0} + U_{\vec{G}_1 - \vec{G}_1} C_{\vec{k}_A - \vec{G}_1} = 0$$

לאחר הצבה של הפרמטרים הידועים לנו, נקבל:

$$\begin{cases} (\varepsilon_0 - \varepsilon) C_{\vec{k}_A - \vec{G}_0} + \frac{1}{2} U_0 C_{\vec{k}_A - \vec{G}_1} = 0 \\ (\varepsilon_0 - \varepsilon) C_{\vec{k}_A - \vec{G}_1} + \frac{1}{2} U_0 C_{\vec{k}_A - \vec{G}_0} = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{pmatrix} \varepsilon_0 - \varepsilon & \frac{1}{2} U_0 \\ \frac{1}{2} U_0 & \varepsilon_0 - \varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{\vec{k}_A - \vec{G}_0} \\ C_{\vec{k}_A - \vec{G}_1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$(\varepsilon_0 - \varepsilon)^2 - \left( \frac{1}{2} U_0 \right)^2 = 0$$

מדישת התאפסות הדטרמיננטה נקבל:

$$\Rightarrow \varepsilon_{\pm} = \varepsilon_0 \pm \frac{1}{2} U_0$$

קיבלנו כי הפעלת הפוטנציאל הנייל מסירה ניוון ראשון בנק'  $\vec{k}_A$ .

16. עבור  $E = \Delta \cos(|k_x|a + |k_y|a)$ ,  $\Delta < 0$ , עם קבוע סריג  $a$ .

א. חומר מבודד - כשמספר המצבים שווה למספר ה-  $e^-$ :  $n(\omega) = \frac{2}{a^2}$

ב. עבור צפיפות אלקטרונים נתונה מחשבים אנרגיית פרמי מתוך  $n(\omega)$ .

$$\text{אם } n(\omega) = \frac{z}{32a^2} \text{ אז } \varepsilon_F = \Delta \cos\left(\sqrt{\frac{z}{2}} \frac{\pi}{4}\right)$$

ג. מתוך  $\varepsilon_F$  ניתן למצוא את  $|k_x| + |k_y|$

ד. בהינתן שדה חשמלי האלקטרונים המשתתפים בהולכה יזווז

ב-  $\vec{k}$  במשך זמן  $\tau$ . ע"מ למצוא המוליכות החשמלית מוצאים תחילה מהירות האלקטרונים. צפיפות האלקטרונים המשתתפים

$$\text{בהולכה היא: } n(\omega) = \frac{1}{(2\pi)^2} \cdot \frac{2}{\text{spin}} \cdot m \cdot (\Delta A)$$

שנותרו בהזזה ואילו  $\Delta A$  השטח של כל אחד. ולבסוף מחלצים

$$\text{המוליכות מהשיוויון: } j = -en_e \vec{v} = \vec{\sigma} \vec{E}$$

$$\text{במקרה שלנו: } \vec{v} = -\frac{a\Delta}{\hbar} \sin\left(\sqrt{\frac{z}{2}} \frac{\pi}{4}\right) (1,1), \text{ אם } \vec{E} = E \left( \frac{1,1}{\sqrt{2}} \right)$$

$$\sigma = -\frac{\sqrt{2z}\Delta e^2 \tau}{4\pi \hbar^2} \sin\left(\frac{\sqrt{z}\pi}{4\sqrt{2}}\right), n(\omega) = \frac{2 \cdot 2}{(2\pi)^2} \cdot \Delta k \left( \sqrt{2} \frac{\sqrt{z}\pi}{4\sqrt{2}a} \right)$$

17. סריג קובי פשוט בעל קבוע סריג  $a$ , ב-  $T = 0$  נתון שהוא פרומגנט.

יחס הדיספרסיה של המגנטונים:

$$\omega(\vec{k}) = \frac{4JS}{\hbar} (3 - \cos(k_x a) - \cos(k_y a) - \cos(k_z a)) \approx \frac{2JSa^2}{\hbar} k^2$$

$$N_m = \frac{V}{6\pi^2} \left( \frac{\varepsilon}{2JSa^2} \right)^{3/2} \Rightarrow N_m = 0.0587 N_{at} \left( \frac{K_B T}{2JS} \right)^{3/2}$$

12. קיבול חום של אלקטרונים ב-SC:

13. טנזור המוליכות החשמלית וההתנגדות החשמלית של מתכת בשדה א"מ בתדירות  $\omega$  בנוכחות שדה מגנטי קבוע  $\vec{H} = H_0 \hat{z}$ :

$$\vec{\rho} = \rho_0 \begin{pmatrix} 1 - i\omega\tau & \omega_c\tau & 0 \\ -\omega_c\tau & 1 - i\omega\tau & 0 \\ 0 & 0 & 1 - i\omega\tau \end{pmatrix} \quad \begin{cases} \vec{E}(t) = \vec{E}(\omega) e^{-i\omega t} \\ \vec{p}(t) = \vec{p}(\omega) e^{-i\omega t} \end{cases}$$

$$\vec{\sigma} = \sigma_0 \begin{pmatrix} \frac{1 - i\omega\tau}{(1 - i\omega\tau)^2 + (\omega_c\tau)^2} & \frac{-\omega_c\tau}{(1 - i\omega\tau)^2 + (\omega_c\tau)^2} & 0 \\ \frac{\omega_c\tau}{(1 - i\omega\tau)^2 + (\omega_c\tau)^2} & \frac{1 - i\omega\tau}{(1 - i\omega\tau)^2 + (\omega_c\tau)^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{1 - i\omega\tau} \end{pmatrix}$$

14. פוט' מחזורי של פוני'  $\delta$ :  $u(x) = U_{00} b_0 \sum_s \delta(x - sa)$   $aA = U_{00} b_0$

ניתן לומר כי  $u(x) = 2 \sum_{G>0} u_G \cos(Gx)$  כאשר  $n \in \mathbb{Z}$   $G = \frac{2\pi}{a} n$

נשווה בין הפוט' ונקבל  $u_G = A$  נגדיר כעת  $f(k) \equiv \sum_n C \left( k - \frac{2\pi}{a} n \right)$

עבור  $f(q)$  מתקיים  $f(q) = f\left(q - \frac{2\pi}{a} l\right)$   $l \in \mathbb{Z}$

$$C\left(q - \frac{2\pi}{a} l\right) = \frac{2mAf(q)}{2mE - \hbar^2 \left(q - \frac{2\pi}{a} l\right)^2}$$

נסכום על  $l$  משני האגפים (חישוב הדטרמיננטה האינסופית) ונקבל את

$$\text{יחס הדיספרסיה } \frac{\hbar^2}{2mA} = \sum_l \frac{1}{\frac{2mE}{\hbar^2} - \left(q - \frac{2\pi}{a} l\right)^2}$$

$$\cos(qa) - \cos(ka) = \frac{mu_{00} b_0 a \sin(ka)}{\hbar^2 ka} = P \frac{\sin(ka)}{ka}$$

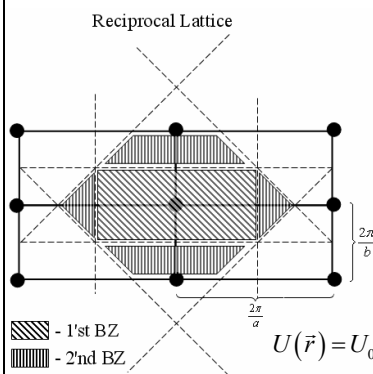
15. דוגמא מש.ב.11 וקטורי הסריג

$$\vec{a} = (a, 0) ; \vec{b} = (b, 0)$$

נמצא את וקטורי הסריג ההופכי:

$$\vec{A} \cdot \vec{a} = 2\pi \Rightarrow \begin{cases} \vec{A} = 2\pi/a \\ \vec{B} = 2\pi/b = \pi/a \end{cases}$$

להלן שרטוט של הסריג ההופכי ושל שני איזורי הברילואן הראשונים. הפוטנציאל נתון ע"י:



$$U(\vec{r}) = U_0 \left[ \cos\left(\frac{2\pi}{a} x\right) + 1 \right] \left[ \cos\left(\frac{2\pi}{b} y\right) + 1 \right] - U_0$$

אחרי עבודה על הפוטנציאל נקבל:

$$U(\vec{r}) = \frac{U_0}{2} \left( e^{i\frac{2\pi}{a} x} + e^{-i\frac{2\pi}{a} x} + e^{i\frac{2\pi}{b} y} + e^{-i\frac{2\pi}{b} y} \right) + \frac{U_0}{4} \left( e^{i2\pi \left(\frac{x}{a} + \frac{y}{b}\right)} + e^{-i2\pi \left(\frac{x}{a} + \frac{y}{b}\right)} + e^{i2\pi \left(\frac{x}{a} - \frac{y}{b}\right)} + e^{-i2\pi \left(\frac{x}{a} - \frac{y}{b}\right)} \right)$$

קיבלנו הצגה מהצורה  $U(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} U_{\vec{G}} e^{i\vec{G} \cdot \vec{r}}$  כאשר  $\vec{G} = h\vec{A} + k\vec{B} = 2\pi \left( \frac{h}{a}, \frac{k}{b} \right)$

$$\vec{G}_1 \equiv 2\pi \left( \frac{1}{a}, 0 \right) ; \vec{G}_3 \equiv 2\pi \left( 0, \frac{1}{b} \right) ; \vec{G}_5 \equiv 2\pi \left( \frac{1}{a}, \frac{1}{b} \right) ; \vec{G}_7 \equiv 2\pi \left( \frac{1}{a}, -\frac{1}{b} \right)$$

נסמן:

$$\vec{G}_2 \equiv 2\pi \left( -\frac{1}{a}, 0 \right) ; \vec{G}_4 \equiv 2\pi \left( 0, -\frac{1}{b} \right) ; \vec{G}_6 \equiv -2\pi \left( \frac{1}{a}, \frac{1}{b} \right) ; \vec{G}_8 \equiv 2\pi \left( -\frac{1}{a}, \frac{1}{b} \right)$$



**נספח מתמטי**

נגזרות של פונקציות החלוקה השונות:

$$\frac{\partial f_{BE}}{\partial T} = \frac{e^{\beta \hbar \omega} \hbar \omega}{(e^{\beta \hbar \omega} - 1)^2} \frac{1}{K_B T^2} \quad \frac{\partial f_{FD}}{\partial T} = \frac{e^{\beta(\epsilon - \mu)} (\epsilon - \mu)}{(e^{\beta(\epsilon - \mu)} + 1)^2} \frac{1}{K_B T^2}$$

$$(A^{-1})_{ij} = \frac{1}{\det A} (-1)^{i+j} M_{ji} \quad M_{ji} = \text{Minor Of } A_{ji}$$

מטריצה הופכית:

$$A = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \Rightarrow A^{-1} = \frac{1}{\det A} \begin{pmatrix} a & -c \\ -b & d \end{pmatrix}$$

הזווית בין שני וקטורים כלשהם:  $\cos \gamma = \cos \theta_0 \cos \theta + \sin \theta_0 \sin \theta \cos(\varphi - \varphi_0)$

פונקציה גאומטרי מוכללת עבור  $a > 0$  כלשהו:  $\Gamma(n+1) = a^{n+1} \int_0^\infty t^n e^{-at} dt$

$$\Gamma(n+1) = n! \quad \Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right) = \frac{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2n-1)}{2^n} \sqrt{\pi}$$

זהויות מעולם המרכיבות:  $|r_1 e^{i\alpha} - r_2 e^{i\beta}|^2 = r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 \cos(\alpha - \beta)$

$$\sin(ix) = i \sinh(x) \quad \cos(ix) = \cosh(x)$$

הגדרת התמרת פורייה:  $F(\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty f(x) e^{-i\omega x} dx$

פונקציה	התמרת פורייה	פונקציה	התמרת פורייה
$f_a(x) = \begin{cases} 1 &  x  \leq a \\ 0 &  x  > a \end{cases}$	$\frac{1}{\pi} \frac{\sin(a\omega)}{\omega}$	$f(ax+b) \begin{cases} a, b \in \mathbb{R} \\ a \neq 0 \end{cases}$	$\frac{1}{ a } e^{i\frac{ab}{a}} F\left(\frac{\omega}{a}\right)$
$g_a(x) = \begin{cases} 1 - \frac{ x }{a} &  x  \leq a \\ 0 &  x  > a \end{cases}$	$\frac{2 \sin^2\left(\frac{a\omega}{2}\right)}{\pi a \omega^2}$	$e^{icx} f(x) \quad c \in \mathbb{R}$	$F(\omega - c)$
$e^{- x }$	$\frac{1}{\pi(\omega^2 + 1)}$	$f^{(n)}(x)$	$(i\omega)^n F(\omega)$
$e^{-\frac{x^2}{a^2}}$	$\frac{a}{2\sqrt{\pi}} e^{-\frac{a^2 \omega^2}{4}}$	$x^n f(x)$	$i^n \frac{d^n}{d\omega^n} F(\omega)$

עבור  $f(x)$  זוגית ו- $n$  אי זוגי:

$$\int_0^\infty x^n \sin(\omega x) f(x) dx = \frac{1}{2i} \int_{-\infty}^\infty x^n e^{i\omega x} f(x) dx = \frac{\pi}{i} \left(i \frac{d}{d\omega}\right)^n F(-\omega)$$

$$\frac{1}{V} \int_{p.c.u} \text{Const} \cdot e^{-i\vec{G} \cdot \vec{r}} d\vec{r} = \text{Const} \cdot \delta_{\vec{G}, \vec{0}}$$

סכומי טורים:

$$\sum_{l=0}^L (-1)^l (2l+1) = (-1)^L (L+1)$$

$$\sum_{n=A}^B a_n = \frac{(B-A+1)(a_A + a_B)}{2}$$

$$\sum_{n=A}^B q^n = q^A \left(\frac{1-q^{B-A+1}}{1-q}\right)$$

אינטגרל חשוב מטורי פוריה:  $2 \int_0^a \cos(Gx) \cos(G'x) dx = a \delta(m - m')$

$$\sum_0^\infty e^{-\frac{sh\omega}{\tau}} = \sum_0^\infty x^s = \frac{1}{1-x} \quad x = e^{-\frac{h\omega}{\tau}} < 1$$

טורים חשובים:

$$\sum_0^\infty s x^s = x \frac{d}{dx} \left(\sum_0^\infty x^s\right) = \frac{x}{(1-x)^2}$$

**קומבינטוריקה**

1. מספר האפשרויות בהן ניתן לסדר  $n$  איברים שונים בשורה הוא  $n!$

2. מספר האפשרויות בהן ניתן לסדר  $n$  איברים שונים במעגל הוא  $(n-1)!$

3. מספר האפשרויות בהן ניתן לסדר  $n$  איברים שונים בשורה שמתוכם  $n_1$  איברים זהים מסוג אחד,  $n_2$  איברים זהים מסוג שני וכו' כאשר

$$P_n = \frac{n!}{n_1! n_2! \dots n_k!} \quad \text{הוא } n_1 + n_2 + \dots + n_k = n$$

4. מספר האפשרויות לבחור  $k$  איברים מתוך  $n$  איברים שונים כאשר אין חשיבות לסדר וללא פרמוטציות הוא  $C_n^k = \frac{n!}{k!(n-k)!}$

5. מספר האפשרויות לבחור  $k$  איברים מתוך  $n$  איברים שונים כאשר אין חשיבות לסדר ויש פרמוטציות הוא  $C_n^k = \frac{(n+k-1)!}{k!(n-1)!}$

6. מספר האפשרויות לבחור  $k$  איברים מתוך  $n$  איברים שונים כאשר יש חשיבות לסדר ויש פרמוטציות הוא  $n^k$ .

7. מספר האפשרויות לבחור  $k$  איברים מתוך  $n$  איברים שונים כאשר יש חשיבות לסדר ואין פרמוטציות הוא  $A_k^n = \frac{n!}{(n-k)!}$

**Trigonometric Identities:**  $\left| \int_\beta^\alpha e^{icx} dx \right|^2 = \frac{1}{c^2} |e^{ic\alpha} - e^{ic\beta}|^2 = \frac{4}{c^2} \sin^2\left(\frac{c(\alpha - \beta)}{2}\right)$

$\sin(-\alpha) = -\sin \alpha$	$\tan(2\alpha) = 2 \tan \alpha / (1 - \tan^2 \alpha)$
$\cos(-\alpha) = \cos \alpha$	$\sin(3\alpha) = 3 \sin \alpha - 4 \sin^3 \alpha$
$\tan(-\alpha) = -\tan \alpha$	$\cos(3\alpha) = 4 \cos^3 \alpha - 3 \cos \alpha$
$\sin(90 - \alpha) = \cos \alpha$	$\sin \alpha + \sin \beta = 2 \sin(a/2 + \beta/2) \cos(a/2 - \beta/2)$
$\cos(90 - \alpha) = \sin \alpha$	$\sin \alpha - \sin \beta = 2 \sin(a/2 - \beta/2) \cos(a/2 + \beta/2)$
$\tan(90 - \alpha) = \cot \alpha$	$\cos \alpha + \cos \beta = 2 \cos(a/2 + \beta/2) \cos(a/2 - \beta/2)$
$\cot(90 - \alpha) = \tan \alpha$	$\cos \alpha - \cos \beta = -2 \sin(a/2 + \beta/2) \sin(a/2 - \beta/2)$
$\sin(180 - \alpha) = \sin \alpha$	$\sin \alpha \cos \beta = 1/2 (\sin(a + \beta) + \sin(a - \beta))$
$\cos(180 - \alpha) = -\cos \alpha$	$\sin \alpha \sin \beta = 1/2 (\cos(a - \beta) - \cos(a + \beta))$
$\tan(180 - \alpha) = -\tan \alpha$	$\cos \alpha \cos \beta = 1/2 (\cos(a + \beta) + \cos(a - \beta))$
$\sin^2 \alpha + \cos^2 \alpha = 1$	$\sin(\alpha + \beta) = \sin \alpha \cos \beta + \cos \alpha \sin \beta$
$1 + \tan^2 \alpha = 1 / \cos^2 \alpha$	$\sin(\alpha - \beta) = \sin \alpha \cos \beta - \cos \alpha \sin \beta$
$1 + \cot^2 \alpha = 1 / \sin^2 \alpha$	$\cos(\alpha + \beta) = \cos \alpha \cos \beta - \sin \alpha \sin \beta$
$\sin(2\alpha) = 2 \sin \alpha \cos \alpha$	$\cos(\alpha - \beta) = \cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta$
$\cos(2\alpha) = \cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha$	$\tan(\alpha + \beta) = (\tan \alpha + \tan \beta) / (1 - \tan \alpha \tan \beta)$
$\cos(2\alpha) = 2 \cos^2 \alpha - 1$	$\tan(\alpha - \beta) = (\tan \alpha - \tan \beta) / (1 + \tan \alpha \tan \beta)$
$\cos(2\alpha) = 1 - 2 \sin^2 \alpha$	$\tan(\alpha + \beta) - \tan \alpha - \tan \beta = \tan(\alpha + \beta) \tan \alpha \tan \beta$
$a \operatorname{resin} \alpha + \arccos \alpha = \pi / 2$	$\sin^2 \alpha = \tan^2 \alpha / (1 + \tan^2 \alpha)$