

Θέμα 1: Σε μονοδιάστατο νανοκαλώδιο ομοίων ατόμων με $\zeta = 1$, η σχέση ενέργειας-κυματανύσματος για τα ηλεκτρόνια είναι $E(k) = A \sin^2(\beta k)$, όπου A, β είναι σταθερές. Υπολογίστε (α) την ενεργό μάζα του ηλεκτρονίου (β) την ενέργεια Φέρμι και (γ) την πυκνότητα καταστάσεων.

Θέμα 2: Σε μονοδιάστατο νανοκαλώδιο ομοίων ατόμων με ατομικό βάρος $A = 100 \text{ g/mol}$, απόσταση γειτόνικών ατόμων $d = 1 \text{ \AA}$, σταθερά ελατηρίου $\kappa = 10 \text{ N/m}$, υπολογίστε την ταχύτητα του ήχου, c .

Θέμα 3: Στο παραπάνω νανοκαλώδιο, υπολογίστε την ενεργό μάζα των φωνονίων στο όριο $q \approx \frac{\pi}{2d} + k$, όπου $0 < k \ll \frac{\pi}{2d}$.

Ατομικές μονάδες:

$$\alpha_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0.529 \text{ \AA}, \quad E_0 = \frac{\hbar^2}{ma_B^2} = 27.211 \text{ eV}, \quad u_0 = \sqrt{\frac{E_0}{m}} = 2187.77 \text{ km/s},$$

$$\omega_0 = \frac{2\pi u_0}{\alpha_B} = 2.60 \times 10^{17} \text{ Hz}, \quad P_0 = \frac{E_0}{a_B^3} = 29421 \text{ GPa}, \quad T_0 = \frac{E_0}{k_B} = 315773 \text{ K},$$

Σταθερές:

$$R = 8.3145 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}, \quad m_e = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}, \quad e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C},$$

$$\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ J s}, \quad c = 3.00 \times 10^8 \text{ m/s}, \quad N_A = 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1},$$

$$1 \text{ cal} = 4.18 \text{ J}, \quad \epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{ F/m}, \quad k_B = 1.381 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1},$$

$$m_p = 1836.2m_e, \quad hc = 12398 \text{ eV \AA}, \quad k_B^{-1} = 11605 \text{ K/eV}.$$

Αναπτύγματα Taylor:

$$\sin x \approx x - \frac{x^3}{3!} + \dots \quad \cos x \approx 1 - \frac{x^2}{2!} + \dots \quad (1+x)^a \approx 1 + \alpha x + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2!}x^2 + \dots$$

$$f(x+x_0) = f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + \frac{1}{2!}f''(x_0)(x-x_0)^2 + \dots$$

Θέμα 1: Σε κάποιο μονοδιάστατο νανοκαλώδιο ομοίων ατόμων, η σχέση μεταξύ συχνότητας φωνονίου-κυματανύσματος είναι $\omega = A\sqrt{1 - \cos(\beta q)}$, όπου A, β είναι σταθερές. Υπολογίστε (α) την ταχύτητα του ήχου και (β) την πυκνότητα καταστάσεων φωνονίων.

Θέμα 2: Σε μονοδιάστατο νανοκαλώδιο ομοίων ατόμων με $\zeta = 1$ δίνονται οι παράμετροι LCAO $\epsilon = -3.4$ eV και $V_2 = -0.7$ eV και η απόσταση γειτονικών ατόμων $a = 1.8$ Å. Βρείτε (α) την ενεργό μάζα του ηλεκτρονίου (β) την μέγιστη και την ελάχιστη ενέργεια που μπορεί να έχει ένα ηλεκτρόνιο σε θερμοκρασία $T = 0$.

Θέμα 3: Στο παραπάνω νανοκαλώδιο, υπολογίστε την μέση ενέργεια των ηλεκτρονίων σε θερμοκρασία μηδέν.

Ατομικές μονάδες:

$$\alpha_B = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0.529 \text{ \AA}, \quad E_0 = \frac{\hbar^2}{ma_B^2} = 27.211 \text{ eV}, \quad u_0 = \sqrt{\frac{E_0}{m}} = 2187.77 \text{ km/s},$$

$$\omega_0 = \frac{2\pi u_0}{a_B} = 2.60 \times 10^{17} \text{ Hz}, \quad P_0 = \frac{E_0}{a_B^3} = 29421 \text{ GPa}, \quad T_0 = \frac{E_0}{k_B} = 315773 \text{ K},$$

Σταθερές:

$$R = 8.3145 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}, \quad m_e = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}, \quad e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C},$$

$$\hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ J s}, \quad c = 3.00 \times 10^8 \text{ m/s}, \quad N_A = 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1},$$

$$1 \text{ cal} = 4.18 \text{ J}, \quad \epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-12} \text{ F/m}, \quad k_B = 1.381 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1},$$

$$m_p = 1836.2m_e, \quad hc = 12398 \text{ eV \AA}, \quad k_B^{-1} = 11605 \text{ K/eV}.$$

Αναπτύγματα Taylor για $x \ll 1$:

$$\sin x \approx x - \frac{x^3}{3!} + \dots \quad \cos x \approx 1 - \frac{x^2}{2!} + \dots \quad (1+x)^a \approx 1 + \alpha x + \frac{\alpha(\alpha-1)}{2!}x^2 + \dots$$

$$f(x+x_0) = f(x_0) + f'(x_0)(x-x_0) + \frac{1}{2!}f''(x_0)(x-x_0)^2 + \dots$$