ETY 305, 5ο διαγωνισμα, 15/12/2014 ωρα 9-10 (συνολο μοναδων=13)
Όνομα, Επώνυμο και ΑΜ:

Σε νανοκαλώδιο με N_i άτομα σε ευθεία γραμμή, υπολογίστε στο SI τα εξής:

(1) Την μέγιστη συχνότητα ταλάντωσης των ατόμων στο μοντέλο ελατηρίων Hooke .
(2) Τον κυματάριθμο Debye και τον κυματάριθμο Fermi.
(3) Την ταχύτητα του ήχου.
(4) Την μέγιστη ενέργεια φωνονίου, ϵ_0, στο μοντέλο ελατηρίων Hooke.
(5) Την μέγιστη ενέργεια φωνονίου, ϵ_D, στο μοντέλο Debye.
(6) Την μέση ενέργεια φωνονίων, $K_\phi = \dfrac{1}{2N_i}\displaystyle\int_0^{\epsilon_{\max}} \epsilon\phi(\epsilon)d\epsilon$ στο μοντέλο ελατηρίων Hooke.
(7) Την ίδια ποσότητα, K_ϕ, στο μοντέλο Debye.
(8) Την ίδια ποσότητα, K_ϕ, στο μοντέλο Einstein.
(9) Την διαφορά $E_F - E_{\min}$ στο μοντέλλο ελευθέρων ηλεκτρονίων (Jellium).
(10) Την διαφορά $E_F - E_{\min}$ Fermi στο μοντέλλο LCAO.
(11) Την ενεργό μάζα των ηλεκτρονίων στο μοντέλο LCAO.
(12) Την μέση ενέργεια ηλεκτρονίων, $K_e = \dfrac{2}{N}\displaystyle\int_{E_{\min}}^{E_F} E\rho(E)dE - E_{min}$, στο μοντέλο Jellium.
(13) Την ίδια ποσότητα, K_e, στο μοντέλο LCAO.

Πλεγματική σταθερά, $a = 3.66 \times 10^{-10}$ m.	Μάζα ατόμου, $m_i = 3.82 \times 10^{-23}$ kg.
Σθένος, $\zeta = 1$.	Σταθερά ελατηρίων Hooke, $\kappa = 17.0$ N/m.
Παράμετρος LCAO, $\varepsilon = -8.22 \times 10^{-19}$ J.	Παράμετρος LCAO, $V_2 = -5.96 \times 10^{-20}$ J.
$\hbar = 1.05 \times 10^{-34}$ J s	Μάζα ηλεκτρονίου, $m = 9.1 \times 10^{-31}$ kgr.
Φορτιο ηλεκτρονίου, $e = 1.6 \times 10^{-19}$ C.	Πυκνότητες καταστάσεων:
Hooke: $\phi(\epsilon) = \frac{2N_i}{\pi\epsilon_0}\frac{1}{\sqrt{1-\epsilon^2/\epsilon_0^2}}, \quad 0 \le \epsilon \le \epsilon_0$,	Debye: $\phi(\epsilon) = \frac{2N_i}{\pi\epsilon_0}, \quad 0 \le \epsilon \le \epsilon_D$,
Einstein: $\phi(\epsilon) = N_i\delta(\epsilon - \epsilon_0)$,	Jellium: $\rho(E) = \frac{N}{4\sqrt{E_F E}}, \quad E \ge 0, \quad E_{\min} = 0$,
LCAO: $\rho(E) = \frac{N}{\pi}\frac{1}{\sqrt{4V_2^2-(E-\varepsilon)^2}}, \quad \varepsilon + 2V_2 \le E \le \varepsilon - 2V_2, \quad E_{\min} = \varepsilon + 2V_2$.	

ETY 305, 5ο διαγωνισμα, 15/12/2014

Λύσεις:

(1) $\omega_{max} = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m_i}} = 1.33$ THz.

(2) $q_D = \frac{\pi}{a} = 8.6 \times 10^9 \text{ m}^{-1}, \quad k_F = \frac{\pi}{2a} = \frac{1}{2} q_D = 4.3 \times 10^9 \text{ m}^{-1}$.

(3) $c = a\sqrt{\frac{\kappa}{m_i}}$ =244 m/s.

(4) $\epsilon_0 = \hbar\omega_{max} = 1.40 \times 10^{-22}$ J.

(5) $\epsilon_D = \hbar c q_D = \frac{\pi}{2}\epsilon_0 = 2.20 \times 10^{-22}$ J.

(6) $K_\phi = \dfrac{1}{2N_i}\displaystyle\int_0^{\epsilon_0} \epsilon \frac{2N_i}{\pi\epsilon_0}\frac{1}{\sqrt{1-\epsilon^2/\epsilon_0^2}} d\epsilon = \frac{1}{\pi\epsilon_0}\int_0^{\epsilon_0}\frac{\epsilon d\epsilon}{\sqrt{1-\epsilon^2/\epsilon_0^2}}$. Θέτω $1-\epsilon^2/\epsilon_0^2 = x \Rightarrow$ $-2\epsilon/\epsilon_0^2 d\epsilon = dx \Rightarrow \epsilon d\epsilon = -\frac{1}{2}\epsilon_0^2 dx$, επομένως $K_\phi = -\dfrac{\epsilon_0}{2\pi}\displaystyle\int_1^0 \frac{dx}{\sqrt{x}} = -\frac{\epsilon_0}{2\pi}\left(-\frac{1}{2}\right) = \frac{\epsilon_0}{\pi} \Rightarrow$ $K_\phi = 4.5 \times 10^{-23}$ J.

(7) $K_\phi = \dfrac{1}{2N_i}\displaystyle\int_0^{\epsilon_D} \epsilon\frac{N_i}{\epsilon_D} d\epsilon = \frac{1}{2\epsilon_D}\frac{\epsilon_D^2}{2} = \frac{\epsilon_D}{4} \Rightarrow K_\phi = 5.5 \times 10^{-23}$ J.

(8) $K_\phi = \dfrac{1}{2N_i}\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} \epsilon N_i \delta(\epsilon-\epsilon_0) d\epsilon = \frac{1}{2}\epsilon_0 \Rightarrow K_\phi = 7.0 \times 10^{-23}$ J.

(9) $E_F - E_{min} = \dfrac{\hbar^2 k_F^2}{2m} - 0 = 1.12 \times 10^{-19}$ J.

(10) $E_F - E_{min} = \varepsilon + 2V_2\cos(k_F a) - (\varepsilon + 2V_2) = 2V_2(\cos(k_F a) - 1) = 2V_2(\cos\dfrac{\pi}{2} - 1) =$ $-2V_2 = 1.19 \times 10^{-19}$ J.

(11) $-V_2 k^2 a^2 = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m_*} \Rightarrow m_* = -\dfrac{\hbar^2}{2V_2 a^2} = 7.64 \times 10^{-31}$ kg.

(12) $K_e = \dfrac{2}{N}\displaystyle\int_0^{E_F} E\frac{N}{4\sqrt{E_F E}} dE - 0 = \frac{1}{2\sqrt{E_F}}\int_0^{E_F}\sqrt{E}dE = \frac{1}{2\sqrt{E_F}}\frac{2}{3}E_F^{3/2} = \frac{1}{3}E_F =$ 3.73×10^{-20} J.

(13) $K_e = \dfrac{2}{N}\displaystyle\int_{\varepsilon+2V_2}^{\varepsilon} E\frac{N}{\pi}\frac{1}{\sqrt{4V_2^2 - (E-\varepsilon)^2}} dE - (\varepsilon + 2V_2)$.

Θέτω $E = \varepsilon + 2V_2\cos x \Rightarrow dE = -2V_2 \sin x dx, \quad$ και

$\sqrt{4V_2^2 - (E-\varepsilon)^2} = 2|V_2|\sin x = -2V_2 \sin x$

και τα όρια γίνονται: $\varepsilon + 2V_2 = \varepsilon + 2V_2\cos x \Rightarrow \cos x = 1 \Rightarrow x = 0$

και $\varepsilon = \varepsilon + 2V_2\cos x \Rightarrow \cos x = 0 \Rightarrow x = \pi/2$ Επομένως

$$K_e = \frac{2}{\pi}\int_0^{\pi/2}\frac{\varepsilon + 2V_2\cos x}{(-2V_2)\sin x}(-2V_2)\sin x dx - \varepsilon - 2V_2 =$$

$$\frac{2\varepsilon}{\pi}\int_0^{\pi/2} dx + \frac{4V_2}{\pi}\int_0^{\pi/2}\cos x dx - \varepsilon - 2V_2 = \varepsilon + \frac{4V_2}{\pi} - \varepsilon - 2V_2 = \left(\frac{2}{\pi} - 1\right)2V_2 \Rightarrow$$

$K_e = 4.33 \times 10^{-20}$ J.