Θεωρία Υλικών, 11/2/2011

Θέμα 1 (2.5)

Για τα στοιχειακό μέταλλο Al δίνεται ότι η πυκνότητα είναι $\rho_M = 2.7$ g/cm^3 και το ατομικό του βάρος 26.98. Η ηλεκτρονική δομή του ατόμου του Al είναι $[Ne]3s^2p^1$.

α) Να βρεθεί ο ατομικός όγκος, V_a, για το υλικό αυτό (όγκος ανά άτομο).

β) Θεωρείστε την ακτίνα r_a μιας νοητής σφαίρας που έχει όγκο

$$V_a = \frac{4\pi}{3} r_a^3.$$

Η ποσότητα r_a είναι μια προσεγγιστική "ατομική ακτίνα" στα στερεά. Να βρεθεί η τιμή της για το Al στο ατομικό σύστημα μονάδων.

γ) Υπολογίστε τη μέγιστη και τη μέση κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων στα μέταλλα (μοντέλο ελευθέρων ηλεκτρονίων στις 3 διαστάσεις) σε μηδενική θερμοκρασία. Τι τιμές έχουν αυτές για το Al;

δ) Εκτιμήστε την ενέργεια συνοχής των στερεών σαν συνάρτηση της ατομικής τους ακτίνας και βρείτε την τιμή της για το Al.

Θέμα 2 (2.5)

Ηλεκτρόνιο βρίσκεται εγκλωβισμένο σε κβαντική τελεία σχήματος ορθογωνίου παραλληλεπιπέδου με πλευρές L_x, L_y, L_z.

(α) Αποδείξτε ότι η κίνησή του περιγράφεται από τρεις θετικούς ακεραίους κβαντικούς αριθμούς n_x, n_y, n_z και ότι

$$\Psi_{n_x n_y n_z}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\frac{n_x \pi x}{L_x} \sin\frac{n_y \pi y}{L_y} \sin\frac{n_z \pi z}{L_z}.$$

Πόση είναι η ενέργεια του ηλεκτρονίου σε αυτήν την κατάσταση;

(β) Το ηλεκτρόνιο είναι αρχικά στη θεμελιώδη του στάθμη, Ψ_{111} ($n_x = n_y = n_z = 1$), και φωτίζεται με φώς που έχει ηλεκτρικό πεδίο παράλληλο στον άξονα x. Η πιθανότητα να διεγερθεί το ηλεκτρόνιο σε μια τυχούσα στάθμη $\Psi_{n_x n_y n_z}$ ισούται με

$$P = c|\langle n_x n_y n_z | x | 111\rangle|^2,$$

όπου c σταθερά. Αποδείξτε ότι οι μόνες μεταβάσεις που είναι δυνατές (δηλ. $P \neq 0$) είναι προς στάθμες με κβαντικούς αριθμούς $n_y = n_z = 1$ και $n_x =$ άρτιος.

Υπόδειξη: $\sin x = (e^{ix} - e^{-ix})/2i$.

Θέμα 3 (1.5)

Να βρεθεί προσεγγιστικά έκφραση για την διηλεκτρική συνάρτηση $\epsilon(\omega)$ των μετάλλων με συγκέντρωση ηλεκτρονίων n στο όριο μεγάλου μήκους κύματος. Σαν αφετηρία, μπορεί να χρησιμοποιηθεί η κλασική εξίσωση κίνησης ενός ελεύθερου ηλεκτρονίου σε ηλεκτρικό πεδίο συχνότητας ω. Υπενθυμίζεται ότι

$$\epsilon(\omega) = \frac{D(\omega)}{E(\omega)} = 1 + 4\pi\frac{P(\omega)}{E(\omega)}$$

όπου $P = -nex$ (x η μετατόπιση).

Θέμα 4 (3.5)
Ένα σύστημα δυο σωματιδίων περιγράφεται από την Χαμιλτονιανή

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + V(|\mathbf{r_2} - \mathbf{r_1}|).$$

(α) Δείξτε ότι ο μετασχηματισμός

$$\mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2,$$
$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \qquad \mathbf{p} = \frac{m_2\mathbf{p}_1 - m_1\mathbf{p}_2}{m1 + m2}$$

είναι κανονικός, δηλαδή οι νέες μεταβλητές έχουν ίδιες μεταθετικές σχέσεις με τις παλιές:

$$[\mathbf{R}, \mathbf{P}] = [\mathbf{r}, \mathbf{p}] = i\hbar \quad \text{και} \quad [\mathbf{R}, \mathbf{r}] = [\mathbf{P}, \mathbf{p}] = 0.$$

Επιπλέον, με τον μετασχηματισμό αυτό η $\mathcal{H}$ αποκτά όμοια μορφή αλλά περιγράφει πλέον δυο ανεξάρτητα σωματίδια: ένα ελεύθερο μάζας $M = m_1 + m_2$ και ένα άλλο, μάζας $\mu = m_1 m_2/M$ το οποίο κινείται υπό την επίδραση του κεντρικού δυναμικού $V(r)$, όπου $r = |\mathbf{r}|$.

(β) Το μόριο του HCl μπορεί να περιγραφεί σαν δυο μάζες που συνδέονται με ελατήριο με μήκος ισορροπίας $d = 1.28$ Å. Για T=0 K, υπολογίστε πόσα μόρια HCl μέσα σε ένα mol έχουν μήκος μεταξύ 1.24 Å και 1.29 Å. Ατομικά βάρη $A_{Cl} = 35.45$ g/mol, $A_H = 1.01$ g/mol και η συχνότητα ταλάντωσης του μορίου $\omega = 5.45 \times 10^{14}$Hz. Δίνεται πίνακας τιμών της erf$(x) = \dfrac{2}{\sqrt{\pi}} \displaystyle\int_0^x e^{-t^2} dt$:

x	0.10	0.20	0.30	0.40	0.50	0.60	0.70	0.80	0.90	1.00	1.20	1.40	1.60	2.00
e	0.11	0.22	0.33	0.43	0.52	0.60	0.68	0.74	0.80	0.84	0.91	0.95	0.98	1.00

(γ) Τι θα άλλαζε στη διαδικασία λύσης του προηγούμενου ερωτήματος αν αντί για HCl είχαμε H_2 οπότε (1) τα δυο άτομα είναι ταυτόσημα (2) το καθένα έχει ολική στροφορμή $\frac{1}{2}$ και (3) οι δυο στροφορμές είναι παράλληλες (δηλαδή η κυματοσυνάρτηση spin είναι συμμετρική);

Δίνονται οι ατομικές μονάδες:

$\alpha_B = \dfrac{4\pi\hbar^2}{me^2}$ (SI) $= \dfrac{\hbar^2}{me^2}$ (CGS) $= 0.529$ Å, $E_0 = \frac{\hbar^2}{m a_B^2}$= 27.211 eV,

$\upsilon_0 = \sqrt{\frac{E_0}{m}}$=2187.77 km/s, P_0=294.21 Mbar, T_0=315773 K,

και οι σταθερές:

1 bar = 10^5 N m^{-2},	m=9.1$\times 10^{-31}$ kgr,	e=1.6$\times 10^{-19}$ C,
$\hbar$=1.05$\times 10^{-34}$ J s,	c=3.00$\times 10^8$ m/s,	N_A=6.022$\times 10^{23}$,
1 cal = 4.18 J,	ϵ_0=8.85 $\times$ 10^{-12} F/m,	k_B=1.381 $\times 10^{-23}$J K^{-1}.

Καλή επιτυχία!

Θεωρία Υλικών, 17/2/2012

Θέμα 1 (2.8)

Για τα στοιχειακό μέταλλο Cu δίνεται ότι η πυκνότητα είναι $\rho_M = 8.96$ g/cm^3 και το ατομικό του βάρος 63.546. Η ηλεκτρονική δομή του ατόμου του Cu είναι $[Ar]3^104s^1$.

α) Να βρεθεί ο ατομικός όγκος, V_a, για το υλικό αυτό (όγκος ανά άτομο).

β) Θεωρείστε την ακτίνα r_a μιας νοητής σφαίρας που έχει όγκο

$$V_a = \frac{4\pi}{3} r_a^3.$$

Η ποσότητα r_a είναι μια προσεγγιστική "ατομική ακτίνα" στα στερεά. Να βρεθεί η τιμή της για το Cu στο ατομικό σύστημα μονάδων.

γ) Υπολογίστε την ενέργεια Fermi στο μοντέλο ελευθέρων ηλεκτρονίων στις 3 διαστάσεις σε μηδενική θερμοκρασία. Τι τιμή έχει για το Cu;

δ) Εκτιμήστε την ενέργεια συνοχής των στερεών σαν συνάρτηση της ατομικής τους ακτίνας και βρείτε την τιμή της για το Cu.

Θέμα 2 (2.2)

Θεωρήσετε τον ενδογενή ημιαγωγό πυρίτιο (Si) στις δύο διαστάσεις με ενεργειακό χάσμα $E_g = 1.1$ eV και ενεργό μάζα ηλεκτρονίων $m^* = m_e$.

α) Δείξτε ότι η ενεργειακή πυκνότητα καταστάσεων ανά μονάδα επιφάνειας είναι $g(E) = \dfrac{m^*}{\pi\hbar^2}$.

β) Υπολογίστε την πυκνότητα ηλεκτρονίων, n, σε θερμοκρασία δωματίου και συγκρίνετέ την με την αντίστοιχη στις τρεις διαστάσεις, την οποία έχουμε βρεί 10^{10} cm^{-3} περίπου. Υπενθυμίζεται ότι μπορείτε να θεωρήσετε $E_F = E_g/2$.

Θέμα 3 (2.0)

Μαγνητικό νανοσωματίδιο με σπιν 1/2 βρίσκεται σε μαγνητικό πεδίο $\mathbf{B} = B\hat{z}$. Για $t = 0$ το σωματίδιο έχει καθορισμένη προβολή $s_x = \hbar/2$. Υπολογίστε τις πιθανότητες μετρήσεις του σπιν μετά από χρόνο t να δώσουν αποτελέσματα

(α) $s_x = \hbar/2$,

(β) $s_y = -\hbar/2$,

(γ) $s_y = \hbar/2$,

(δ) $s_z = \hbar/2$.

Θέμα 4 (3.0)

Η Χαμιλτονιανή συστήματος ηλεκτρονίου-πρωτονίου είναι

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}_e^2}{2m_e} + \frac{\mathbf{p}_p^2}{2m_p} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p|),$$

όπου $m_e, \mathbf{r}_e, \mathbf{p}_e, m_p, \mathbf{r}_p, \mathbf{p}_p$ η μάζα, θέση και ορμή του ηλεκτρονίου και πρωτονίου, αντίστοιχα. Θέτουμε $\mathbf{r} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p$ και $\mathbf{R} = \dfrac{m_e\mathbf{r}_e + m_p\mathbf{r}_p}{M}$, όπου $M = m_e + m_p$ η συνολική μάζα.

(α) Να βρεθούν εκφράσεις για δυο μεταβλητές ορμής, $\mathbf{p}$ και $\mathbf{P}$ ώστε ο μετασχηματισμός να είναι κανονικός, δηλαδή οι νέες μεταβλητές έχουν ίδιες μεταθετικές σχέσεις με τις παλιές. Θα πρέπει δηλαδή να ικανοποιούνται όλες οι παρακάτω σχέσεις:

$$[\mathbf{R}, \mathbf{r}] = 0 \quad [\mathbf{P}, \mathbf{p}] = 0 \quad [\mathbf{R}, \mathbf{p}] = 0 \quad [\mathbf{r}, \mathbf{P}] = 0 \quad [\mathbf{R}, \mathbf{P}] = i\hbar \quad [\mathbf{r}, \mathbf{p}] = i\hbar$$

Υπόδειξη: δοκιμάστε γραμμική σχέση.

(β) Αντιστρέψτε το μετασχηματισμό σας για να βρείτε τα $\mathbf{r}_e, \mathbf{p}_e, \mathbf{r}_p, \mathbf{p}_p$ σαν συνάρτηση των $\mathbf{R}, \mathbf{r}, \mathbf{P}, \mathbf{p}$. Αντικαταστήστε στην Χαμιλτωνιανή και δείξτε ότι αυτή αποκτά όμοια μορφή με την αρχική, αλλά περιγράφει πλέον δυο *ανεξάρτητα* σωματίδια, ένα μάζας M και ένα μάζας μ.

(γ) Βρείτε τις ιδιοτιμές και ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτωνιανής (θεωρήστε γνωστή τη λύση για το άτομο του υδρογόνου). Βρείτε πόσο αλλάζει η ενέργεια της θεμελιώδους στάθμης σε σχέση με το αποτέλεσμα όταν το πρωτόνιο θεωρείται ακίνητο.

(δ) (δώρο +0.5) Σε ένα δείγμα ατομικού Η για $T \to 0$, πόση είναι η ψηλότερη, η χαμηλότερη και η μέση ενέργεια που μπορεί να έχει ένα άτομο;

Δίνονται οι ατομικές μονάδες:

$\alpha_B = \dfrac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$ (SI) $= \dfrac{\hbar^2}{me^2}$ (CGS) $= 0.529$ Å, $\quad E_0 = \dfrac{\hbar^2}{ma_B^2} = \dfrac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_B}$= 27.211 eV,

$\upsilon_0 = \sqrt{\frac{E_0}{m}}$=2187.77 km/s, $\quad P_0$=294.21 Mbar, $\quad T_0$=315773 K,

και οι σταθερές:

1 bar = 10^5 N m^{-2},	m=9.1$\times10^{-31}$ kgr,	e=1.6$\times10^{-19}$ C,
$\hbar$=1.05$\times10^{-34}$ J s,	c=3.00$\times10^{8}$ m/s,	N_A=6.022$\times10^{23}$,
1 cal = 4.18 J,	ϵ_0=8.85 $\times$ 10^{-12} F/m,	k_B=1.381 $\times10^{-23}$J K^{-1}.

Καλή επιτυχία!

Θεωρία Υλικών,
Τελική εξέταση, 4/2/2013

Θέμα 1

Θέμα 2 (0.5+1.5)

Θεωρήστε δυο σωματίδια με σπιν $\frac{1}{2}$, τα οποία βρίσκονται σε μια κατάσταση $|\psi\rangle$ για την οποία ισχύει $S_{1z}|\psi\rangle = \dfrac{\hbar}{2}|\psi\rangle$ και $S_{2x}|\psi\rangle = \dfrac{\hbar}{2}|\psi\rangle$. Μετράμε το ολικό σπιν του συστηματος. (α) Τι αποτελέσματα μπορεί να προκύψουν; και (β) με τι πιθανότητες;

Θέμα 3 (1.5+1.5)

Σώμα μάζας m εκτελεί αρμονική ταλάντωση συχνότητας ω σε μια διάσταση.

(α) Η $Axe^{-\nu x^2}$ είναι ιδιοκατάσταση της Χαμιλτωνιανής. Υπολογιστε τις σταθερές A και ν και τις μέσες τιμές $\langle x\rangle$, $\langle p\rangle$, $\langle xp\rangle$, $\langle px\rangle$, $\langle xp - px\rangle$

(β) Η κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους στάθμης στο παραπάνω σύστημα ειναι $\psi_0(m, x)$. Θεωρήστε τωρα σύστημα δυο σωμάτων μάζας m, τα οποία εκτελούν ταλαντώσεις συχνότητας ω. Δείξτε ότι κυματοσυνάρτηση της θεμελιώδους στάθμης του συστήματος ειναι

$$\psi_0(m, x_1)\psi_0(m, x_2)$$

ή ισοδύνμαμα

$$\psi_0(2m, \frac{x_1 + x_2}{2})\psi_0(\frac{m}{2}, x_1 - x_2).$$

Θεωρία Υλικών, 11/2/2014

1. Κβαντομηχανική (4 μονάδες): Λύστε 2 από τα θέματα 1-3.

Θέμα 1 Δυο διαδοχικές γραμμές στο φάσμα εκπομπής του HCl απέχουν 20.68 cm^{-1}. Υπολογίστε πόσο απέχουν οι ίδιες γραμμές στο φάσμα εκπομπής του DCl.

Θεωρήστε ότι η ''σταθερά ελατηρίου'', κ, είναι ίδια στα δυο μόρια. Δίνονται ατομικά βάρη: $A_H = 1.0$ g/mol, $A_D = 2.0$ g/mol, $A_{Cl} = 35.5$ g/mol και ότι $(20.68\mathrm{cm}^{-1})hc = 0.408$ meV.

Θέμα 2 Κάθε (λογική) συνάρτηση $f(\theta, \phi)$ μπορεί να γραφεί σαν γραμμικός συνδυασμός ιδιοσυναρτήσεων του τελεστή της στροφορμής, $\mathbf{l}^2$:

$$f(\theta, \phi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} c_{lm} Y_{lm}(\theta, \phi).$$

(α) Αποδείξτε ότι

$$\int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} |f(\theta, \phi)|^2 \sin\theta d\theta d\phi = 1 \quad \leftrightarrow \quad \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} |c_{lm}|^2 = 1.$$

(β) Υπολογίστε το c_{00} για την $f(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{10}{3\pi}} \cos^2\theta \sin^2\phi$.

Θέμα 3 Δυο ταυτόσημα φερμιόνια κινούνται σε μια διάσταση με κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x_1, x_2) = (ax_1 + bx_2)e^{-x_1^2/2}e^{-x_2^2/2}.$$

(α) Υπολογίστε τις σταθερές a, b ώστε η ψ να είναι κανονικοποιημένη και να ικανοποιεί την αρχή του Pauli.

(β) Υπολογίστε την πιθανότητα να βρίσκονται και τα δυο σωμάτια στο διάστημα [-1,1].

$$\sin 2x = 2\sin x \cos x \qquad \cos 2x = 2\cos^2 x - 1 = 1 - 2\sin^2 x$$

$$\int_0^{\pi} \cos^{2n} x \sin x dx = \frac{2}{2n+1} \qquad \int_0^{2\pi} \sin^4 x dx = \frac{3\pi}{4}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (a > 0) \qquad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} e^{-2bx}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{\frac{b^2}{a}} \quad (a > 0)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x e^{-a(x-b)^2}\,\mathrm{d}x = b\sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (\mathrm{Re}(a) > 0) \qquad \int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-ax^2}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}} \quad (a > 0)$$

$$\int_0^1 e^{-x^2}\,\mathrm{d}x \approx 0.747 \qquad \int_0^1 x^2 e^{-x^2}\,\mathrm{d}x \approx 0.189$$

$$\int_a^b \int_c^d f(u)g(v) du dv = \int_a^b f(u) du \int_c^d g(v) dv$$

Λύσεις θεμάτων 1-3.

Θέμα 1:

$$E_{DCl} = \hbar\omega_{DCl} = \hbar\sqrt{\frac{\kappa}{\mu_{DCl}}} = \sqrt{\frac{\kappa(m_D + m_{Cl})}{m_D m_{Cl}}}.$$

$$E_{HCl} = \hbar\omega_{HCl} = \hbar\sqrt{\frac{\kappa}{\mu_{HCl}}} = \sqrt{\frac{\kappa(m_H + m_{Cl})}{m_H m_{Cl}}}.$$

$$\Rightarrow E_{DCl} = E_{HCl}\sqrt{\frac{\frac{m_D+m_{Cl}}{m_D m_C l}}{\frac{m_H+m_{Cl}}{m_H m_C l}}} = E_{HCl}\sqrt{\frac{m_H(m_D + m_{Cl})}{m_D(m_H + m_{Cl})}} = E_{HCl}\sqrt{\frac{A_H(A_D + A_{Cl})}{A_D(A_H + A_{Cl})}}$$

$$\Rightarrow E_{DCl} = 20.68\sqrt{\frac{1.0(2.0 + 35.5)}{2.0(1.0 + 35.5)}}\ \mathrm{cm}^{-1} = 14.82\ \mathrm{cm}^{-1}.$$

Θέμα 2:

(α) Θεωρία. Πρέπει να δώσουν δυο αποδειξεις (ειναι ισοδυναμία).

(β) $c_{00} = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} f(\theta,\phi)Y_{00}(\theta,\phi)\sin\theta d\theta d\phi$

$$c_{00} = \int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\sqrt{\frac{10}{3\pi}}\cos^2\theta\sin^2\phi\sqrt{\frac{1}{4\pi}}\sin\theta d\theta d\phi = \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{10}{12}}\int_0^{\pi}\cos^2\theta\sin\theta d\theta\int_0^{2\pi}\sin^2\phi d\phi$$

$$= \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{5}{6}}\int_0^{\pi}\cos^2\theta(-1)d\cos\theta\int_0^{2\pi}\frac{1}{2}(1-\cos 2\phi)d\phi = \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{5}{6}}\frac{2}{3}\frac{1}{2}(2\pi - 0) = \frac{2}{3}\sqrt{\frac{5}{6}} = \frac{\sqrt{30}}{9} \approx 0.609.$$

Θέμα 3:

(α) Πρέπει $\psi(x_1,x_2) = -\psi(x_2,x_1) \Rightarrow b = -a$.

Επίσης $\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x_1,x_2)|^2 dx_1 dx_2 = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}|a|^2(x_1-x_2)^2 e^{-x_1^2}e^{-x_2^2} = 1.$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}|a|^2(x_1^2 + x_2^2 - 2x_1x_2)^2 e^{-x_1^2}e^{-x_2^2} = 1 \Rightarrow$$

$$|a|^2\left\{\int_{-\infty}^{\infty}x_1^2 e^{-x_1^2}dx_1\int_{-\infty}^{\infty}e^{-x_2^2}dx_2 + \int_{-\infty}^{\infty}x_2^2 e^{-x_2^2}dx_2\int_{-\infty}^{\infty}e^{-x_1^2}dx_1 + \right.$$

$$\left. +2\int_{-\infty}^{\infty}x_1 e^{-x_1^2}dx_1\int_{-\infty}^{\infty}x_2 e^{-x_2^2}dx_2\right\} = 1 \Rightarrow$$

$$|a|^2(\frac{1}{2}\sqrt{\pi}\sqrt{\pi} + \frac{1}{2}\sqrt{\pi}\sqrt{\pi} + 0) = 1 \Rightarrow a = /frac1\sqrt{\pi}.$$

(b) $P = \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}|\psi(x_1,x_2)|^2 dx_1 dx_2 = \frac{1}{\pi}\left\{\int_{-1}^{1}x_1^2 e^{-x_1^2}dx_1\int_{-1}^{1}e^{-x_2^2}dx_2 + \int_{-1}^{1}x_2^2 e^{-x_2^2}dx_2\int_{-1}^{1}e^{-x_1^2}dx_1 + \right.$

$$\left. +2\int_{-1}^{1}x_1 e^{-x_1^2}dx_1\int_{-1}^{1}x_2 e^{-x_2^2}dx_2\right\} =$$

$$\frac{1}{\pi}\left\{2\int_0^1 x_1^2 e^{-x_1^2}dx_1 2\int_0^1 e^{-x_2^2}dx_2 + 2\int_0^1 x_2^2 e^{-x_2^2}dx_2 2\int_0^1 e^{-x_1^2}dx_1 + 0\cdot 0\right\} =$$

$\frac{8}{\pi}0.747\cdot 0.189 = 0.360$ ή 36%.

Θεωρία Υλικών, 27/1/2015

Θέμα 1

Σε έναν μονοδιάστατο αρμονικό ταλαντωτή:

(α) Βρειτε τις ιδιοσυναρτήσεις, $\psi_\lambda(x)$ και τις ιδιοτιμές λ του τελεστή καταστροφής, δηλαδή τις λύσεις της εξίσωσης $a\psi_\lambda(x) = \lambda\psi_\lambda(x)$ με $\displaystyle\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_\lambda(x)|^2 dx = 1$.

(β) Σχεδιάστε πρόχειρα την $|\psi_\lambda(x)|^2$ για δυο διαφορετικές τιμές του λ.

(γ) Δείξτε ότι δεν θα υπήρχε καμία λύση στο (α) ερώτημα αν αυτο αφορούσε τον τελεστή δημιουργίας αντί για τον τελεστή καταστροφής.

Θέμα 2

(α) Σύστημα αποτελείται από δυο ταυτόσημα φερμιόνια. Ένα σωματίδιο περιγράφεται από την ψ_1 και ένα από την ψ_2. Αποδειξτε ότι η μέση τιμή της συγκέντρωσης σωματιδίων είναι $n(\mathbf{r}) = |\psi_1(\mathbf{r})|^2 + |\psi_2(\mathbf{r})|^2$.

(β) Δυο ταυτόσημα φερμιόνια κινούνται σε επιφάνεια σφαίρας. Ένα σωματίδιο βρίσκεται στην κατάσταση $Y_{2,-2}$ και ένα στην κατάσταση $Y_{2,1}$. Υπολογίστε την συνάρτηση $f(\theta) = \displaystyle\int_0^{2\pi} n(\theta,\phi) sin\theta d\phi$. Σχεδιάστε προχειρα την $f(\theta)$. Ποια η φυσική σημασια της;

(γ) Υπολογίστε την πιθανότητα να βρίσκεται ένα σωμάτιο στο άνω ημισφαίριο ($0 \leq \theta < \frac{\pi}{2}$) κι ένα στο κάτω.

(δ) (μπόνους) Θα άλλαζε το αποτέλεσμα στο (α) αν τα σωματίδια ήταν μποζονια και όχι φερμιόνια; Περιμένετε η πιθανότητα στο (γ) να βγει μικρότερη, ίση η μεγαλύτερη από ό,τι στα φερμιόνια; γιατί;

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (a>0) \qquad \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2}e^{-2bx}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{a}}e^{\frac{b^2}{a}} \quad (a>0)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} xe^{-a(x-b)^2}\,\mathrm{d}x = b\sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (\mathrm{Re}(a)>0) \qquad \int_{-\infty}^{\infty} x^2e^{-ax^2}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a^3}} \quad (a>0)$$

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax^2}\,\mathrm{d}x = \begin{cases} \frac{1\cdot 3\cdot\ldots\cdot(2k-1)}{2^{k+1}a^k}\sqrt{\frac{\pi}{a}} & (n=2k, k \text{ integer}, a>0) \\ \frac{k!}{2a^{k+1}} & (n=2k+1, k \text{ integer}, a>0) \end{cases}$$

$$\int \sin px\cos qx\mathrm{d}x = -\frac{\cos(p-q)x}{2(p-q)} - \frac{\cos(p+q)x}{2(p+q)} \qquad \int \sin px\sin qx\mathrm{d}x = -\frac{\sin(p-q)x}{2(p-q)} - \frac{\sin(p+}{2(p+}$$

$$\int \sin^n x dx = -\frac{\sin^{n-1}x\cos x}{n} + \frac{n-1}{n}\int \sin^{n-2}x dx, \quad n>0.$$

$$\int \cos^n x dx = \frac{\cos^{n-1}x\sin x}{n} + \frac{n-1}{n}\int \cos^{n-2}x dx, \quad n>0.$$

$$\int_0^{\infty} \frac{x^{2n}}{(x^2+a^2)^{m+1}}\mathrm{d}x = \frac{(1\cdot 3\cdot\ldots\cdot(2n-1))(1\cdot 3\cdot\ldots\cdot(2(m-n)-1))\pi}{2^{m+1}m!a^{2(m-n)+1}} \quad a>0, m>n.$$

$$\int_0^{\infty} \frac{x^{2n+1}}{(x^2+a^2)^{m+1}}\mathrm{d}x = \frac{(m-n-1)!n!}{2m!a^{2(m-n)}} \quad a>0, m>n.$$

Σφαιρικές αρμονικές:

$Y_{2,-2}(\theta,\phi) = \frac{1}{4}e^{-2i\phi}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta$ $\qquad Y_{2,-1}(\theta,\phi) = \frac{1}{2}e^{-i\phi}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\cos\theta\sin\theta$

$Y_{2,0}(\theta,\phi) = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{5}{\pi}}\,(-1+3\cos^2\theta)$

$Y_{2,1}(\theta,\phi) = -\frac{1}{2}e^{i\phi}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\cos\theta\sin\theta$ $\qquad Y_{2,2}(\theta,\phi) = \frac{1}{4}e^{2i\phi}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta$

Λύσεις θεμάτων 1-2.

Θέμα 1:

(α) $a\psi = \lambda\psi \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(x + \frac{d}{dx})\psi = \lambda\psi \Rightarrow \psi' = (\sqrt{2}\lambda - x)\psi \Rightarrow \ln\psi = \sqrt{2}\lambda x - \frac{1}{2}x^2 + c \Rightarrow \psi_\lambda(x) = Ne^{-\frac{1}{2}x^2 + \sqrt{2}\lambda x}$. Κανονικοποίηση: $N = \frac{1}{\pi^{1/4}}e^{-\lambda^2}$. Ιδιοτιμές λ ειναι όλοι οι μιγαδικοί αριθμοί.

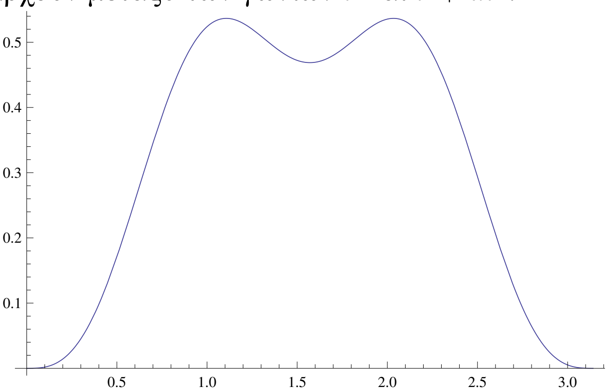
(β) Είναι αδιάστατοι. Για $\lambda = 0$ έχουμε την θεμελιώδη στάθμη. Για $\lambda = 1/\sqrt{2}$ έχουμε την $e^{-(x-1)^2/2}$, δηλαδή την θεμελιώδη στάθμη με κέντρο το 1.

Θέμα 2:

(α) $\psi = \dfrac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) - \psi_2(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2))$. Η πυκνότητα ειναι

$n(\mathbf{r}) = \langle\psi|\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1)+\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_2)|\psi\rangle = \dfrac{1}{2}\displaystyle\int\int(\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2)-\psi_2(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2))^*(\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1) + \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_2)(\psi_1(\mathbf{r}_1)\psi_2(\mathbf{r}_2) - \psi_2(\mathbf{r}_1)\psi_1(\mathbf{r}_2))d^3r_1d^3r_2$ = 8 όροι, από τους οποίους 4 δίνουν $|\psi|^2$ και οι άλλοι 4 αλληλοαναιρούνται.

(β) Για τις ψ που δινονται είναι $n(\theta,\phi) = \frac{15}{32\pi}\sin^4\theta + \frac{15}{8\pi}\cos^2\theta\sin^2\theta \Rightarrow n(\theta,\phi) = \frac{15}{32\pi}(\sin^4\theta + 4\cos^2\theta\sin^2\theta) = \frac{15}{32\pi}(-3\sin^4\theta + 4\sin^2\theta)$. Επομένως $f(\theta) = \frac{15}{32\pi}2\pi\sin\theta(-3\sin^4\theta + 4\sin^2\theta) = \frac{15}{16}(4\sin^3\theta - 3\sin^5\theta)$. Η $f(\theta)d\theta$ μου δινει τον αριθμό των σωματιδίων που υπάρχουν μεταξύ των γωνιών θ και $\theta + d\theta$.



(γ) Η πιθανότητα να βρισκεται ακριβώς ένα σωμάτιο στο βόρειο ημισφαίριο ειναι $P = \frac{1}{2}\int_0^{\pi/2} f(\theta)d\theta = \frac{15}{32}\left(4\int_0^{\pi/2}\sin^3\theta d\theta - 3\int_0^{\pi/2}\sin^5\theta d\theta\right) = \frac{15}{32}\left(4\frac{2}{3} - 3\frac{8}{15}\right) = \frac{1}{2}$.

ΘΕΩΡΙΑ ΥΛΙΚΩΝ
Τελική Εξέταση Μέρος Α', Ιανουάριος 2016

Θέμα 1

(1) Σωμάτιο μάζας M κινείται ελεύθερα στο εσωτερικό ορθογώνιου παραλληλεπίπεδου με πλευρές a, b, c. Αποδείξτε ότι οι ιδιοτιμές και τις ιδιοσυναρτήσεις της Χαμιλτωνιανής χαρακτηρίζονται από τρεις θετικούς ακέραιους κβαντικούς αριθμούς n, l, m και δίνονται από τις

$$\psi_{nml}(x,y,z) = \sqrt{\frac{8}{abc}} \sin\frac{n\pi x}{a} \sin\frac{m\pi y}{b} \sin\frac{l\pi z}{c}, \tag{1}$$

$$E_{nml} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2M}\left(\frac{n^2}{a^2} + \frac{m^2}{b^2} + \frac{l^2}{c^2}\right). \tag{2}$$

Οι παρακάτω ερωτήσεις αφορούν **κυβικό** νανοσωματίδιο ($a = b = c$).

(2) Βρείτε τις πέντε χαμηλότερες ενέργειες και τον βαθμό εκφυλισμού της καθεμίας. Σχεδιάστε πρόχειρα τις κυματοσυναρτήσεις για τις δυο χαμηλότερες ενέργειες.

(3) Αποδείξτε ότι η μέση τιμή της z συνιστώσας της στροφορμής, l_z, είναι μηδέν όταν $m = n$.

(4) Σωμάτιο βρίσκεται στην κατάσταση $n = 2, m = 2, l = 2$. Ποιά είναι η πιθανότητα μέτρηση του μέτρου της στροφορμής του σωματιδίου να δώσει την την τιμή 0;

(5) Το ίδιο ερώτημα για τιμή μέτρου στροφορμής $2\hbar$.

(6) Δέκα ταυτόσημα μη αλληλεπιδρώντα μποζόνια με μάζα ίση με την μάζα του ηλεκτρονίου είναι περιορισμένα στο εσωτερικό κυβικού νανοσωματιδίου με $a = 10a_B$, όπου $a_B = \dfrac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \approx 0.53$ Å. Υπολογίστε την ελάχιστη ενέργεια του συστήματος σε eV. Επαναλάβετε την άσκηση για φερμιόνια.

Υπόδειξη: στα ερωτήματα 3,4,5 μπορείτε να εργαστείτε και σε καρτεσιανές συντεταγμένες (x, y, z) αντί για τις σφαιρικές (r, θ, ϕ).

Βαθμολογία: κάθε ερώτημα=1 μονάδα, άριστα=4 μονάδες.

Καλή επιτυχία.

ΘΕΩΡΙΑ ΥΛΙΚΩΝ
Τελική Εξέταση, Μέρος Α', Ιανουάριος 2017

Θεωρήστε το διατομικό μόριο A_2, όπου το κάθε άτομο A έχει μάζα m_A και η μέση απόσταση μεταξύ ατόμων είναι d. Το μόριο κινείται ελεύθερα μέσα σε κυβικό κουτί πλευράς L. Τα δυο άτομα A περιστρέφονται στον χώρο ενώ η απόστασή τους είναι πάντα κοντά στην τιμή d.

Η Χαμιλτονιανή του συστήματος έχει την συνολική κίνηση του μορίου $(\mathbf{R}, \mathbf{P})$ και την σχετική κίνηση μεταξύ των ατόμων $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ σε τρεις διαστάσεις:

$$H = \frac{P^2}{2M} + \frac{p^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 r^2,$$

όπου $M = 2m_A$, $\mu = m/2$ και $r = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| - d$. Οι ιδιοκαταστάσεις H χαρακτηρίζονται από δυο συναρτήσεις Ψ_n και ψ_n και 6 ακέραιους N, L, M, n, l, m ως εξής:

$$\Phi_{NLMnlm}(X, Y, Z, x, y, z) = \Psi_N(X)\Psi_L(Y)\Psi_M(Z)\psi_n(x)\psi_m(y)\psi_m(z)$$

$$E_{NLMnlm} = a(N^2 + L^2 + M^2) + b(n + l + m) + c$$

(1) Δώστε τους τύπους της $\Psi(u)$ για τις δυο χαμηλότερες τιμές του N. Δώστε τους τύπους της $\psi_n(u)$ για τις δυο χαμηλότερες τιμές του n. Υπολογίστε τα a, b, c σαν συνάρτηση των m_A, ω, d και L. (1.5)

(2) Βρείτε την ενέργεια και τον βαθμό εκφυλισμού στην θεμελιώδη και στην πρώτη διεγερμένη στάθμη του συστήματος θεωρώντας ότι τα άτομα A έχουν ακέραιο σπιν και ότι οι N, L, M είναι ίδιοι στις δυο αυτές στάθμες. (1.0)

(3) Επαναλάβετε το (β) ερώτημα θεωρώντας ότι τα άτομα A έχουν ημιακέραιο σπιν. (1.0)

Υπόδειξη: Αν ανταλλαχθεί η θέση των δυο ατόμων το $\mathbf{R}$ *δεν αλλάζει ενώ το* $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$.

⋆★⋆ Καλή επιτυχία! ⋆★⋆

ΜΕΤΥ-502, Τελικό ΚβΜ 1/3, 18/1/2017. Όνομα: ______________________________

(α) Δυο νανοσωματίδια έχουν σπιν $s_1 = 3/2$, $s_2 = 7/2$. Βρείτε όλες τις δυνατές των κβαντικών αριθμών S, M του ολικού σπιν $\mathbf{S} = \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2$.

(β) Δυο ταυτόσημα σωματίδια με $s = 1$ κινούνται πάνω στον άξονα x και η κατάστασή τους περιγράψεται από την κυματοσυνάρτηση

$$\psi(x_1, x_2) = N \sin\left[k(x_1 - x_2)\right] e^{-\lambda(x_1 - x_2)^2}.$$

Βρείτε τις επιτρεπτές τιμές του κβαντικού αριθμού, S, του ολικού σπιν των δυο σωματιδίων.

(γ) N ηλεκτρόνια βρίσκονται σε απειρόβαθο πηγάδι μήκους $L = 10^{-6}$m και η μέση τους ενέργεια είναι 1 eV. Να βρεθεί το N.