

Θεωρία Υλικών, 11/2/2011

Θέμα 1 (2.5)

Για τα στοιχειακό μέταλλο Al δίνεται ότι η πυκνότητα είναι $\rho_M = 2.7 \text{ g/cm}^3$ 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 παραλληλεπίπεδου 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 $n_x = \text{άρτιος}$.

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

$$\mathbf{R} = \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2,$$

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2, \quad \mathbf{p} = \frac{m_2\mathbf{p}_1 - m_1\mathbf{p}_2}{m_1 + m_2}$$

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 $\mu = m_1m_2/M$ 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 $d = 1.28 \text{ \AA}$. Για $T=0 \text{ K}$, υπολογίστε πόσα μόρια HCl μέσα σε ένα mol έχουν μήκος μεταξύ 1.24 \AA και 1.29 \AA . Ατομικά βάρη $A_{Cl} = 35.45 \text{ g/mol}$, $A_H = 1.01 \text{ g/mol}$ και η συχνότητα ταλάντωσης του μορίου $\omega = 5.45 \times 10^{14} \text{ Hz}$. Δίνεται πίνακας τιμών

$$\text{της } \text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt:$$

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 στροφορές είναι παράλληλες (δηλαδή η κυματοσυνάρτηση spin είναι συμμετρική);

Δίνονται οι ατομικές μονάδες:

$$\alpha_B = \frac{4\pi\hbar^2}{me^2} \text{ (SI)} = \frac{\hbar^2}{me^2} \text{ (CGS)} = 0.529 \text{ \AA}, \quad E_0 = \frac{\hbar^2}{ma_B^2} = 27.211 \text{ eV},$$

$$v_0 = \sqrt{\frac{E_0}{m}} = 2187.77 \text{ km/s}, \quad P_0 = 294.21 \text{ Mbar}, \quad T_0 = 315773 \text{ K},$$

και οι σταθερές:

$$1 \text{ bar} = 10^5 \text{ N m}^{-2}, \quad m = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kgr}, \quad e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C},$$

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

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

Καλή επιτυχία!