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].

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

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

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

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

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

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

2. Θεωρία υλικών (6 μονάδες): Λύστε ΟΛΑ τα θέματα 4-6.

Θέμα 4 Να βρεθεί η σχέση ενέργειας - ορμής (k) ηλεκτρονίου σε μονοδιάστατο στοιχειακό στερεό, το οποίο αποτελείται από N όμοια άτομα σε μία κυκλική αλυσίδα με πλεγματική σταθερά α, όπου αλληλεπιδρούν μόνο οι πλησιέστεροι γείτονες με ενέργεια $-V$ ($V > 0$). Το κάθε άτομο, n, συνεισφέρει ένα ατομικό τροχιακό ϕ_n με ενέργεια ϵ. Υπενθυμίζεται ότι η κυματοσυνάρτηση του συστήματος είναι γραμμικός συνδυασμός των ατομικών τροχιακών (μοντέλο LCAO). Αναπτύξτε την σχέση ενέργειας - ορμής που βρήκατε για μικρά k και, παραλείποντας τον σταθερό όρο (παρατηρήστε ότι έχει παρόμοια μορφή με την αντίστοιχη σχέση στο μοντέλο ελεύθερων ηλεκτρονίων), ορίστε την ενεργό μάζα του ηλεκτρονίου m^*.

Θέμα 5 Να βρεθεί η συγκέντρωση ηλεκτρονίων και οπών σε ενδογενή μονοδιάστατο ημιαγωγό σαν συνάρτηση της θερμοκρασίας. Θεωρήστε ενεργειακό χάσμα E_g, ενεργό μάζα ηλεκτρονίου m_e^* και οπής m_h^*. Στη συνέχεια, να αποδειχθεί η σχέση για το χημικό δυναμικό (ενέργεια Fermi)

$$E_F = E_g/2 + (1/4)\ k_B T\ ln(m_h^*/m_e^*).$$

Θέμα 6 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

$$\epsilon(\omega) = \frac{D(\omega)}{E(\omega)} = \epsilon_0 + \frac{P(\omega)}{E(\omega)}$$

όπου $P = -nex$ (x η μετατόπιση). Σχεδιάστε πρόχειρα την $\epsilon_0(\omega)$.

Λύσεις θεμάτων 1-3.

Θέμα 1:

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

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

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

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

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 $\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}|\psi(x_1,x_2)|^2dx_1dx_2 = 1 \Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}|a|^2(x_1-x_2)^2e^{-x_1^2}e^{-x_2^2} = 1.$

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

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

$$\left. +2\int_{-\infty}^{\infty}x_1e^{-x_1^2}dx_1\int_{-\infty}^{\infty}x_2e^{-x_2^2}dx_2\right\} = 1 \Rightarrow$$

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

(b) $P = \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1}|\psi(x_1,x_2)|^2dx_1dx_2 = \frac{1}{\pi}\left\{\int_{-1}^{1}x_1^2e^{-x_1^2}dx_1\int_{-1}^{1}e^{-x_2^2}dx_2 + \int_{-1}^{1}x_2^2e^{-x_2^2}dx_2\int_{-1}^{1}e^{-x_1^2}dx_1 + \right.$

$$\left. +2\int_{-1}^{1}x_1e^{-x_1^2}dx_1\int_{-1}^{1}x_2e^{-x_2^2}dx_2\right\} =$$

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

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