

## Γενική Μεταπτυχιακή Εξέταση - ΕΜΠ & ΕΚΕΦΕ-"Δημόκριτος"

**Μέρος Ι - Πέμπτη 26/05/2011 10:00, Διάρκεια 3 ώρες**

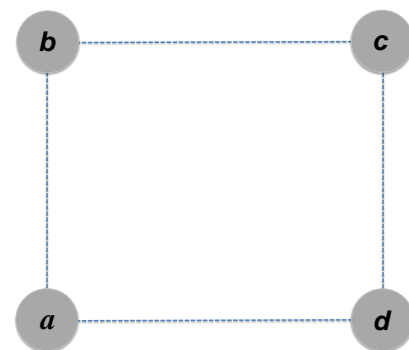
### Στατιστική Μηχανική 1.

Θεωρούμε ένα σύστημα που απαρτίζεται από τέσσερα άτομα  $a$ ,  $b$ ,  $c$  και  $d$  με μαγνητικές ροπές  $\mu_a$ ,  $\mu_b$ ,  $\mu_c$  και  $\mu_d$  αντιστοίχως. Αυτές οι μαγνητικές ροπές μπορούν να έχουν δύο δυνατούς προσανατολισμούς. (Όταν υπάρχει εξωτερικό μαγνητικό πεδίο η κάθε μαγνητική ροπή θα είναι παράλληλη ή αντιπαράλληλη σε αυτό.) Το κάθε άτομο αλληλεπιδρά με τα δύο πλησιέστερα γειτονικά του άτομα, όπως δείχνει το σχήμα. Η ενέργεια αλληλεπίδρασης μεταξύ δύο πλησιέστερων γειτονικών ατόμων  $i$  και  $j$  είναι  $\lambda \mu_i \cdot \mu_j$ , όπου  $\lambda > 0$ . Οι τέσσερις μαγνητικές ροπές έχουν το ίδιο μέτρο:  $|\mu_a| = |\mu_b| = |\mu_c| = |\mu_d| = \mu_0$ . Το σύστημα βρίσκεται σε ισορροπία σε θερμοκρασία  $T$  και σε εξωτερικό μαγνητικό πεδίο  $\mathbf{B} = B\hat{y}$ . Θεωρήστε τη διεύθυνση του μαγνητικού πεδίου κάθετη στο επίπεδο του χαρτιού.

(α) Να υπολογίσετε την ενέργεια του συστήματος για κάθε μία από τις δυνατές καταστάσεις. Να περιγράψετε τη βασική κατάσταση του συστήματος σε σχέση με το εξωτερικό μαγνητικό πεδίο  $\mathbf{B}$ . [Μονάδες 4]

(β) Να βρείτε τη συνάρτηση επιμερισμού του συστήματος. [Μονάδες 3]

(γ) Για την περίπτωση όπου  $B = \lambda \mu_0$  να υπολογίσετε τη μέση ενέργεια του συστήματος. Να βρείτε τις οριακές τιμές της για  $T = 0$  και για  $T \rightarrow \infty$ . [Μονάδες 3]



### Στατιστική Μηχανική 2.

Ένα κυλινδρικό δοχείο, με εμβαδόν βάσης  $A$  και ύψος  $L = 10$  m, περιέχει κλασικό ιδανικό αέριο που αποτελείται από  $N$  σωματίδια μάζας  $m$  στο βαρυτικό πεδίο της γης. Θεωρήστε την επιτάχυνση της βαρύτητας,  $g$ , σταθερή. Το σύστημα βρίσκεται σε θερμική ισορροπία σε θερμοκρασία  $T$ . Να βρείτε

(α) τη συνάρτηση επιμερισμού, [Μονάδες 4]

(β) τη μέση ενέργεια και [Μονάδες 3]

(γ) τη θερμοχωρητικότητα του συστήματος. [Μονάδες 3]

Δίνεται:

$$\int_0^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad \text{για } \operatorname{Re}(a) > 0$$

### Κβαντομηχανική 1.

Θεωρήστε την αλλαγή στην ενέργεια της στάθμης με  $n = 2$  ενός ατόμου υδρογόνου που οφείλεται στην παρουσία ηλεκτρικού πεδίου  $\mathcal{E}$  κατά τον άξονα των  $z$ . Δείξτε ότι από τις τέσσερις εκφυλισμένες καταστάσεις μόνο οι δύο μετατοπίζονται, συγκεκριμένα κατά  $\pm 3e\mathcal{E}a_0$ , όπου  $e$  είναι το στοιχειώδες ηλεκτρικό φορτίο.

Υποδείξεις: Θα συναντήσετε κατά τη λύση ένα σύστημα  $4 \times 4$ :  $\sum_{j=0}^3 V_{ij}\alpha_j = E_1\alpha_i$ . Δείξτε πρώτα ότι ανάγεται σε σύστημα  $2 \times 2$ . Αδιατάρακτες κυματοσυναρτήσεις:

$$\Psi_{2,0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \left(2 - \frac{r}{a_0}\right), \quad \Psi_{2,1,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \frac{r}{a_0} \cos\theta$$
$$\Psi_{2,1,\pm 1} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left(\frac{1}{2a_0}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \frac{r}{a_0} \sin\theta e^{\pm i\phi}$$

### Κβαντομηχανική 2.

α) Η σύζευξη σπιν-γωνιακής στροφορμής εισάγει έναν όρο  $H_{so} = A\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  στην χαμιλιτονιακή ενός ατόμου. Δείξτε ότι η συνεισφορά στην ενέργεια αυτού του όρου μηδενίζεται στην περίπτωση  $s$  τροχιακών. Δώστε τις δυνατές ιδιοτιμές του  $H_{so}$  στην περίπτωση  $p$  τροχιακών. [Μονάδες 5].

β) Η ολική μαγνητική ροπή του ηλεκτρονίου μάζας  $m$  στο άτομο του υδρογόνου δίνεται από την σχέση  $\boldsymbol{\mu} = \boldsymbol{\mu}_L + \boldsymbol{\mu}_S$ , όπου

$$\boldsymbol{\mu}_L = -\frac{e}{2mc}\mathbf{L}, \quad \boldsymbol{\mu}_S = -\frac{e}{mc}\mathbf{S}$$

είναι οι μαγνητικές ροπές που οφείλονται στην τροχιακή κίνηση και το σπιν του ηλεκτρονίου, αντίστοιχα. Βρείτε το μέγεθος της ολικής μαγνητικής ροπής  $\boldsymbol{\mu}$  στην κατάσταση  $p$  με ολική στροφορμή  $3/2$ . [Μονάδες 5].

**Η εξέταση πραγματοποιείται με κλειστά βιβλία/σημειώσεις.**

**Κάθε θέμα να απαντηθεί σε διαφορετική κόλλα χαρτί.**

**Τα θέματα είναι ισοδύναμα. Να απαντήσετε σε τρία θέματα.**

**Καλή επιτυχία.**

## Γενική Μεταπτυχιακή Εξέταση - ΕΜΠ & ΕΚΕΦΕ-"Δημόκριτος"

Μέρος ΙΙ - Παρασκευή 27/05/11 10:00, Διάρκεια 3 ώρες

### ΗΜ 1.

Υποθέστε ότι ο συμμάτινος βρόχος του σχήματος διαρρέεται από ρεύμα που αυξάνεται γραμμικά ως συνάρτηση του χρόνου,  $I(t) = kt$ ,  $k = \text{σταθερά}$ .

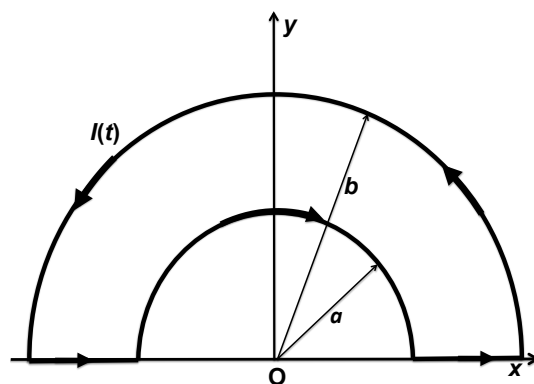
Δείξτε ότι το καθυστερημένο διανυσματικό δυναμικό

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\mathbf{J}(\mathbf{r}', t - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'$$

στην αρχή των αξόνων ισούται με

$$\mathbf{A}(\mathbf{0}, t) = \frac{\mu_0}{2\pi} kt \ln\left(\frac{b}{a}\right) \hat{\mathbf{x}}.$$

Υπάρχει ηλεκτρικό πεδίο στο σημείο αυτό αφού το σύρμα είναι ηλεκτρικά ουδέτερο; Με τι ισούται και γιατί; [Μονάδες 10]



### ΗΜ 2.

Ένα παχύ σφαιρικό κέλυφος εσωτερικής ακτίνας  $a$  και εξωτερικής ακτίνας  $b$  έχει ακτινική πόλωση στην περιοχή  $a < r < b$  η οποία δίνεται από το διάνυσμα

$$\mathbf{P} = \frac{k}{r} \hat{\mathbf{r}}, \quad k = \text{σταθερά}$$

Θεωρήστε ότι δεν υπάρχουν ελεύθερα φορτία.

Βρείτε το ηλεκτρικό πεδίο  $\mathbf{E}$  παντού στο χώρο με δυο τρόπους:

(α) αφού εντοπίσετε όλα τα δέσμια φορτία. [Μονάδες 7]

(β) με το νόμο του Gauss. [Μονάδες 3]

### Μηχανική 1.

Θεωρήστε κίνηση στο επίπεδο και πολικές συντεταγμένες. Υλικό σημείο μάζας  $m$  κινείται υπό την επίδραση δυναμικού  $-\mu/r^2$ , όπου  $\mu$  θετική σταθερά.

α) Βρείτε τη λαγκρανζιανή του συστήματος. Προσδιορίστε τις δυο γενικευμένες ορμές  $p_\theta$  και  $p_r$ . Γράψτε τις (διαφορικές) εξισώσεις κίνησης Λαγκράνζ και δείξτε ότι μια από τις γενικευμένες ορμές είναι σταθερά της κίνησης.

β) Βρείτε την ενεργειακή συνάρτηση  $h(q, \dot{q}, t)$  και τη χαμιλτονιανή  $H(q, p, t)$  του συστήματος. Δείξτε ότι είναι σταθερές της κίνησης. Δείξτε με άμεσο υπολογισμό ότι ισχύει  $h(q, \dot{q}, t) = T(q, \dot{q}) + V(q, t)$ , δηλαδή η  $h$  είναι ίση με τη μηχανική ενέργεια του συστήματος  $E$  η οποία επομένως διατηρείται. Προφανώς και η χαμιλτονιανή ισούται με την ενέργεια του συστήματος με μεταβλητές τις γενικευμένες ορμές και γενικευμένες συντεταγμένες θέσης.

γ) Δείξτε ότι η ποσότητα  $f = r^2 p_r^2$  ικανοποιεί τη διαφορική εξίσωση

$$\left(\frac{df}{dt}\right)^2 = AH^2 f$$

και προσδιορίστε τη σταθερά  $A$ .

δ) Δείξτε ότι ισχύει η σχέση  $r^2 p_r^2 = (2Et + C)^2$ , όπου  $C = \text{σταθερά}$ .

### Μηχανική 2.

Θεωρήστε επίπεδο εκκρεμές που αποτελείται από υλικό σημείο στο άκρο άμαξης στερεάς ράβδου της οποίας το σημείο στήριξης κινείται στο ίδιο επίπεδο κατά γνωστό τρόπο  $y_0 = f(t)$  κατά μήκος του κατακόρυφου άξονα  $y$ . Θεωρήστε ότι ο άξονας έχει θετική κατεύθυνση προς τα κάτω.

α) Βρείτε τη λαγκρανζιανή και από τις εξισώσεις Λαγκράνζ βρείτε την εξίσωση κίνησης της αναλυτικής δυναμικής με μόνη γενικευμένη (γνήσια) συντεταγμένη τη γωνία  $\phi$  του εκκρεμούς με την κατακόρυφο. Τι θα συμβεί αν η κίνηση του σημείου στήριξης είναι  $y_0 = gt^2/2$ ;

β) Ακολουθήστε τη διαδικασία της αναλυτικής δυναμικής για τον προσδιορισμό της γενικευμένης δύναμης του δεσμού. Πρέπει πρώτα να βρείτε τη διαφορική εξίσωση του δεσμού.

### Στερεά Κατάσταση 1.

Δύο δείγματα κρυσταλλικού πυριτίου (Si, πυκνότητα ενδογενών φορέων σε θερμοκρασία δωματίου  $n_i = 1,45 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ ), νοθεύονται με προσμειζεις φωσφόρου, (P, σθένος:5, με ενέργεια πρόσμειξης σε απόσταση 0,05 eV από τη ζώνη αγωγιμότητας), με συγκεντρώσεις  $10^{13}$  άτομα P/cm<sup>3</sup>, και  $10^{19}$  άτομα P/cm<sup>3</sup>, αντίστοιχα.

α) Να υπολογισθεί το επίπεδο Fermi, σε κάθε περίπτωση, υποθέτοντας πλήρη ιονισμό των προσμειζεων. [5 μονάδες]

β) Χρησιμοποιήστε τις τιμές που υπολογίσατε στο προηγούμενο ερώτημα για το επίπεδο Fermi του καθενός δείγματος και ελέγξτε για ποιο δείγμα ισχύει καλύτερα η προσέγγιση του ολικού ιονισμού. [5 μονάδες]

Ενεργειακό χάσμα πυριτίου (σε 300 K):  $E_g = 1,12 \text{ eV}$ ,

Πηλίκο ενεργών μαζών πυκνότητας καταστάσεων πυριτίου  $m_e^* = 2m_h^*$ .

### Στερεά Κατάσταση 2.

Διοδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα φέρει ένα άτομο Cu στην αρχή των αξόνων, και δύο άτομα O στις θέσεις  $\mathbf{a}_1/2$  και  $\mathbf{a}_2/2$ , όπου  $\mathbf{a}_1 = a\hat{x}$ ,  $\mathbf{a}_2 = a\hat{y}$  και  $a$  η σταθερά του πλέγματος. Το σύστημα αυτό αντιστοιχεί στα επίπεδα CuO<sub>2</sub> που εμφανίζονται σε πολλά υπεραγώγιμα υλικά. Θεωρούμε ότι τα ατομικά τροχιακά των ατόμων Cu και O είναι ορθογώνια μεταξύ τους και ότι υπάρχει σημαντική επικάλυψη μόνο μεταξύ των  $d$  τροχιακών του Cu και των  $p$  τροχιακών ατόμων O σε θέση πλησιέστερου γείτονα.

α) [4 μονάδες] Παρόλο που υπάρχουν πέντε  $d$  τροχιακά του Cu και τρία  $p$  τροχιακά του O, μόνο το  $d_{x^2-y^2}$ , το  $p_x$  στην θέση  $\mathbf{a}_1/2$  και το  $p_y$  στην θέση  $\mathbf{a}_2/2$  είναι σημαντικά για τον προσδιορισμό των ενεργειακών ζωνών του πλέγματος. Τα στοιχεία της χαμιλτονιανής μήτρας για τα υπόλοιπα τροχιακά είτε μηδενίζονται λόγω συμμετρίας, είτε μπορούν να θεωρηθούν ότι μηδενίζονται κατά προσέγγιση. Επιχειρηματολογήστε γιατί αυτό είναι σωστό για τουλάχιστον 4 από τα στοιχεία μήτρας  $\langle d_i | H | p_j \rangle$ , όπου  $d_i$  είναι ένα  $d$  τροχιακό του Cu διαφορετικό του  $d_{x^2-y^2}$  και  $p_j$  ένα  $p$  τροχιακό των ατόμων O. (Υπενθύμιση: Τα  $p$  και  $d$  τροχιακά είναι κατευθυντικά με λοβούς εναλλασσόμενου πρόσημου).

β) [4 μονάδες] Έστω  $\epsilon_p$  και  $\epsilon_d$  οι ενέργειες των  $p$  και  $d$  τροχιακών (on-site energies) και

$$t \equiv \langle \phi_{d_{x^2-y^2}}(\mathbf{r}) | H | \phi_{p_x}(\mathbf{r} - \mathbf{a}_1) \rangle$$

Σχηματίστε και επιλύστε την εξίσωση ιδιοτιμών που περιγράφει τις ενεργειακές ζώνες του συστήματος.

γ) [2 μονάδες] Έστω ότι  $\epsilon_p = -0,5$  eV,  $\epsilon_d = 0,5$  eV και  $t = 0,1$  eV. Ποιο είναι το εύρος της ενεργειακής ζώνης για σημεία του αντίστροφου χώρου πάνω στην γραμμή  $k_y = 0$ ;

### Λέξηερ & Οπτοηλεκτρονική 1.

**A)** Προσδιορίστε το λόγο των πληθυσμών, σε θερμική ισορροπία, δυο επιπέδων που απέχουν κατά ενέργεια  $\Delta E$ , ίση με: (α)  $1 \times 10^{-4}$  eV, που είναι η τιμή που αντιστοιχεί στην απόσταση δυο περιστροφικών επιπέδων πολλών μορίων, (β)  $5 \times 10^{-2}$  eV, που αντιστοιχεί στην απόσταση των μοριακών δονητικών επιπέδων και (γ) 3 eV, που αντιστοιχεί στην τάξη μεγέθους της διέγερσης των ηλεκτρονίων ατόμων και μορίων. Θεωρήστε ότι τα δυο επίπεδα έχουν τον ίδιο εκφυλισμό και ότι η θερμοκρασία τους είναι (α)  $100^\circ$  K, (β)  $300^\circ$  K (θερμοκρασία δωματίου) και (γ)  $1000^\circ$  K. Σχολιάστε τις απαντήσεις σας και προσδιορίστε την πιθανότητα παραγωγής ακτινοβολίας LASER από αυτά τα δυο επίπεδα και στις εννέα περιπτώσεις ( $3 \times 3$ ). [Μονάδες 4/10].

**B)** Η "ψυχρή αντίδραση"  $F + H_2 \rightarrow HF^* + H$ , ενός χημικού LASER HF μέσου υπέρυθρου, προσφέρει χημική ενέργεια 32 kcal/mole, ενώ η "θερμή αντίδραση"  $F_2 + H \rightarrow HF^* + F$  προσφέρει χημική ενέργεια 98 kcal/mole. Υπολογίστε το ανώτερο δονητικό επίπεδο διέγερσης, που μπορεί να καλύψει με αντιστροφή πληθυσμών η "ψυχρή" και η "θερμή" αντίδραση αντίστοιχα. Σχολιάστε την απάντησή σας συγκριτικά με το τι συμβαίνει σε άλλα γνωστά δονητικά μοριακά LASER (π.χ. CO<sub>2</sub> LASER). [Μονάδες 6/10].

### Ενδεχόμενα Χρήσιμες σχέσεις για τα θέματα Μηχανικής

$$L = T - V, \quad \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = Q_i$$

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = \sum_{j=1}^M \lambda_j(t) A_{ji}(q, t), \quad i = 1, 2, \dots, n$$

$$\sum_{i=1}^n A_{ji}(q, t) \dot{q}_i + A_j(q, t) dt = 0, \quad j = 1, 2, \dots, M$$

$$h(q, \dot{q}, t) = \sum_{i=1}^n \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i - L(q, \dot{q}, t), \quad \frac{dh}{dt} = - \frac{\partial L}{\partial t}, \quad p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}$$

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H(q, p, t)}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad \frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t}$$

---

**Ενδεχόμενα Χρήσιμες σχέσεις για το θέμα Οπτοηλεκτρονικής & Λήξερ**

σταθερά Planck  $h = 6,63 \times 10^{-34}$  J s

ταχύτητα του φωτός στο κενό  $c = 3 \times 10^8$  m/s

φορτίο ηλεκτρονίου  $e = 1,6 \times 10^{-19}$  C

σταθερά Boltzmann  $k = 1,38 \times 10^{-23}$  J/°K

αριθμός Avogadro  $N_A = 6.022 \times 10^{23}$  μόρια/mole

ενέργεια  $1 \text{ cal} = 2,6 \times 10^{19}$  eV

**Η εξέταση πραγματοποιείται με κλειστά βιβλία/σημειώσεις.**

**Κάθε θέμα να απαντηθεί σε διαφορετική κόλλα χαρτί.**

**Τα θέματα είναι ισοδύναμα. Να απαντήσετε σε τρία θέματα**

**Καλή επιτυχία.**

## Βασικές Σχέσεις Φυσικής των Ημιαγωγών

$$p = 2 \left( \frac{m_h^* kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{E_V - E_F}{kT}\right), \quad n = 2 \left( \frac{m_e^* kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_C - E_F}{kT}\right)$$

$$N_D^+ = N_D - N_D^0 = N_D - \frac{N_D}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_D - E_F}{kT}\right)} = \frac{N_D}{1 + 2 \exp\left(-\frac{E_D - E_F}{kT}\right)}$$

$$N_A^- = N_A - N_A^0 = N_A - \frac{N_A}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_F - E_A}{kT}\right)} = \frac{N_A}{1 + 2 \exp\left(-\frac{E_F - E_A}{kT}\right)}$$

Φορτίο ηλεκτρονίου:  $e = 1,6 \times 10^{-19}$  C,

Μάζα ηλεκτρονίου:  $m_0 = 0,91 \times 10^{-30}$  kg

Σταθερά Boltzmann:  $k = 1,38 \times 10^{-23}$  J/K,

Σταθερά Planck:  $h = 6,62 \times 10^{-34}$  Js

1 eV =  $1,6 \times 10^{-19}$  J  $\approx$  23 kcal/mol,

$E(\text{eV}) \cdot \lambda (\mu\text{m}) = 1,24$  eV $\cdot\mu\text{m}$

$\epsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12}$  F/m =  $8,85 \times 10^{-12}$  C<sup>2</sup>N<sup>-1</sup>m<sup>-2</sup>,  $kT(300\text{K}) \approx 25\text{meV}$

### Στοιχεία Μήτρας Κρυσταλλικής Χαμιλτονιανής:

$$\langle \chi_1 | H | \chi_2 \rangle = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \langle \phi_1(\mathbf{r}) | H | \phi_2(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \rangle$$

Αναπαράσταση  $d$  τροχιακών (το  $d_{z^2}$  συμβολίζεται και ως  $d_{3z^2-r^2}$ ).

