بسمه تعالی

مجموعه سوالات مکانیک کوانتوم- کتاب میلر

طراحی و گردآوری: مهدی شیردل

سایر طراحان: محمد مسلمی زاده – محسن کیخا

فصل دوم- معادله شرودینگر مستقل از زمان (طراحی: شیردل، مسلمی زاده، کیخا)

۱- چرا دانستن مکانیک کوانتوم برای مهندسین الکترونیک اهمیت دارد ؟

مهندسان تمایل دارند که دستگاههای الکترونیکی،اپتیکی و یا اپتوالکترونیکی را در ابعاد اتمی ساخت و کنترل کرد مثلا بر طبق قانون مور تعداد ترانزیستورها روی یک چیپ در حال افزایش است و اندازه آنها در حال کوچک شدن است پس بزودی ابعاد آنقدر کوچک می‌شوند که به ابعاد اتم نزدیک خواهند شد و علم کوانتوم از اهمیت بالایی در ساخت ترانزیستورها برخوردار خواهد شد زیرا در اینصورت تاثیرات کوانتومی و رفتار تک الکترونها عملکرد دستگاه را تعیین می‌کنند.

۲- چند آزمایش که باعث شکست فیزیک کلاسیک شد را نام ببرید؟

اثر فوتوالکتریک، تابش جسم سیاه، آزمایش دو شکاف

۳- مسئله تابش جسم سیاه را توضیح دهید.

هر ماده ای کسر معینی از تابش فرودی بر سطح خود را جذب و بقیه آنرا بازتاب می‌کند. جسم سیاه جسمی است که هر فوتونی که با هر انرژی و هر بسامدی روی آن فرود آید را جذب می‌کند. تابش خارج شده از یک سوراخ کوچک در دیواره یک سطح بسته مادی را تابش جسم سیاه می‌گویند.

۴- خصوصیات تابش جسم سیاه را نام ببرید.

- توان گسیل شده با افزایش بسامد، ابتدا در بسامدهای کوچک افزایش یافته، سپس به بیشینه می‌رسد و در بسامدهای بزرگتر کاهش می‌یابد.
- توان گسیل شده با توان چهارم T تغییر می‌کند.
- با افزایش دما، کسر بیشتری از تابش گسیل شده توسط مولفه‌های بسامدهای بالاتر حمل می‌شود و طول موج بیشینه به سمت بسامدهای کمتر می‌آید.
- طیف تابش جسم سیاه مستقل از ماده‌ای است که تابش‌کننده از آن ساخته می‌شود.

۵- چهار فرایند اساسی که در آن الکترون می‌تواند از ماده کنده شود را نام برده و توضیح دهید.

- گسیل گرما یونی : گرم کردن فلزات باعث دادن انرژی گرمایی به الکترون ها میشود و میتواند آنها را از سطح جدا کند.
- گسیل ثانوی : انتقال انرژی جنبشی از ذراتی که با سطح فلز برخورد می‌کنند به الکترون‌های آن فلز.
- گسیل میدانی (سرد) : استخراج الکترون ها از فلز به وسیله یک میدان الکتریکی خارجی
- گسیل فوتوالکتریک : وقتی تابش الکترومغناطیسی بر روی سطح فلزی بتابد ممکن است الکترون‌ها از این سطح خارج شوند.

۶- اثر فوتوالکتریک را توضیح دهید.

اگر یک تابش الکترومغناطیسی به الکترون سطح یک فلز برخورد کند و انرژی مساوی یا بزگتر از انرژی که آنرا به سطح مقید می‌کند (انرژی بستگی) به آن بدهد باعث فرار آن از سطح فلز می‌شود که به این اثر، اثر فوتوالکتریک می‌گویند. الکترون‌های خارج شده از فلز را فوتوالکترون می‌نامیم.

۷- چهار نتیجه تجربی بدست آمده از اثر فوتوالکتریک را نام برده و تعابیر کلاسیکی و کوانتومی‌شان را بررسی کنید.

- گسیل فوتوالکترونی تقریبا بصورت آنی شروع می‌شود. در فیزیک کلاسیک یک الکترون تنها در صورتی می‌تواند سطح فلز را ترک کند که به اندازه کافی باریکه تابشی روی فلز بتابد تا بتواند انرژیی به اندازه انرژی بستگی‌اش بدست آورد. پس باید بین برخورد تابش با سطح و شروع گسیل یک زمان کاملا محسوسی وجود داشته باشد. اما در فیزیک مکانیک رهایی الکترون به انبار کردن انرژی آن بستگی ندارد و به برخورد آن با یک فوتون بستگی دارد که آنی است. (دو نظریه ناسازگارند)
- به ازای هر بسامدی، جریان فوتوالکترونی مستقیما با شدت I باریکه نوری متناسب است. (تعداد فوتوالکترون هایی که خارج میشوند متناسب با شدت نور است). از دیدگاه کلاسیکی با افزایش شدت نور انرژی درآشامیده شده توسط الکترون ها زیاد میشود و تعداد فوتوالکترون ها افزایش می یابد. از دیدگاه مکانیک کوانتومی افزایش انرژی یعنی افزایش تعداد فوتون ها. یعنی متناسب با I است. (دو نظریه سازگارند)
- در یک بسامد و شدت ثابت، جریان فوتوالکترونی با افزایش پتانسیل ترمزی کاهش می‌یابد و سرانجام وقتی پتانسیل ترمزی به V_{max} می‌رسد صفر می‌شود. از نظر کلاسیک این یعنی انرژی بیشینه الکترون‌های رها شده به هیچ وجه به مقدار کل انرژی که در واحد زمان به سطح می‌رسد بستگی ندارد. پس نظریه کلاسیکی چنین اثری را پیشگویی نمی‌کند. از نظر کوانتومی چون بسامد تابش الکترومغناطیسی دقیقا انرژی فوتون را تعیین میکند، به ازای هر بسامد معلوم برای فوتوالکترون ها، یک انرژی جنبشی بیشینه و مشخص وجود دارد.
- مقدار پتانسیل ترمزی V_0 برای هر سطح بخصوص، به بسامد نور بستگی دارد پس از جریان فوتوالکترونی هم مستقل است. برای هز فلز یک بسامد مشخص (آستانه) وجود دارد. گسیل فوتونی در صورتی رخ می‌دهد که بسامد آستانه بیشینه باشد.(حتی اگر شدت نور خیلی زیاد باشد). از نظر کلاسیکی توجیهی ندارد چون شرط اصلی گسیل فوتوالکترونی مقدار انرژی یاشدتی است که در واحد زمان به سطح میرسد نه بسامد. از نظر کوانتومی قابل توجیه است. چون یک مقدار انرژی باید صرف جئا کردن الکترون بشود.(تابع کار)

۸- اثر کامپتون را توضیح دهید؟

برخورد ی که در آن فوتون تمام انرژی خود را به الکترون نمی‌دهد (پراکندگی امواج توسط ذرات باردار)

اگر موج الکترومغناطیسی تک فامی به ذره‌ای که ابعادش کوچکتر از طول‌موج باشد برخورد کند باعث می‌شود ذره با طول‌موجی که به اندازه $\Delta\lambda$ از طول‌موج فرودی بزرگتر است به نوسان دربیاید.

معادله اساسی کامپتون: ($\Delta\lambda$ جابجایی کامپتون است) $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0 c}(1 - cos\theta)$

۹-مبنای دستیابی به معادله شرودینگر چیست؟

بر اساس تجربه بدست آمده است اما حقانیت آن بر اساس یک سری اصول موضوعه پایه گذاری شده است که تا کنون درست بودن آنها را تجربه ثابت کرده است.

۱۰- روند ریاضی که از معادله هلم هولتز شروع شد و باعث رسیدن به معادله شرودینگر شد را بیان کنید.

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} = -k^2\psi$$

$$\nabla^2\psi = -k^2\psi \qquad \nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \qquad k = p/\hbar$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_o}\nabla^2\psi = \frac{p^2}{2m_o}\psi$$

$$\frac{p^2}{2m_o} \equiv \text{kinetic energy of electron}$$

$$\text{Total energy } (E) = \text{Kinetic energy} + \text{Potential energy } (V(\mathbf{r}))$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_o}\nabla^2\psi = \left(E - V(\mathbf{r})\right)\psi$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_o}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right)\psi = E\psi$$

۱۱- تفاوت چگالی احتمال و دامنه احتمال را بنویسید.

تابع ψ را دامنه احتمال و $|\psi(\mathrm{r})|^2$ را چگالی احتمال می‌گویند.

۱۲-چرا از پراش الکترونها برای مطالعه ساختار اتمی استفاده می‌کنیم؟

چون طول موج الکترون قابل مقایسه با با ابعاد اتمی است و قابل پراشیده شدن است و در مقابل ابعاد اتم از خود عکس العمل نشان می‌دهد.

۱۳- اصل دوبروی و دوگانگی موج ذره را برای الکترون و فوتون بیان کنید.

رابطه λ=h/p با نام اصل دوبروی شناخته می‌شود

الکترون

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

فوتون

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{c}{\nu}$$

۱۴- هامیلتونی چیست؟

مشاهده پذیری است که متناسب با انرژی کل سیستم است بعبارت دیگر هامیلتونی اپراتور انرژی است.

۱۵- معادل فارسی این کلمات را بیان کنید.

Scattering: پراکندگی Dispersion: پاشندگی Diffraction: پراش

۱۶- دلیل بهنجارش تابع موج چیست؟

بخاطر مفهوم احتمال است که باید مجموع کل آن یک شود

۱۷- مفهوم واگنی چیست؟

اگر بیش از یک تابع ویژه، دارای مقدار ویژه انرژی یکسانی باشند، به این پدیده واگنی می‌گویند

۱۸- چرا باید تابع موج و مشتق آن پیوسته باشد؟

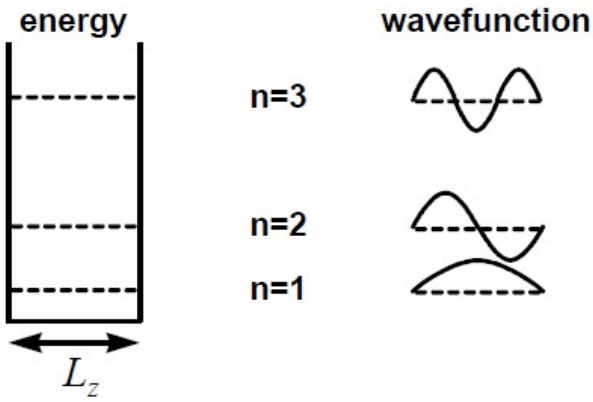
زیرا باید هم مقدار انرژی و هم نحوه تغییرات انرژی از لحاظ فیزیکی قابل توجیه باشد، اگر تابع موج پیوسته نباشد مشتق آن بینهایت است و انرژی بینهایت می‌شود و اگر مشتق تابع موج ناپیوسته باشد، این ناپیوستگی باعث ایجاد تغییرات ناخواسته ای در مقدار انرژی خواهد شد که غیر قابل توجیه است.

۱۹- دلیل کوانتیزه بودن انرژی در سیستم های مکانیک کوانتومی چیست؟

دلیل آن وجود قید است در واقع وجود شرایط مرزی باعث کوانتیزه شدن مقادیر مجاز انرژی است.

۲۰- سطوح انرژی و توابع موج را برای یک چاه پتانسیل بینهایت رسم کنید.

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{n\pi}{L_z}\right)^2 \qquad \psi_n(z) = A_n \sin\left(\frac{n\pi z}{L_z}\right)$$



۱- توابع موج دارای تقارن زوج یا فرد هستند.

۲- تابع موج پایه دارای تقارن زوج است.

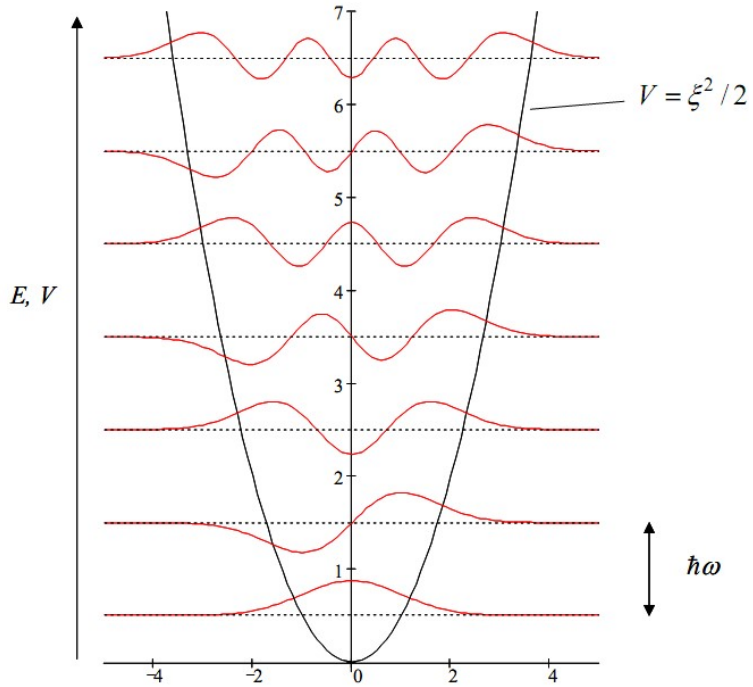
۳- با افزایش n، فاصله سطوح انرژی از هم بیشتر می‌شود.

۴- با افزایش L_z، مقادیر مجاز انرژی کاهش می‌یابد.

۲۱- توابع موج نوسانگر هماهنگ را رسم و انرژی‌های متناظر را مشخص کنید

$$E = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$$

$$n = 0, 1, 2, \ldots$$



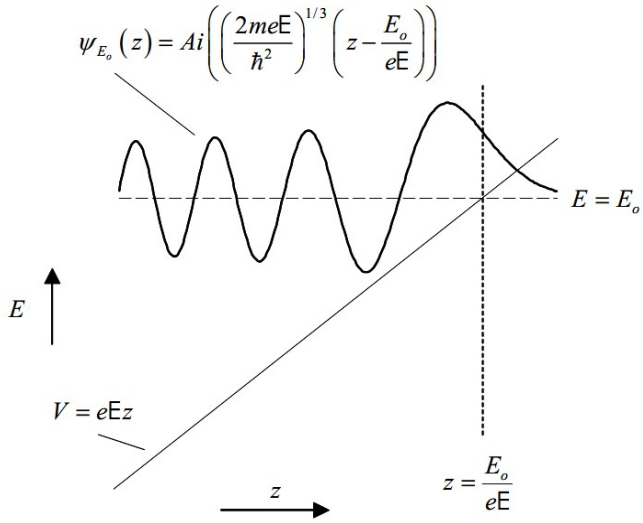
۱- اختلاف سطوح انرژی همه جا یکسان و برابر $\hbar\omega$ است.

۲- توابع موج دارای تقارن زوج یا فرد هستند.

۳- مقدار n، از صفر شروع می‌شود نه یک.

۴- انرژی حالت پایه برابر $\hbar\omega/2$ است.

۲۲- توابع موج را برای پتانسیل متغیر خطی رسم کنید.



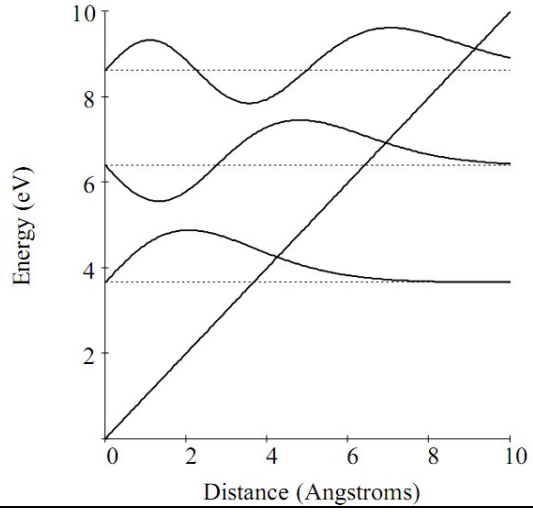
۱- از آنجایی که هیچ شرایط مرزی نداریم، این جواب‌ها به ازای هر مقدار ویژه انرژی E صادق است، در واقع مقادیر مجاز انرژی پیوسته هستند چرا که شرایط مرزی ندارند و مقید نیستند (عامل گسسته بودن، مقید بودن بود).

۲- اگر مقادیر ویژه انرژی بیشتر از انرژی پتانسیل باشند، جواب بصورت نوسانی است که این شرایط وقتی در سمت چپ نقطه $z=E_0/eE$ هستیم رخ می‌دهد.

۳- جوابهای توابع ویژه برای مقادیر انرژی مختلف یکسان هستند به جز اینکه به کنار (در جهت z) شیفت داده می‌شوند، یعنی انگار که z تغییر کرده است. (با تغییر z می‌توان به جواب‌های انرژی مختلف رسید).

۴- برخلاف پتانسیل یکنواخت، جواب‌ها امواج رونده نیستند، بلکه امواج ایستا هستند که بیشتر مشابه ذره در جعبه است. تابع موج نوسانی است و هر چه به سمت چپ می‌رود فرکانس‌اش زیاد و دامنه‌اش کم می‌شود

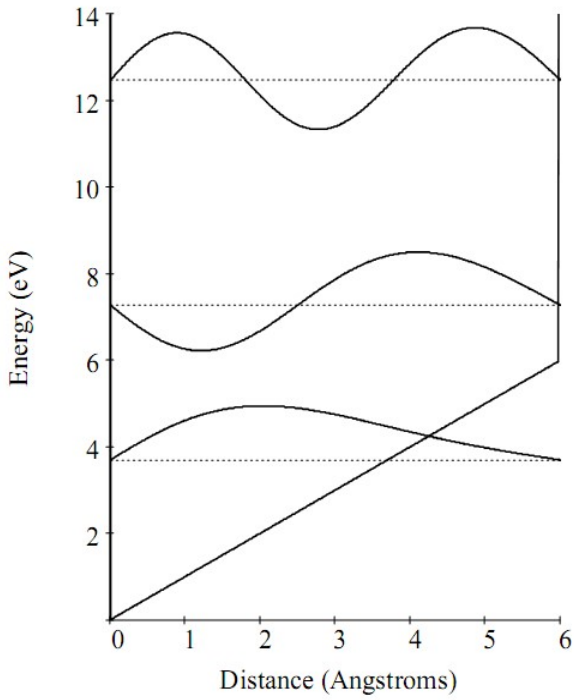
۲۳- توابع موج را برای چاه پتانسیل مثلثی رسم کنید.



۱- تابع موج برای هر سطح، شیفت یافته دیگری است.

۲- سمت چپ چون سد پتانسیل نامحدود است تابع موج در آن (z=0) صفر است. پایین ترین تابع موج هیچ صفری ندارد (تقاطع با ترازانرژی) به جز در ابتدا که سد نامحدود است

۲۴- توابع موج را برای چاه نامحدود با اعمال میدان الکتریکی رسم کنید، سطوح انرژی را نیز رسم کنید.



۱- توابع موج در دو طرف پتانسیل‌های نامحدود به صفر می‌رود.

۲- شکل و انرژی پایین‌ترین جواب تابع موج، مشابه پایین‌ترین حالت چاه مثلثی است.

۳- جواب دوم به شدت تحت تاثیر سد پتانسیل سمت راست قرار گرفته است، انرژی‌اش نیز بسیار بیشتر از چاه پتانسیل نامحدود است.

۴- جواب سوم بسیار شبیه سطح سوم چاه مستطیل ساده است.

۲۵- تونلینگ را تعریف کنید.

کاهش نمایی تابع موج داخل سد پتانسیل را تونلینگ گویند

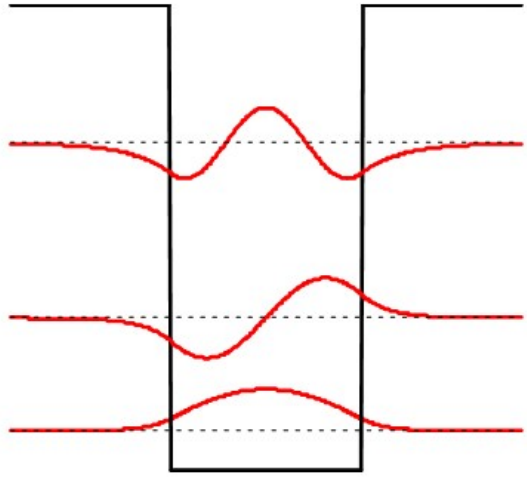
۲۶- orthogonal و orthonormal بودن توابع ویژه به چه معناست؟

$$\int_0^{L2} \psi_n^*(z)\psi_m(z) = \delta_{mn}$$

۱- orthogonal بودن یعنی توابع ویژه بر هم عمودند

۲- orthonormal بودن یعنی توابع ویژه علاوه بر عمود بودن، بهنجار نیز هستند

۲۷- سطوح انرژی و توابع موج را برای یک چاه پتانسیل محدود رسم کنید.



۱- توابع موج دارای تقارن زوج یا فرد هستند.

۲- تابع موج پایه دارای تقارن زوج است.

۳- با افزایش n، فاصله سطوح انرژی از هم بیشتر می‌شود.

۴- با افزایش پهنای چاه، مقادیر مجاز انرژی کاهش می‌یابد و تعداد سطوح بیشتری در چاه قرار می‌گیرند.

۵- مقدار تابع موج در داخل سد پتانسیل بصورت نمایی کاهش می‌یابد.

۶- وقتی $E>V_0$ ، ذره همه انرژی های ممکن را می‌تواند داشته باشد و به اصطلاح پیوسته است.

فصل سوم- معادله شرودینگر وابسته به زمان (طراحی: شیردل)

۱- معادله وابسته به زمان شرودینگر را بنویسید و تفاوت آن با معادله موج کلاسیک را بیان کنید.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi(\mathbf{r},t)+V(\mathbf{r},t)\Psi(\mathbf{r},t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(\mathbf{r},t)}{\partial t}$$

تفاوت معادله فوق با معادله موج کلاسیک این است که اولا این معادله دارای مشتق مرتبه اول نسبت به زمان است در حالیکه در معادله موج کلاسیک مشتق دوم نسبت به زمان وجود دارد، ثانیا برخلاف معادله موج کلاسیک، در این معادله ضرورتا تابع موج ماهیتی مختلط دارد.

۲- با دانستن تابع موج در زمان مشخص t_0 ، آیا می‌توان تابع موج را در تمام زمان ها بعدی به دست آورد؟

بله، با دانستن تابع موج در زمان t_0، می‌توان از طریق معادله وابسته به زمان شرودینگر مشتق مرتبه اول تابع موج را در زمان t_0، نیز به دست آورد و با جایگذاری در رابطه روبرو معادله موج برای تمام زمانهای بعدی قابل محاسبه است.

$$\Psi(\mathbf{r},t_o+\delta t)\cong\Psi(\mathbf{r},t_o)+\left.\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right|_{\mathbf{r},t_o}\delta t$$

۳- آیا معادله وابسته به زمان شرودینگر خطی است؟

بله، چراکه در این معادله توان های مرتبه بالای Ψ وجود ندارد.

۴- نتایج خطی بودن معادله وابسته به زمان شرودینگر را بنویسید.

- اگر Ψ جواب معادله باشد، آنگاه $c\Psi$ نیز جواب معادله خواهد بود (c یک ثابت مختلط است)

- برهم نهی جواب ها : اگر Ψ_a و Ψ_b جوابهای معادله باشند، آنگاه $\Psi_{a+b}=\Psi_a+\Psi_b$ و یا $\Psi_c=c_a\Psi_a+c_b\Psi_b$ هم جواب معادله است.

در واقع استفاده از اصل برهم نهی باعث می‌شود تا بتوان رفتاری که از ذرات کلاسیکی انتظار می‌رود، توسط مکانیک کوانتوم هم پوشش داد.

۵- بسط تابع موج وابسته به زمان را بر حسب توابع ویژه انرژی بنویسید.(با فرض اینکه V مستقل از زمان است)

$$\Psi(\mathbf{r},t)=\sum_n a_n\Psi_n(\mathbf{r},t)=\sum_n a_n\exp(-iE_nt/\hbar)\psi_n(\mathbf{r})$$

۶- تحول زمانی حالت برهم نهی (time evolution of superposition state) را با درنظر گرفتن فقط حالت ویژه اول و دوم برای یک ذره در چاه پتانسیل بینهایت به دست آورید.

اگر حالت برهم نهی را جمع دو حالت ویژه اول و دوم در نظر بگیریم، آنگاه خواهیم داشت:

$$\Psi(z,t)=\frac{1}{\sqrt{L_z}}\left[\exp\left(-i\frac{E_1}{\hbar}t\right)\sin\left(\frac{\pi z}{L_z}\right)+\exp\left(-i\frac{E_2}{\hbar}t\right)\sin\left(\frac{2\pi z}{L_z}\right)\right]$$

$$|\Psi(z,t)|^2=\frac{1}{L_z}\left[\sin^2\left(\frac{\pi z}{L_z}\right)+\sin^2\left(\frac{2\pi z}{L_z}\right)+2\cos\left(\frac{E_2-E_1}{\hbar}t\right)\sin\left(\frac{\pi z}{L_z}\right)\sin\left(\frac{2\pi z}{L_z}\right)\right]$$

چگالی احتمال با فرکانس زاویه ای $\omega_{21}=E_2-E_1/\hbar=3E_1/\hbar$ نوسان می‌کند.

۷- فرکانس نوسان چگالی احتمال را با درنظر گرفتن فقط دو حالت ویژه، برای ذره در چاه پتانسیل بینهایت و نوسانگر هارمونی بنویسید. آیا با افزایش یکسان مقدار انرژی دو حالت، فرکانس نوسان تغییر می‌کند؟

برای ذره در چاه پتانسیل بینهایت: $\omega_{21}=E_2-E_1/\hbar=3E_1/\hbar$

برای نوسانگر هارمونی: $\omega_{ab}=E_a-E_b/\hbar$

با توجه به روابط فوق معلوم است که فرکانس نوسان، به تفاضل انرژی دو حالت بستگی دارد پس اگر مقدار انرژی این دو حالت را به یک اندازه تغییر دهیم، فرکانس نوسانات تغییری نمی‌کند.

۸- حالت همدوس را برای یک نوسانگر هارمونی توضیح دهید.

حالت همدوس، حالت برهم نهی یک نوسانگر هارمونی است که بیشترین تطبیق را با رفتار نوسانگر هارمونی کلاسیک دارد.

برای یک نوسانگر هارمونی با فرکانس ω، حالت همدوس به صورت روبرو نوشته می‌شود:

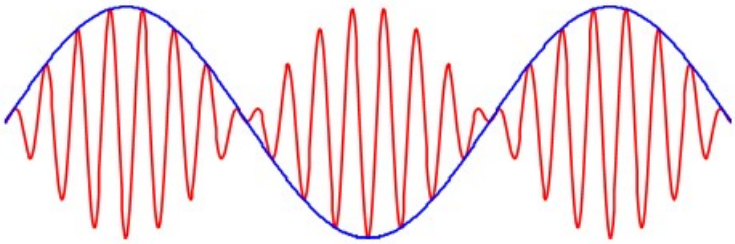
$$\Psi_N(\xi,t)=\sum_{n=0}^{\infty}c_{Nn}\exp\left[-i\left(n+\frac{1}{2}\right)\omega t\right]\psi_n(\xi)$$

$$|c_{Nn}|^2=\frac{N^n\exp(-N)}{n!}$$

در این روابط ψ_n، حالت های ویژه یک نوسانگر هارمونی و $\sqrt{N}$، انحراف معیار مربوط به توزیع پواسون است. به ازای N های بزرگ، ایده نوسانگر کلاسیک پوشش داده می‌شود.

۹- بسته موج و سرعت گروه را تعریف کنید.

برهم نهی گروهی از امواج با فرکانس و بردار موجهای کمی متفاوت، منجر به ایجاد بسته موج می‌شود. (شکل زیر). سرعت حرکت مرکز بسته موج بعنوان سرعت گروه شناخته می‌شود و از رابطه $vg=d\omega/dk$ به دست می آید.



۱۰- نشان دهید سرعت گروه الکترون آزاد، مشابه سرعت حرکت ذره ای با همان جرم و انرژی در مکانیک کلاسیک است. (اصل هرنفست)

$$E=\frac{\hbar^2k^2}{2m_o}\qquad \upsilon=\frac{E}{\hbar}=\frac{\hbar k^2}{2m_o},\ \text{i.e.,}\ \omega\propto k^2\quad \frac{1}{\upsilon/d\omega}=\frac{1}{\hbar dk/dE}=\sqrt{\frac{2E}{m}}$$

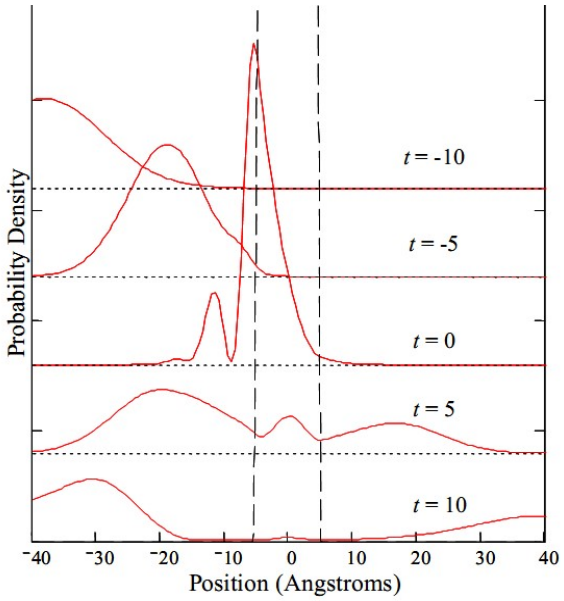
در نتیجه $E=mv_g^2/2$، که مطابق با مکانیک کلاسیک است.

۱۱- چرا بسته موج گوسین هنگام حرکت در فضای آزاد دچار پهن شدگی می‌شود؟

چون سرعت گروه برای امواجی که بسته موج را تشکیل می‌دهند یکسان نیست. این پدیده، پاشندگی سرعت گروه نامیده می‌شود

۱۲- برخورد بسته موج با یک سد پتانسیل را توصیف کنید.

فرض کنید بسته موجی در سمت چپ سد در حال برخورد با سد پتانسیل است. هنگام برخورد اثرات تداخلی شدیدی رخ می‌دهدو پس از برخورد مشاهده می‌کنیم که یک موج در سمت راست سد در حال انتشار به سمت راست است که همان موجی است که از سد تونل زده است و همچنین یک موج بازتابی در سمت چپ سد در حال انتشار به سمت چپ است.



۱۳- تئوری اندازه گیری در مکانیک کوانتوم را توضیح دهید؟

قبل از اندازه گیری، سیستم در یک حالت برهم نهی که ترکیب خطی از حالت های ویژه است قرار دارد ولی وقتی یک سیستم کوچک مکانیک کوانتومی توسط ابزاری بزرگ اندازه گیری می‌شود، سیستم به یک حالت ویژه‌ی کمیتی که قرار است اندازه گیری شود با احتمال $P_n=c_n^2$، "فروپاشی" می‌کند. C_n ضرایب بسط تابع موج برحسب توابع ویژه است. این فروپاشی کردن به یک حالت ویژه به این معناست که اندازه گیری چیزی بیشتر از مشاهده کردن است و باعث خلق یک حالت در سیستم می‌شود.

۱۴- مقدار چشم داشت انرژی را بنویسید.

$$\langle E \rangle = \sum_n E_n P_n = \sum_n E_n |c_n|^2$$

۱۵- آزمایش اشترن-گرلاخ را توضیح دهید.

الکترون علاوه بر جرم و بار دارای ویژگی دیگری به نام اسپین است، از این رو می‌توان آنرا یک میله آهنربای بسیار کوچک فرض کرد. با توجه به دیدگاه مکانیک کلاسیک وقتی میله آهنربای کوچک از یک میدان مغناطیسی غیر یکنواخت عبور می‌کند با توجه به جهت گیری مختلفی که ممکن است داشته باشد و نیروهایی که به آن وارد می‌شود از مسیر خود منحرف شده و در نتیجه هنگام برخورد تعداد زیادی از این آهنرباها با یک صفحه، الگویی به صورت خط مشاهده می‌شود ولی وقتی این آزمایش توسط باریکه ای از الکترون ها انجام گرفت مشاهده شد که الگوی روی صفحه بصورت دو نقطه یکی بالای صفحه و دیگری پایین صفحه است. یعنی الکترون تنها دارای دو نوع جهت گیری است: اسپین بالا و اسپین پایین.

۱۶- اپراتور هامیلتونی را نوشته و مقدار چشم داشت انرژی را به کمک آن بیان کنید.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r},t) \qquad \langle E \rangle = \int \Psi^*(\mathbf{r},t)\hat{H}\Psi(\mathbf{r},t)d^3\mathbf{r}$$

۱۷- مزیت استفاده از رابطه سوال ۱۵ نسبت به رابطه سوال ۱۳ برای محاسبه مقدار چشم داشت انرژی چیست؟

در رابطه سوال ۱۳ برای محاسبه مقدار چشم داشت باید مساله را برای تمام مقادیر ویژه انرژی حل کنیم در حالیکه در رابطه بیان شده در سوال ۱۵ نیازی به تجزیه به مقادیر ویژه نیست و تنها چیزهایی که لازم داریم بدانیم حالت سیستم و اپراتور همیلتونی است.

۱۸- رابطه ای بنویسید که نشان دهد با در اختیار داشتن حالت سیستم در زمان t_0 و اپراتور هامیلتونی می‌توان حالت سیستم را در زمان t_1 به‌دست آورد.

$$\Psi(\mathbf{r},t_1) = \exp\left(-\frac{i\hat{H}(t_1 - t_0)}{\hbar}\right)\Psi(\mathbf{r},t_0)$$

۱۹- اپراتور هامیلتونی، مقدار ویژه و تابع ویژه آن را بنویسید.

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r},t) \qquad \psi(\mathbf{r}) \qquad E$$

۲۰- اپراتور ممنتوم، مقدار ویژه و تابع ویژه آن را بنویسید.

$$\hat{p} \equiv -i\hbar\nabla \qquad \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \qquad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$$

۲۱- اپراتور مکان، مقدار ویژه و تابع ویژه آن را بنویسید.

$$\hat{z} \qquad \delta(z - z_o) \qquad z$$

۲۲- اصل عدم قطعیت ممنتوم- مکان و انرژی- زمان را بیان کنید.

اصل عدم قطعیت ممنتوم و مکان بیان می کند که امکان ندارد همزمان مقدار ممنتوم و مکان سیستم را بصورت دقیق بدانیم

$$\Delta p \Delta z \geq \hbar/2$$

اصل عدم قطعیت فرکانس و زمان بیان می کند که امکان ندارد همزمان مقدار زمان و انرژی سیستم را بصورت دقیق بدانیم

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

۲۳- رابطه جریان ذره در مکانیک کوانتوم را بنویسید. آیا جریان ذره تابعی وابسته به زمان است؟

$$\mathbf{j}_p = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi\right)$$

با توجه به رابطه ۱۰۰-۳ کتاب داریم: $\mathbf{j}_{pn}(\mathbf{r},t)=\mathbf{j}_{pn}(\mathbf{r})$، بنابراین مقدار جریان ذره به زمان بستگی ندارد.

فصل چهارم- توابع و عملگرها (طراحی: مسلمی زاده)

۱- تفاوت توابع در مکانیک کوانتوم و کلاسیک را بنویسید.

در مکانیک کلاسیک آرگومان توابع مقدار حقیقی داشت و برای مشخص کردن آن از مولفه های تابع در سه بعد استفاده می‌شد اما در مکانیک کوانتوم آرگومان تابع می‌تواند مختلط هم باشد و مجموعه آرگومانهای تابع می‌تواند مختلط و حتی بیکران هم باشد و از طرفی توابع در مکانیک کوانتوم برخلاف کلاسیک که ماهیت عددی داشتند، ماهیت برداری دارند و بصورت ماتریس ستونی نمایش داده می‌شوند

۲- دلیل معرفی نمایش براکت دیراک چیست؟

مکانیک کوانتوم بسیار گسترده تر از آن است که بخواهیم با توابع موج آنرا توصیف کنیم. برای توصیف بهتر آن احتیاج به یک سری توابع و عملگرها داریم. برای نمایش بهتر و مختصرتر این توابع و عملگرها از فرم براکت دیراک استفاده می‌کنیم

۳- فضای هیلبرت چگونه فضایی است؟

فضای هیلبرت فضایی است که در آن نمایش برداری توابع موجود باشد. (توابع را بتوان بصورت بردار نشان داد).

۴- نمایش برا و کت را توضیح دهید.

اگر f تابعی با n آرگومان باشد:

$$|f(x)\rangle = \begin{bmatrix} f(x_1)\sqrt{\delta_x} \\ f(x_2)\sqrt{\delta_x} \\ \vdots \end{bmatrix}$$

$$\langle f(x)| = \begin{bmatrix} f^*(x_1)\sqrt{\delta_x} & f^*(x_2)\sqrt{\delta_x} & \dots \end{bmatrix}$$

که در آن $\sqrt{\delta_x}$ برای نرمالیزه کردن تابع افزوده شده است، ملاحظه می‌شود که تابع برا و کت کانجوگیت هرمیتی هستند

۵- نمایش ضرب داخلی به فرم براکت دیراک چگونه است؟

$$\langle g| \times |f\rangle = \langle g|f\rangle = \int g^*(x) f(x) dx$$

۶- نمایش تابع f در فضای n بعدی ψ_n چگونه خواهد بود؟

$$|f\rangle = \sum_n |\psi_n\rangle\langle\psi_n|f\rangle$$

۷- ارتباط بردار حالت را با نمایش دیراک بیان کنید.

در مکانیک کوانتوم، تابع f میتواند بیانگر حالت مکانیکی سیستم باشد(مانند تابع موج) بنابراین مجموعه اعداد ارائه شده توسط بردارهای برا و کت حالت سیستم را بیان خواهد کرد که دومی بردار حالت و اولی ادجوینت هرمیتی آن خواهد بود. بنابراین در مکانیک کوانتوم، برا یا کت همواره نمایشگر حالت مکانیکی سیستم و یا حالتی که سیستم می‌تواند داشته باشد می‌باشند

۸- روابط ریاضی جاکم بر فضای هندسی و فضای برداری را با هم مقایسه کنید.

$$\mathbf{a}+\mathbf{b}=\mathbf{b}+\mathbf{a}$$
$$|f\rangle+|g\rangle=|g\rangle+|f\rangle$$

$$f_x=\mathbf{f}\cdot\hat{\mathbf{x}} \qquad c_m=\langle\psi_m|f\rangle$$

$$c(\mathbf{a}+\mathbf{b})=c\mathbf{a}+c\mathbf{b}$$
$$c(|f\rangle+|g\rangle)=c|f\rangle+c|g\rangle$$

$$\mathbf{a}+(\mathbf{b}+\mathbf{c})=(\mathbf{a}+\mathbf{b})+\mathbf{c}$$
$$|f\rangle+(|g\rangle+|h\rangle)=(|f\rangle+|g\rangle)+|h\rangle$$

$$\mathbf{a}.(\mathbf{b}+\mathbf{c})=\mathbf{a}.\mathbf{b}+\mathbf{a}.\mathbf{c}$$
$$\langle f|(|g\rangle+|h\rangle)=\langle f|g\rangle+\langle f|h\rangle$$

$$\mathbf{a}.(c\mathbf{b})=c(\mathbf{a}.\mathbf{b})$$
$$\langle f|cg\rangle=c\langle f|g\rangle$$

$$\mathbf{a}.\mathbf{b}=\mathbf{b}.\mathbf{a}$$
$$\langle f|g\rangle=(\langle g|f\rangle)^*$$

$$\|\mathbf{a}\|=\sqrt{\mathbf{a}.\mathbf{a}}$$
$$\|f\|=\sqrt{\langle f|f\rangle}$$

۹- تفاوت توابع و اپراتورها در چیست؟

تابع یک بردار را به بردار دیگر نگاشت میکند درحالی که اپراتور یک تابع را به تابع دیگر تبدیل می‌کند

۱۰- شرط خطی بودن یک اپراتور چیست؟

$$\hat{A}(f(x)+h(x))=\hat{A}f(x)+\hat{A}h(x)$$

$$\hat{A}[cf(x)]=c\hat{A}f(x)$$

۱۱- عملگرهای همانی، واحد، معکوس و هرمیتی را تعریف کنید.

عملگر همانی ماتریسی است که درایه های قطر اصلی آن ۱ و بقیه ۰ هستند

$$\hat{I}=\sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i|$$

نکته قابل توجه درمورد این ماتریس اینست که درایه های این ماتریس همیشه ثابت اند و ربطی به پایه های انتخابی ندارد.

معکوس یک عملگر، عملگری است که اگر با آن ضرب شود، حاصل برابر با ماتریس همانی شود

$$\hat{A}^{-1}\hat{A}=\hat{I}$$

لازم به ذکر است که همه عملگرها معکوس ندارند، و لازمه معکوس داشتن یک عملگر، یک به یک بودن آن است

عملگر واحد عملگری است که در رابطه $\hat{U}^{-1}=\hat{U}^{\dagger}$ صدق کند

به این دلیل به آن واحد می‌گویند که طول برداری که روی آن عمل می‌کند را تغییر نمی‌دهد و در واقع این عملگر با تغییر درایه ها نحوه نمایش آنرا تغییر میدهد و اندازه آن را حفظ میکند

عملگرهای هرمیتی عملگرهایی هستند که در رابطه $\hat{M}^{\dagger} = \hat{M}$ صدق می‌کنند بنابراین $M_{ij} = M^{*}{}_{ij}$ در نتیجه درایه های قطر اصلی آن باید حقیقی باشند

از جمله ویژگی های این عملگر اینست:

۱- حقیقی بودن مقادیر ویژه

۲- متعامد بودن مقادیر ویژه

۳- متعامد بودن توابع ویژه که دارای مقادیر ویژه متفاوت هستند

۴- کامل بودن مجموعه توابع ویژه

فصل پنجم- عملگرها و مکانیک کوانتوم (طراحی: کیخا)

۱- نشان دهید اگر دو اپراتور جابجاپذیر باشند توابع ویژه مشترکی دارند؟

فرض کنید اپراتورهای A,B جابجاپذیر باشند و همچنین اپراتور A دارای مقدار ویژه A_i با تابع ویژه $|\Psi_n>$ باشد. بنابراین با استفاده از خاصیت جابجایی می توان نوشت:

$$\hat{A}\hat{B}|\varphi_i> = \hat{B}\hat{A}|\varphi_i> = \hat{B}A_i|\varphi_i> = A_i\hat{B}|\varphi_i$$

$$\hat{B}|\psi_i\rangle = B_i|\psi_i\rangle$$

لذا دو اپراتور A و B دارا توابع ویژه مشترکی هستند.

۲- فرم کلی اصل عدم قطعیت را نوشته و بیان های: مومنتوم- موقعیت، انرژی-زمان و فرکانس- زمان را بنویسید؟

فرم کلی اصل عدم قطعیت از معادله زیر بدست می آید:

$$\overline{(\Delta A)^2}[\alpha + \frac{\bar{C}}{2\overline{(\Delta A)^2}}]^2 + \overline{(\Delta B)^2} - \frac{\overline{(C)^2}}{4\overline{(\Delta A)^2}} \geq 0$$

که در رابطه فوق α می تواند هر عدد مثبتی را ختیار کند. اگر آن را به گونه ای اختیار کنیم که جز اول معادله فوق صفر شود آنگاه:

$$\alpha = -\frac{C}{2\overline{(\Delta A)^2}}$$

پس با جایگذاری در معادله اول خواهیم داشت:

$$\overline{(\Delta A)^2(\Delta B)^2} \geq \frac{\overline{(C)^2}}{4}$$

که این رابطه فرم کلی اصل عدم قطعیت خواهد بود. حال بیانهای دیگر اصل عدم قطعیت را بیان می کنیم:

۱- عدم قطعیت تکانه-موقعیت:

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{h}{2}$$

۲- عدم قطعیت انرژی- زمان:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}$$

۳- عدم قطعیت فرکانس- زمان:

$$\Delta\omega\Delta t \geq \frac{1}{2}$$

۳= با استفاده از بیان چگالی حالتها نشان دهید چگونه می شود برای محاسبه مجموع ترازها از انتگرال به جای سیگما استفاده کرد؟

اگر جمع ترازهای مختلف انرژی را به فرم زیر در نظر بگیریم:

$$S = \sum_q f(u_q)$$

وتغییرات پارامتر u را بر حسب q آنقدر ملایم در نظربگیریم که بتوانیم بنویسیم:

$$u_{q+1} - u_q \cong \frac{du}{dq}$$

آنگاه تعداد اجزای جمع در طول بازه را می توانیم بنویسیم:

$$\Delta u/(\frac{du}{dq})$$

و همچنین چگالی حالتها را اگر بصورت زیر تعریف کنیم:

$$g(u) = \frac{1}{(\frac{du}{dq})}$$

آنگاه جمع را می توان بصورت زیر نوشت:

$$S = \sum_q f_q \equiv \sum_q f(u_q) \approx \sum_u f(u)g(u)\Delta u$$

که با یک مشابه سازی می توانیم بنویسیم:

$$S \approx \int f(u)g(u)du$$

۴- توضیح دهید چرا تابع ویژه ممنتوم $\Psi_k(z)= C_k exp(ikz)$ را نمی توان به روشهای مرسوم قبلی نرمالایز کرد؟ راه حل نرمالیز کردن این توابع چیست؟

اگر بخواهیم با روشهای قبلی این تابع موج را نرمالیز کنیم آنگاه خواهیم داشت:

$$\varphi_k(z) = C_k \exp\,(ikz)$$

طرفین را به توان دو می رسانیم:

$$|\varphi_k(z)|^2 = |C_k|^2$$

ملاحظه می شود در طول بازه z مقدار $|\Psi_k(z)|^2$ به ازای ترازهای مختلف می تواند بینهایت مقدار داشته باشد. بنابراین نمی توان با روشهای مرسوم قبلی نمی توان تابع فوق را نرمالیز کنیم.

این مشکل عمدتا زمانی رخ می دهد که ویژه مقدارها در یک بازه پیوسته قرار می گیرند و می توانند هر مقداری را اختیار کنند. راه حل نرمالیز کردن اینگونه توابع استفاده از تابع دلتا دیراک است

۵- نمونه ای از یک وضعیت را مثال بزنید که در آن اپراتورهای جابجاپذیر برای اندازه گیری کمیتهای مختلف مورد استفاده قرار می گیرد؟

برای این حالت می توان وضعیتی را متصور شد که در آن ذره ای دارای پتانسیل یکسان در همه نقاط است. در این وضعیت اپراتور انرژی و اپراتور مومنتوم دارای تابع ویژه یکسان هستند در حالیکه اپراتورها دارای خاصیت جابجایی نسبت به یکدیگر هستند.

۶- توضیح دهید چه زمانی مشکلات نرمالیزاسیون پیش می آید؟ دو نمونه مثال برای این وضعیت ذکر کنید؟

این مشکل عمدتا زمانی رخ می دهد که مقادیر ویژه بتوانند مقادیری در یک رنج بسیار نزدیک به هم (پیوسته) اختیار کنند. نمونه ای از این وضعت مانند ترازهای بالای سد پتانسیل محدود و یا ترازهای بالای انرژی یونیزاسیون اتم هیدروژن.

۷- تابع دلتای مورد استفاده در نرمالیزاسیون توابع موج سه بعدی را چگونه باید محاسبه و مورد استفاده قرار داد؟

باید تابع دلتا در هر کدام از ابعاد را جداگانه محاسبه کرده و سپس نتایج هر بعد را در نهایت در هم ضرب می کنیم:

$$\delta(\mathbf{r}) = \delta(x)\delta(y)\delta(z)$$

۸- نشان دهید عملگر $x\frac{d}{dx}$ خطی است.

$$x\frac{d}{dx}\left(c\psi(x)\right) = cx\frac{d}{dx}\psi(x)$$

$$\frac{d}{dx}\left(\psi_1(x)+\psi_2(x)\right) = x\frac{d}{dx}\psi_1(x) + x\frac{d}{dx}\psi_2(x)$$

۹- رابطه جابجایی دو عملگر x و $\frac{d}{dx}$ را بدست آورید

$$[x, \frac{d}{dx}]\ \psi(x) = (x\frac{d}{dx} - \frac{d}{dx}x)\ \psi(x)$$

$$= (x\frac{d}{dx}\ \psi(x) - \frac{d}{dx}x\ \psi(x)$$

$$= x\frac{d}{dx}\ \psi(x) - \psi(x) - x\frac{d}{dx}\ \psi(x)$$

$$= -\ \psi(x)$$

.

۱۰- مزدوج هرمیتی عملگر $\frac{d}{dx}$ را به دست آورید.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \emptyset(x)(\hat{A}\,\psi(x))^* dx = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x)\ \hat{A}^\dagger \emptyset(x) \qquad (۲-۱۸الف)$$

$$\hat{A} = \frac{d}{dx}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x)\ (\frac{d}{dx})^\dagger \emptyset(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \emptyset(x)[\frac{d}{dx}\psi(x)]^*$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \emptyset(x)\left[\frac{d}{dx}\psi^*(x)\right]$$

$$= \emptyset(x)\psi^*(x)\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x)\left(\frac{d}{dx}\right)\emptyset(x)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x)(\frac{d}{dx})^\dagger \emptyset(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*(x)\ (-\frac{d}{dx})\emptyset(x) \qquad (۲-۱۹)$$

$$(\frac{d}{dx})^\dagger = -\frac{d}{dx} \qquad (۲-۲۰)$$

۱۲- نشان دهید عملگر $i\frac{d}{dx}$ هرمیتی است؟

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\emptyset(x)\,(\hat{A}\,\psi(x))^{*}dx = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\psi^{*}(x)\,\hat{A}^{\dagger}\emptyset(x) \qquad (۲-۱۸الف)$$

$\hat{A} = i\frac{d}{dx}$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\emptyset(x)\left(\left(i\frac{d}{dx}\right)\psi^{*}(x)\right)^{*} = -\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\emptyset(x)[(i\frac{d}{dx})\psi^{*}(x)]$$

$$= -i\emptyset(x)\psi^{*}(x)\Big|_{-\infty}^{+\infty} + \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\psi^{*}(x)\left(i\frac{d}{dx}\right)\emptyset(x)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\psi^{*}(x)(i\frac{d}{dx})^{\dagger}\emptyset(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx\,\psi^{*}(x)\,(i\frac{d}{dx})\emptyset(x) \qquad (۲-۲۳)$$

$$(i\frac{d}{dx})^{\dagger} = i\frac{d}{dx} \qquad (۲-۲۴)$$

۱۳= دو کمیت را تحت چه شرایطی میتوان بطور دقیق اندازه گیری کرد؟ (بین دو کمیت تحت چه شرایطی اصل عدم قطعیت هایزنبرگ وجود ندارد).

در صورتی که عملگرهای مربوط به دو مشاهده پذیر A و B با هم جابجا شوند، یعنی داشته باشیم: $[\hat{A},\hat{B}]=0$، دو عملگر روی یکدیگر تاثیر ندارند و هر دو کمیت را میتوان بطور دقیق اندازه گیری کرد.

فصل ششم- روش‌های تقریبی در مکانیک کوانتوم (طراحی: شیردل)

۱- روش‌های تقریبی رایج برای حل مسائل مکانیک کوانتوم را نام ببرید.

۱- استفاده از زیرمجموعه های پایه محدود (ماتریسهای محدود)

۲- تئوری اختلال (مستقل از زمان و وابسته به زمان)

۳- روش وردشی

۲- هامیلتونی چاه پتانسیل که میدان الکتریکی به آن اعمال شده است را با استفاده از کمیتهای بدون بعد بنویسید.

$$\hat{H} = -\frac{1}{\pi^2}\frac{d^2}{d\xi^2} + \mathrm{f}\left(\xi - 1/2\right)$$

$$E_1^{\infty} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{L_z}\right)^2 \qquad \mathrm{E}_o = \frac{E_1^{\infty}}{eL_z} \qquad \mathrm{f} = \frac{\mathrm{E}}{\mathrm{E}_o} \qquad \xi = z / L_z$$

E_1^{∞} انرژی حالت پایه برای چاه پتانسیل بی نهایت است.

۳- روش زیرمجموعه های پایه محدود را توضیح دهید.

فرض کنید توابع و مقادیر ویژه هامیلتونی غیرمختل H_0 را می‌دانیم و می‌خواهیم توابع و مقادیر ویژه هامیلتونی مختل شده H را به دست آوریم. در روش تقریبی زیرمجموعه های پایه محدود اپراتورها و توابع با ماتریس و بردارها جایگزین می‌شوند، در اینصورت مساله مکانیک کوانتومی به مساله جبری تبدیل شده و با حل عددی می‌توانیم مقادیر و بردارهای ویژه را بدست آوریم. انتخاب مجموعه پایه های محدود یا همان ماتریس هامیلتونی امری خلاقانه و هنرمندانه است و قاعده مشخصی برای این انتخاب وجود ندارد، یک انتخاب بد می‌تواند منجر به جواب های غیر معتبر شود. البته انتخاب معمول در این مورد می‌تواند توابع ویژه مساله غیرمختل باشد.

۴- روش زیر مجموعه های پایه محدود را برای حل مساله چاه پتانسیل بینهایت که میدان الکتریکی به آن اعمال شده است، به کار ببرید.

$$H_{ij} = -\frac{1}{\pi^2}\int_0^1 \psi_i^*(\xi)\frac{d^2}{d\xi^2}\psi_j(\xi)\,d\xi + \mathrm{f}\int_0^1 \psi_i^*(\xi)(\xi - 1/2)\psi_j(\xi)\,d\xi \qquad \mathrm{f} = 3$$

$$\psi_n(\xi) = \sqrt{2}\sin(n\pi\xi) \qquad \hat{H} = \begin{bmatrix} 1 & -0.54 & 0 \\ -0.54 & 4 & -0.584 \\ 0 & -0.584 & 9 \end{bmatrix}$$

$$\varepsilon_1 \simeq 0.90419,\ \varepsilon_2 \simeq 4.0275,\ \varepsilon_3 \simeq 9.0173 \qquad |\phi_1\rangle = \begin{bmatrix} 0.985 \\ 0.174 \\ 0.013 \end{bmatrix},\ |\phi_2\rangle = \begin{bmatrix} -0.175 \\ 0.978 \\ 0.115 \end{bmatrix},\ |\phi_2\rangle = \begin{bmatrix} -0.007 \\ -0.115 \\ 0.993 \end{bmatrix}$$

$$\phi_1(\xi) = 0.985\sqrt{2}\sin(\pi\xi) + 0.174\sqrt{2}\sin(2\pi\xi) + 0.013\sqrt{2}\sin(3\pi\xi)$$

۵- تئوری اختلال مستقل از زمان را توضیح دهید؟

فرض کنید که مقادیر و توابع ویژه هامیلتونی H_0 را بطور دقیق می‌شناسیم، حال می‌خواهیم طیف هامیلتونی $H=H_0+\gamma H_p$ را به تقریب به دست آوریم، تئوری اختلال روشی است که به ما این امکان را می‌دهد که مقادیر ویژه و بردارهای ویژه H رابه صورت یک سری توانی از پارامتر γ پیدا کنیم.

۶- مقادیر و توابع ویژه هامیلتونی مختل را بصورت سری توانی از پارامتر γ بنویسید.

$$|\phi\rangle = |\phi^{(0)}\rangle + \gamma|\phi^{(1)}\rangle + \gamma^2|\phi^{(2)}\rangle + \gamma^3|\phi^{(3)}\rangle + \cdots$$

$$E = E^{(0)} + \gamma E^{(1)} + \gamma^2 E^{(2)} + \gamma^3 E^{(3)} + \cdots$$

۷- معادله اختلال مرتبه صفر، اول و دوم را بنویسید.

$$\left(\hat{H}_o - E_m\right)|\psi_m\rangle = 0$$

$$\left(\hat{H}_o - E_m\right)|\phi^{(1)}\rangle = \left(E^{(1)} - \hat{H}_p\right)|\psi_m\rangle$$

$$\left(\hat{H}_o - E_m\right)|\phi^{(2)}\rangle = \left(E^{(1)} - \hat{H}_p\right)|\phi^{(1)}\rangle + E^{(2)}|\psi_m\rangle$$

۸- برای به دست آوردن مقادیر و توابع ویژه در تئوری اختلال معمولا محاسبه چند جمله سری توانی کفایت می‌کند؟

معمولا پیدا کردن جملات اول و دوم به آسانی امکان پذیر است اما هرچه که پیش می‌رویم محاسبات دشوارتر و طولانی تر می‌شود، خوشبختانه همان جملات اولیه (مرتبه صفر و یک) برای بسیاری از مقاصد علمی کفایت می‌کند.

۹- شیوه محاسبه تصحیح انرژی مرتبه اول را در تئوری اختلال غیرواگن شرح دهید.

$$\left(\hat{H}_o - E_m\right)|\phi^{(1)}\rangle = \left(E^{(1)} - \hat{H}_p\right)|\psi_m\rangle$$

$$\langle\psi_m|\hat{H}_o - E_m|\phi^{(1)}\rangle = \left(\langle\psi_m|\hat{H}_o - E_m\right)|\phi^{(1)}\rangle = \langle\psi_m|\left(E_m - E_m\right)|\phi^{(1)}\rangle = 0$$

$$= \langle\psi_m|E^{(1)} - \hat{H}_p|\psi_m\rangle = E^{(1)} - \langle\psi_m|\hat{H}_p|\psi_m\rangle$$

$$E^{(1)} = \langle\psi_m|\hat{H}_p|\psi_m\rangle$$

۱۰- رابطه مربوط به تصحیح تابع موج مرتبه اول را در تئوری اختلال غیرواگن بنویسید.

$$|\phi^{(1)}\rangle = \sum_{n\neq m}\frac{\langle\psi_n|\hat{H}_p|\psi_m\rangle}{E_m - E_n}|\psi_n\rangle$$

۱۱- در تئوری اختلال برای محاسبه n امین تقریب انرژی، نیاز به چه اطلاعات قبلی داریم؟

کافیست n-1 امین تقریب تابع موج را بدانیم.

۱۲- تصحیح مرتبه اول و دوم انرژی و همچنین انرژی کل را برای یک ذره در چاه پتانسیل بی‌نهایت که به آن میدان الکتریکی اعمال شده است، به دست آورید.

$$\hat{H}_o = -\frac{1}{\pi^2}\frac{d^2}{d\xi^2} \qquad \hat{H}_p = \mathrm{f}\left(\xi - 1/2\right)$$

$$E^{(1)} = \langle \psi_m | \hat{H}_p | \psi_m \rangle = \mathrm{f}\int_0^1 \sqrt{2}\sin\left(m\pi\xi\right)\left(\xi - 1/2\right)\sqrt{2}\sin\left(m\pi\xi\right)d\xi$$

$$= 2\mathrm{f}\int_0^1 \left(\xi - 1/2\right)\sin^2\left(m\pi\xi\right)d\xi$$

$$= 0$$

با توجه به اینکه نسبت به مرکز چاه، ترم اول انتگرال تابعی فرد و مربع سینوس تابعی زوج است پس حاصل انتگرال صفر است.

$$H_{puv} = \mathrm{f}\int_0^1 \sqrt{2}\sin\left(u\pi\xi\right)\left(\xi - 1/2\right)\sqrt{2}\sin\left(v\pi\xi\right)d\xi$$

$$E^{(2)} \cong \sum_{u=2}^{q}\frac{\left|H_{pu1}\right|^2}{\varepsilon_1 - \varepsilon_u} \qquad E^{(2)} = -0.0975 \qquad \eta_1 \cong \varepsilon_1 + E^{(1)} + E^{(2)} = 0.9025$$

۱۳- در سوال قبل چرا تصحیح مرتبه اول انرژی صفر شد؟

بدلیل تقارن موجود در مساله، تصحیح مرتبه اول انرژی صفر است. اگر فرض کنیم تصحیح مرتبه اول انرژی وجود داشته باشد و متناسب با میدان اعمالی باشد لذا با تغییر جهت میدان اعمالی، باید علامت انرژی تغییر کند اما مشخص است که این مساله در جهت + یا – زیتا (ζ) متقارن است لذا تغییر انرژی به تغییر جهت میدان اعمالی وابسته نیست. پس اجبارا تصحیح مرتبه اول انرژی صفر است.

۱۴- آیا تئوری اختلال برای مواردی که اختلال نسبتا بزرگی به سیستم اعمال شود هم معتبر است؟ خیر

۱۵- تاثیر اختلال بر روی واگنی چیست؟

اعمال اختلال باعث از بین رفتن واگنی می‌شود، یعنی هر حالت دارای انرژی مجزایی خواهد شد.

۱۶- معادله اختلال واگن مرتبه اول را با حالت غیر واگن مقایسه کنید.

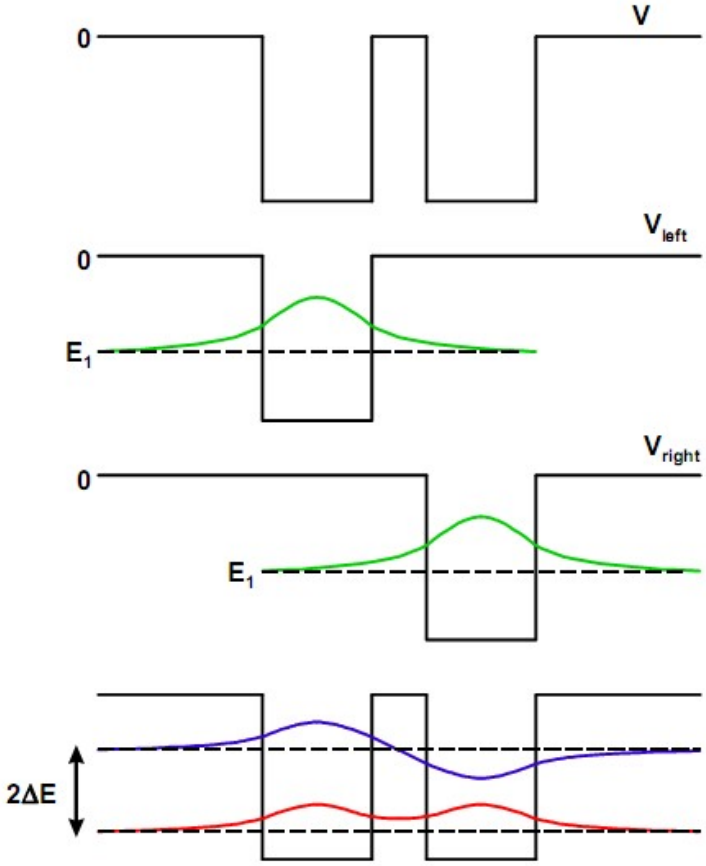
$$\left(\hat{H}_o - E_m\right)\left|\phi^{(1)}\right\rangle = \left(E^{(1)} - \hat{H}_p\right)\left|\psi_m\right\rangle$$

$$\left(\hat{H}_o - E_m\right)\left|\phi^{(1)}\right\rangle = \left(E^{(1)} - \hat{H}_p\right)\left|\psi_{mtot}\right\rangle$$

$$\left|\psi_{mtot}\right\rangle = \sum_{s=1}^{r} a_{ms}\left|\psi_{ms}\right\rangle$$

در حالت واگن تابع موج حالت m ام، ترکیب خطی همه توابع موج با انرژی E_m درنظرگرفته می‌شود.

۱۷- اگر دوچاه پتانسیل که دارای حالت پایه با انرژی E1 با هم کوپل شوند، حالت های چاه پتانسیل کوپل شده را رسم کنید.



در چاه کوپل شده، حالت پایین تر متقارن و حالت بالاتر پادمتقارن است.

۱۸- روش وردشی را توضیح دهید.

روش وردشی روشی است که به کمک آن می‌توانیم یک حد بالا برای انرژی حالت پایه یک هامیلتونی پیدا کنیم به این معنا که می-توانیم بگوییم انرژی پایه هرچه باشد، از یک مقدار معین کمتر است. این روش نیازمند محاسبه متوسط انرژی روی یک حالت اولیه است که آن را حالت یا تابع موج آزمایشی می‌گویند که هرچه با دید فیزیکی بهتری انتخاب شود جواب به دست آمده معتبرتر است. حالت آزمایشی را تابعی از متغیر وردشی تعریف می‌کنیم و با مساوی صفر قرار دادن مشتق متوسط انرژی و محاسبه کمترین مقدار متغیر وردشی، حد بالای انرژی را محاسبه می‌کنیم.

۱۹- روش وردشی را برای مساله چاه پتانسیل بینهایت که میدان الکتریکی به آن اعمال شده است، به کار ببرید.

$$\phi_{trial}\left(\xi, a_{\text{var}}\right) = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{1+a_{\text{var}}^2}}\left(\sin \pi\xi + a_{\text{var}} \sin 2\pi\xi\right)$$

$$\left\langle E\left(a_{\mathrm{var}}\right)\right\rangle = \frac{1}{1+a_{\mathrm{var}}^2}\left[\varepsilon_1\left(1+4a_{\mathrm{var}}^2\right)-\frac{32a_{\mathrm{var}}\mathrm{f}}{9\pi^2}\right]$$

$$\frac{d\left\langle E\left(a_{\mathrm{var}}\right)\right\rangle}{da_{\mathrm{var}}} = \frac{2}{9\pi^2}\frac{16\mathrm{f}a_{\mathrm{var}}^2+27\pi^2 a_{\mathrm{var}}-16\mathrm{f}}{\left(1+a_{\mathrm{var}}^2\right)^2}$$

$$a_{\mathrm{var\,min}} = \frac{-27\pi^2+\sqrt{\left(27\pi^2\right)^2+1024\mathrm{f}^2}}{32\mathrm{f}}$$

$$\left\langle E\left(0.175\right)\right\rangle \cong 0.906$$

فصل هفتم- تئوری اختلال وابسته به زمان (طراحی: شیردل)

۱- هامیلتونی سیستم در تئوری اختلال وابسته به زمان چگونه تعریف می‌شود؟

تئوری اختلال وابسته به زمان روشی برای حل تقریبی معادله شرودینگر است و زمانی مورد استفاده قرار می‌گیرد که هامیلتونی سیستم وابسته به زمان باشد. در این تئوری هامیلتونی سیستم بصورت زیر درنظرگرفته می‌شود که در آن H_0 قسمتی از هامیلتونی است که با زمان ثابت است و H_p اختلال های کوچکی است که به H_0 اضافه شده اند و بستگی به زمان دارد.

$$\hat{H} = \hat{H}_o + \hat{H}_p(t)$$

۲- رابطه های مربوط به تصحیح مرتبه اول و صفرم را در تئوری اختلال وابسته به زمان بنویسید.

$$\dot{a}_q^{(0)}(t) = 0 \qquad \dot{a}_q^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\sum_n a_n^{(0)} \exp\left(i\omega_{qn}t\right)\left\langle \psi_q \middle| \hat{H}_p(t) \middle| \psi_n \right\rangle$$

در تصحیح مرتبه اول $\omega_{qn}=(E_q-E_n)/\hbar$ است. a_q ضرایب بسط تابع موج بر حسب توابع ویژه است.

۳- در تئوری اختلال وابسته به زمان آیا می‌توان تصحیح های مرتبه بالاتر را با دانستن تصحیح های قبل آن به دست آورد؟ بله، رابطه زیر نشان می‌دهد که با در اختیار داشتن تصحیح مرتبه p می‌توان تصحیح مرتبه p+1 را به دست آورد.

$$\dot{a}_q^{(p+1)}(t) = \frac{1}{i\hbar}\sum_n a_n^{(p)} \exp\left(i\omega_{qn}t\right)\left\langle \psi_q \middle| \hat{H}_p(t) \middle| \psi_n \right\rangle$$

۴- چند مثال از موارد کاربرد تئوری اختلال وابسته به زمان مرتبه اول و مرتبه های بالاتر را بنویسید.

برای درک ویژگی های نوری خطی مواد مثل جذب و گسیل از تئوری اختلال مرتبه اول و برای درک پدیده های نوری غیر خطی مثل تولید هارمونیک دوم و سوم، تولید فرکانس مجموع و تفاضل، ضریب شکست غیرخطی و ... از تئوری اختلال مرتبه های بالاتر استفاده می‌شود

۵- رابطه زیر احتمال گذار بین حالتهای ویژه ی m و j را نشان میدهد. توضیح دهید کدام عبارت معرف پدیده جذب فوتون و کدام عبارت معرف پدیده گسیل فوتون است؟

$$P(j) \simeq \frac{t_o^2}{\hbar^2}\left|\left\langle \psi_j \middle| \hat{H}_{po} \middle| \psi_m \right\rangle\right|^2 \left\{ \left[\frac{\sin\left[\left(\omega_{jm}-\omega\right)t_o/2\right]}{\left(\omega_{jm}-\omega\right)t_o/2}\right]^2 + \left[\frac{\sin\left[\left(\omega_{jm}+\omega\right)t_o/2\right]}{\left(\omega_{jm}+\omega\right)t_o/2}\right]^2 \right\}$$

اگر Ej>Em باشد، عبارت سینک سمت چپ جمله اساسی خواهد بود که در اینصورت رابطه معرف پدیده جذب خواهد بود و اگر Ej<Em باشد، عبارت سینک سمت راست جمله اساسی خواهد بود که در اینصورت رابطه معرف پدیده گسیل خواهد بود

۶- قانون طلایی فرمی را توضیح دهید.

اگر مجموعه تمام گذارهای ممکن در مجاورت انرژی $\hbar\omega_{jm}$ را در نظر گرفته و چگالی این گذارها را با $g_j(\hbar\omega)$ نشان دهیم در اینصورت نرخ گذار یا جذب فوتون به کمک رابطه زیر بیان می‌شود که قانون طلایی فرمی نامیده می‌شود و یکی از نتایج مفید تئوری اختلال وابسته به زمان محسوب می‌گردد

$$W = \frac{2\pi}{\hbar}\left|\left\langle \psi_j \middle| \hat{H}_{po} \middle| \psi_m \right\rangle\right|^2 g_J(\hbar\omega)$$

۷- برای محاسبه ضریب شکست خطی از تئوری اختلال وابسته به زمان مرتبه ..... استفاده می‌شود. جواب: اول

۸- تفاوت کلیدی بین ضریب شکست و جذب چیست؟

برای جذب، فرکانس نور فرودی (ω) باید بسیار نزدیک به فرکانس گذار ω_{nm} باشد تا فوتون جذب شود اما برای ضریب شکست، تاثیر یک گذار مشخص از حالت m به n چندان مهم نیست، لذا حتی اگر ω نزدیک به ω_{nm} هم نباشد اهمیت جندانی ندارد.

۹- با در نظرگرفتن تئوری اختلال تا مرتبه سوم، رابطه قطبش به صورت زیر نوشته می‌شود. هر یک از ترمهای قطبش به چه معناست؟

$$\langle \mathrm{P}(t)\rangle = \frac{1}{V}\langle \Psi|\mu|\Psi\rangle \cong \frac{1}{V}\left\langle \Phi^{(0)}+\Phi^{(1)}+\Phi^{(2)}+\Phi^{(3)}\middle|\mu\middle|\Phi^{(0)}+\Phi^{(1)}+\Phi^{(2)}+\Phi^{(3)}\right\rangle$$
$$\cong \left\langle \mathrm{P}^{(0)}(t)\right\rangle + \left\langle \mathrm{P}^{(1)}(t)\right\rangle + \left\langle \mathrm{P}^{(2)}(t)\right\rangle + \left\langle \mathrm{P}^{(3)}(t)\right\rangle$$

جواب:

$$\left\langle \mathrm{P}^{(0)}\right\rangle = \frac{1}{V}\left\langle \Phi^{(0)}\middle|\mu\middle|\Phi^{(0)}\right\rangle$$

قطبش ایستای ماده

$$\left\langle \mathrm{P}^{(1)}(t)\right\rangle = \frac{1}{V}\left(\left\langle \Phi^{(0)}\middle|\mu\middle|\Phi^{(1)}\right\rangle + \left\langle \Phi^{(1)}\middle|\mu\middle|\Phi^{(0)}\right\rangle\right)$$

قطبش خطی که ضریب شکست خطی را به دست می‌دهد

$$\left\langle \mathrm{P}^{(2)}(t)\right\rangle = \frac{1}{V}\left(\left\langle \Phi^{(0)}\middle|\mu\middle|\Phi^{(2)}\right\rangle + \left\langle \Phi^{(2)}\middle|\mu\middle|\Phi^{(0)}\right\rangle + \left\langle \Phi^{(1)}\middle|\mu\middle|\Phi^{(1)}\right\rangle\right)$$

قطبش مرتبه دوم که پدیده هایی مثل تولید هارمونیک دوم و تولید فرکانس مجموع و تفاضل را معرفی می‌کند

$$\left\langle \mathrm{P}^{(3)}(t)\right\rangle = \frac{1}{V}\left(\left\langle \Phi^{(0)}\middle|\mu\middle|\Phi^{(3)}\right\rangle + \left\langle \Phi^{(3)}\middle|\mu\middle|\Phi^{(0)}\right\rangle + \left\langle \Phi^{(1)}\middle|\mu\middle|\Phi^{(2)}\right\rangle + \left\langle \Phi^{(2)}\middle|\mu\middle|\Phi^{(1)}\right\rangle\right)$$

قطبش مرتبه سوم که پدیده هایی مثل تولید هارمونیک سوم و ضریب شکست غیرخطی را معرفی می‌کند

فصل هشتم- مکانیک کوانتوم در مواد کریستالی (طراحی: مسلمی زاده)

۱- تقریب تک الکترون را توضیح دهید.

برای شبکه های کریستالی به دلیل اینکه تعداد اتم ها بسیار زیاد است برای بررسی آنها از یک سری تقریب ها استفاده می شود. اگر فرض کنیم هر الکترون در شبکه کریستالی، پتانسیل $V_p(r)$را ببیند، این پتانسیل با دوره تناوب شبکه پریودیک خواهد بود که به آن پتانسیل پریودیک متناوب می‌گویند.

این یک تقریب است که فرض های زیر در آن لحاظ شده است:

-بار هسته ثابت است

-توزیع بار سایر الکترون ها ثابت است

-هر electron state سعی در برهم زدن شبکه کریستالی دارد که از این اثر صرفنظر شده است

-هر electron state با سایر الکترون ها برهم کنش دارد که از آن صرفنظر میشود

معادله شرودینگر برای این تقریب بدین صورت خواهد بود:

$$\frac{-\hbar^2}{2m_e}\nabla^2\psi(r) + V_p(r)\psi(r) = E\psi(r)$$

۲- تئوری بلاخ را توضیح دهید

تئوری بلاخ یک قضیه بسیار مهم و ساده شده در شبکه های کریستالی است که به ما اجازه می دهد که مسائل را به دو قسمت تقسیم کنیم

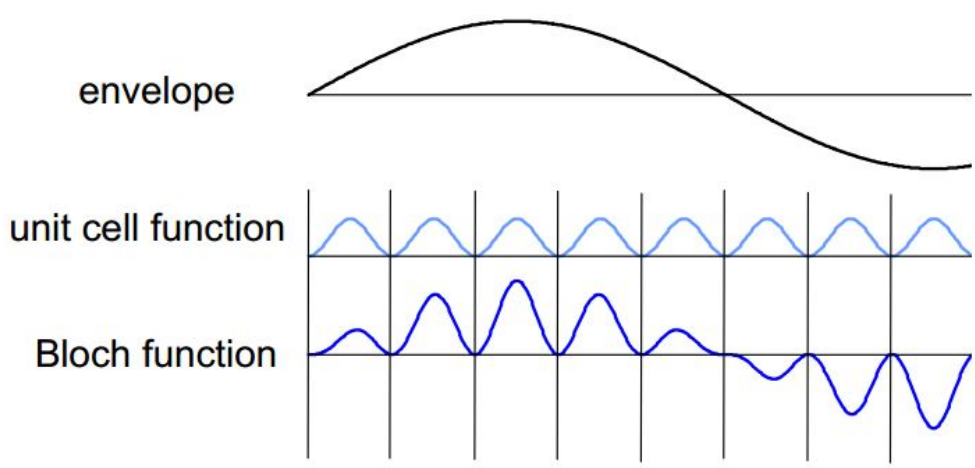
-قسمتی که برای همه سلول های واحد یکسان است

- قسمتی که رفتار کلی را شرح میدهد

با توجه به اینکه پتانسیل با دوره تناوب شبکه متناوب است و نیز اینکه خود تابع موج یک کمیت قابل مشاهده نیست و در نتیجه لزومی ندارد که پریودیک باشد پس تابع موج بدین صورت خواهد بود که با تبدیل x به r تابع بلاخ را در سه بعد خواهیم داشت :

$$\varphi(x+a) = \varphi(x)e^{ika}$$

$$k = \frac{2\pi n}{Na}$$



۳- برای یک شبکه کریستالی چگالی حالات به چه صورت خواهد بود؟

با فرض شبکه های مکعبی، حجم بدین صورت است:

$$\delta V_k = \frac{(2\pi)^3}{V}$$

که V حجم کریستال است

بنابراین چگالی حالات در فضای k، بصورت $\frac{1}{\delta V_k}$ خواهد بود، بنابراین با افزایش حجم کریستال، چگالی حالات افزایش می یابد.

بنابراین کمیتی را بعنوان چگالی حالات بر واحد حجم تعریف میکنیم که بستگی به حجم ندارد:

$$g(k) = \frac{1}{(2\pi)^3}$$

۴- نحوه محاسبه دیاگرام باند در ساختارهای کریستالی چگونه است؟

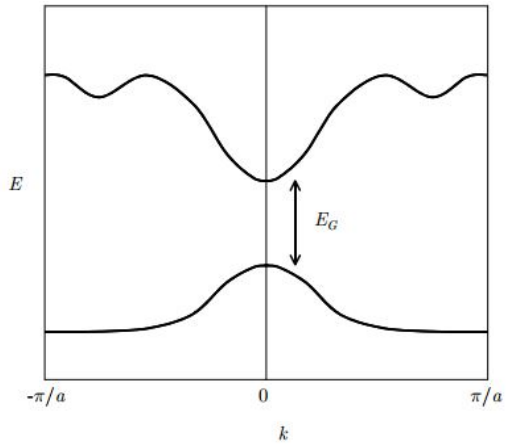
با داشتن معادله تقریب تک الکترون شرودینگر و نیز استفاده از تابع بلاخ و با داشتن پتانسیل $V_p(r)$ و حل آنها میتوان انرژی را برای تمام حالات ممکن بدست آورد که به آن دیاگرام باند انرژی میگویند

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2\psi(\mathbf{r}) + V_p(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

$$\psi(\mathbf{r}) = u(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{k}.\mathbf{r})$$

۵- توضیحاتی در مورد دیاگرام باند:

در هر دیاگرام باند، چندین باند وجود دارد اما معمولا تعداد کمی از آنها برای بررسی ویژگی های ماده کاربرد دارند. در هر باند تعداد حالات مجاز بابر با تعداد سلول های واحد موجود در کریستال است. این حالات در فضای k، دارای فاصله های مساوی با یکدیگر هستند. برای رسم آنها $\frac{-\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a}$ خواهد بود، که به آن ناحیه بریلوین اول می گویند



باندها بگونه ای رسم می‌شوند که بنظر پیوسته می‌آیند اما در واقع گسسته هستن. پایین ترین باند، بالاترین باند والانس و بالاترین باند، پایین ترین باند هدایت (در نیمه هادی ها) خواهد بود. E_G انرژی باند گپ است که تفاوت انرژی این دو باند را نشان می‌دهد

۶- واگنی کرامر را توضیح دهید.

دیاگرام باند حول نقطه k=0 متقارن است و باعث می‌شود مقدار انرژی برای مقادیر k و k– برابر باشد که با آن واگنی کرامر می-گویند

۷- تئوری جرم موثر را توضیح دهید.

وجود نقاط min یا max در k=0 عادی است. وجود اینگونه نقاط باعث ایجاد خواص و کاربردهایی در دستگاه های الکترونیکی و اپتوالکترونیکی شده است. بنابراین ما نیاز داریم تا یک مدل ساده شده و تقریبی داشته باشیم که رفتار ماده را در این نقاط بدست بدهد.برای این منظور از تقریب جرم موثر استفاده میکنیم. نزدیک نقاط max و min، انرژی E_k بصورت مربعی با k تغییر میکند، و فرض میکنیم این تغییر همسانگرد است و نقاط اکسترمم در k=0 هستند بنابراین رابطه بین E_k و k بدین صورت خواهد بود که دلیل آن از حوصله بحث خارج است

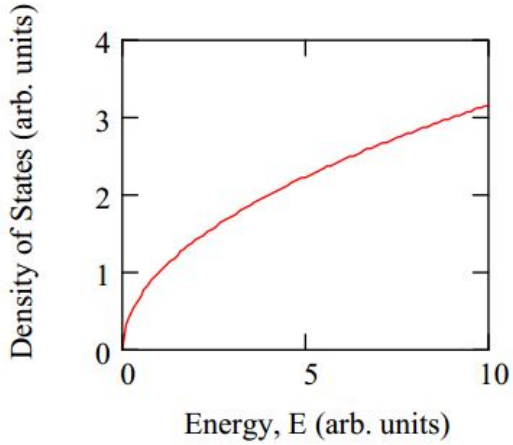
$$E_k = \frac{h^2 k^2}{2m_{eff}} + V$$

کمیت m_{eff} پارامتری است که این تناسب را برقرار میکند و به آن جرم موثر میگویند. به این رابطه، رابطه پاشندگی میگویند.

۸- چگالی حالات در فضای سه بعدی را بنویسید.

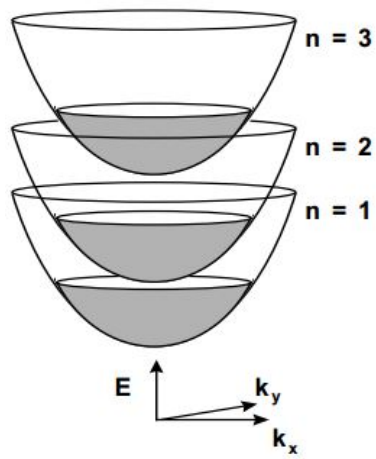
با استفاده از رابطه پاشندگی و اینکه هر الکترون دو اسپین دارد پس از ساده سازی خواهیم داشت:

$$g(E) = \frac{1}{2\pi^2}\left(\frac{2m_{eff}}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}}(E-V)^{1/2}$$



۹- منظور از زیرباندها چیست؟

انرژی های مجاز E_n مربوط به چاه کوانتومی، مجموع انرژی های متعلق به حالت n به اضافه انرژی های اضافی $\frac{\hbar^2 k_{xy}^2}{2m_{eff}}$ هستند که این انرژیها مربوط به حرکات درون صفحه ای الکترون هاست



در نتیجه ما علاوه بر سطوح گسسته انرژی، زیر باند نیز خواهیم داشت و انرژی مربوط به E_n در کف هر زیرباند قرار دارد.

۱۰- چگالی حالات در یک چاه کوانتومی را توضیح دهید.

در حالت دو بعدی:

در جهت x، k_x با فواصل $\frac{2\pi}{l_x}$ میباشد.

در جهت y، k_y با فواصل $\frac{2\pi}{l_y}$ میباشد.

در نتیجه هر k_{xy} بصورت $\frac{(2\pi)^2}{l_x l_y}$ خواهد بود.

بنابراین چگالی حالات در واحد سطح بصورت زیر خواهد بود:

$$g_{2D}(k_{xy}) = \frac{1}{(2\pi)^2}$$

با فرض داشتن رابطه پاشندگی بصرت پارابولیک و نیز در نظر گرفتن دو اسپین برای هر الکترون چگالی حالات بدین صورت خواهد بود:

$$g_{2D}(E_{xy})dE_{xy} = \frac{2}{(2\pi)^2} 2\pi \sqrt{\frac{2m_{eff}}{h^2}} \sqrt{E_{xy}} \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2m_{eff}}{h^2}} \frac{1}{\sqrt{E_{xy}}} dE_{xy}$$

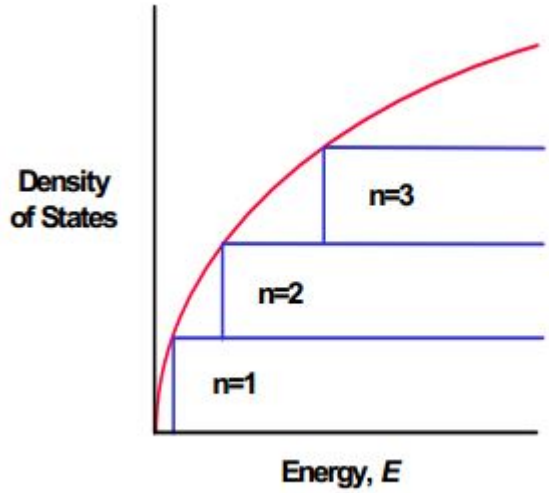
$$g_{2D}(E_{xy}) = \frac{m_{eff}}{\pi h^2}$$

و چگالی حالات در سه بعد بدین صورت خواهد بود:

$$g(E) = \frac{1}{2\pi^2} (\frac{2m_{eff}}{h^2})^{3/2} E^{1/2}$$

۱۱- تاثیر ضخامت چاه پتانسیل بر سطوح انرژی چگونه است؟

اگر ما چگالی حالات را برای چاه پتانسیل نامحدود رسم کنیم سطوح مختلف انرژی بصورت پله هایی خواهند بود که لبه ی آنها منحنی سهموی را لمس خواهد کرد و با افزایش ضخامت چاه، این پله ها به یکدیگر نزدیکتر خواهند شد، اما باز هم لبه های آنها منحنی سهموی را لمس خواهد کردو با افزایش خیلی زیاد ضخامت چاه، پله ها آنقدر به هم نزدیک می‌شوند که تشخیص آنها از هم دشوار خواهد بود



۱۲- اهمیت روش k.p در بررسی رفتار نیمه هادی ها را بیان کنید.

روش k.p روشی است که به کمک آن میتوان رفتار نیمه هادی ها را نزدیک نقاط max و min دیاگرام باند بررسی کرد و پدیده های مختلف را به یکدیگر مرتبط ساخت. یکی از مزایای این روش اینست که برای استفاده از آن پارامترهای کمی لازم است.

برای استفاده از این روش معادله بلاخ را در معادله شرودینگر جایگزین میکنیمو در نهایت به معادله زیر میرسیم:

$$\sum_{n'}\{\left[E_n(0)+\frac{h^2k^2}{2m_0}\right]\delta_{nn'}u_{n'}(0)=[E_n(k)-\frac{h^2k^2}{2m_0}]\sum_{n'}a_{n'}u_{n'(0)}(r)$$

بعنوان مثال اگر این معادله را برای دو باند ۱ و ۲ به فرم ماتریسی بنویسیم داریم:

$$\begin{bmatrix} E_1(0)+\frac{h^2k^2}{2m_0} & \frac{h}{m_0}k.P_{12} \\ \frac{h}{m_0}k.P_{21} & E_2(0)+\frac{h^2k^2}{2m_0} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}=\mathrm{E(k)}\begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}$$

برای حل این معادله با صفر کردن دترمینان ماتریس و با توجه به هرمیتی بودن اپراتور P و فرض اینکه P_{12} همسانگرد باشد و $\frac{\hbar^2k^2}{2m_0}$ در مقابل E(k) قابل صرفنظر باشد و اینکه E(0)=0 باشد، معادلات سهموی مربوط به باند والانس و هدایت بدست خواهد آمد. با جایگذاری $E_p=\frac{2}{m_0}|p_{12}|^2$ به معادله زیر میرسیم:

$$E(k)=E_g+\frac{E_p}{E_g}\frac{h^2k^2}{2m_0}$$

$$E(k) = -\frac{E_p}{E_g}\frac{h^2k^2}{2m_0}$$

به معادلات دو سهمی رسیدیم که باند والانس و هدایت را نمایش میدهند و برای بررسی خواص نیمه هادی به کار می‌روند

۱۳- نرخ جذب مستقیم از باند والانس به باند هدایت چگونه است؟

موجی با فرکانس ω که دارای بردار مغناطیسی پتانسیل بصورت زیر است را در نظر بگیرید:

$$A = e\{\frac{A_0}{2}\exp(i(k_{op}.r - \omega t)] + \frac{A_0}{2}\exp(-i(k_{op}.r - \omega t)\}]$$

$$\widehat{H}_{po}(r) = -\frac{eA_0\exp(ik_{op}.r)}{2m_0}e.\hat{p}$$

نرخ جذب مستقیم بدین صورت خواهد بود:

$$< \varphi_f|\widehat{H}_{po}|\varphi_i > = \int \varphi_f^*(r)\widehat{H}_{po}(r)\varphi_i(r)d^3r$$

که در آن ψ_i حالت اولیه الکترون در باند والانس با انرژی E_i و ψ_f حالت پایانی الکترون در باند هدایت با انرژی E_f است. در این محاسبه از این واقعیات استفاده شده است که:

-توابع موج الکترون در کریستال به فرم بلاخ هستند

-طول موج نوری خیلی بزرگتر از سلول واحد است

۱۴- نرخ جذب کل چیست؟

مجموع نرخ جذب های ممکن بین همه حالات ممکن اولیه و نهایی که به این صورت خواهد بود:

$$W_{TOT} = \frac{2\pi}{h}\frac{e^2A_0^2}{4m_0}|p_{cv}|^2\sum_k \delta[E_c(k) - E_v(k) - h\omega]$$

۱۵- ضریب جذب چیست؟

تعداد فوتون های فرودی بر واحد سطح بر ثانیه می باشد:

$$n_p = \frac{I}{h\omega}$$

که I شدت نوری است

$$\alpha = \frac{h\omega W_{TOT}}{I}$$

فصل نهم- تکانه زاویه ای (طراحی:کیخا)

۱- یکی از موارد استفاده از مومنتوم زاویه ای را بیان کنید؟

به طور خاص مومنتوم زاویه ای در حل مسائل مدل اتم هیدروژن کاربرد دارد.

۲- اجزای اپراتورهای مومنتوم زاویه ای در سه راستای x,y,z در دستگاه مختصات قطبی-کروی را بنویسید؟

$$\widehat{L_x} = ih(sin\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + cot\theta cos\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\widehat{L_y} = ih(-cos\varphi \frac{\partial}{\partial\theta} + cot\theta sin\varphi \frac{\partial}{\partial\varphi}$$

$$\widehat{L_z} = -ih \frac{\partial}{\partial\varphi}$$

۳- در حل معادله ویژه اپراتور مومنتوم زاویه ای در راستای مختصات z، تابع موج بدست آمده باید دارای چه خصوصیاتی باشد؟

باید هم تابع موج و هم مشتقاتش پیوسته باشند و تابع موج متناوب باشد. همچنین اپراتور مومنتوم زاویه ای حول محور z کوانتیزه می باشد.

۴- خاصیت جابجایی در اپراتورهای مومنتوم زاویه ای و مومنتوم خطی را با هم مقایسه کنید؟

اپراتورهای مومنتوم زاویه ای به دلیل عدم مشابهت توابع ویژه در سه راستای x,y,z با هم خاصیت جابجایی ندارند در حالیکه در مومنتوم خطی بین اجزای تجزیه شده در راستای محورهای عمود بر هم خاصیت جابجایی وجود دارد

۵- توابع ویژه مومنتوم خطی و مومنتوم زاویه ای را با هم مقایسه کنید؟

توابع ویژه مومنتوم خطی توابعی در جهت محور مشخص بر حسب موقعیت هستند در حالیکه توابع ویژه مومنتوم زاویه ای توابعی بر حسب زاویه نسبت به محورهای مختصات می باشد.

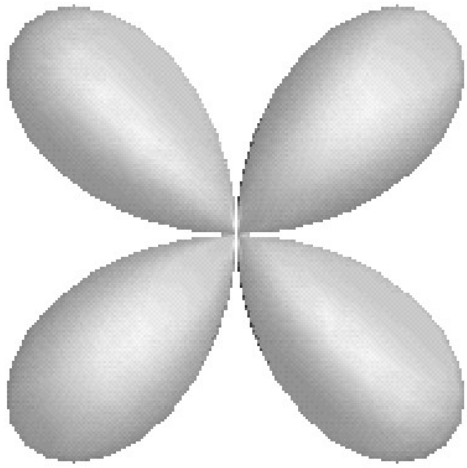
۶- منظور از هارمونیک کروی چیست؟

هارمونیک های کروی توابع ویژه اپراتور ممنتوم زاویه ای هستند که به فرم توابع لژاندر می‌باشند.

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta)\exp(im\phi)$$

۷- تجسم توابع هارمونیک کروی به چه شکل است؟

هارمونیک های کروی متناظر با مدهای لرزشی پوسته کروی هستند، برای تجسم بهتر می‌توانیم این توابع هارمونیک را روی کره رسم کنیم به این معنا که به ازای هر نقطه با مختصات (θ,φ) روی کره، شعاعی به اندازه $r=Y_{lm}(\theta,\varphi)$ روی همان نقطه رسم می-کنیم. مثلا برای $l=2, m=1$ به صورت زیر خواهد بود:



۸- برای وضعیت l=1, m=1 شکل گیری هارمونیک های کروی به چه صورت است؟

برای این وضعیت هارمونیک های کروی وابسته به $\sin m\varphi$ معرف توابعی هستند که حول $y=0$ نامتقارن می باشند