

MODELOWANIE NANOSTRUKTUR – EGZAMIN – 12.01.2013

- 1) Rozważmy ruch elektronu w dwóch półprzewodnikach scharakteryzowanych przez masy efektywne m_1^* oraz m_2^* . Funkcja falowa elektronu $\psi(z)$ w każdym z półprzewodników spełnia równanie

$$\frac{-\hbar^2}{2m_i^*} \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} = (E - V_{0i})\psi(z) \quad \text{gdzie } i=1,2, \text{ a } V_{0i} \text{ jest energią pasma przewodnictwa w półprzewodnikach 1 i 2}$$

Na granicy dwóch półprzewodników ($z = 0$) funkcja falowa $\psi(0)$ i jej pochodna $\psi'(0)$ spełniają następujące warunki:

$$\begin{aligned} (a) \quad \psi_1(0) &= \psi_2(0) \quad \& \quad \psi'_1(0) = \psi'_2(0) & (b) \quad (1/m_1^*) \psi_1(0) &= (1/m_2^*) \psi_2(0) \quad \& \quad \psi'_1(0) = \psi'_2(0) \\ (c) \quad \psi_1(0) &= \psi_2(0) \quad \& \quad (1/m_1^*) \psi'_1(0) = (1/m_2^*) \psi'_2(0) & (d) \quad \psi_1(0) &= \psi_2(0) \quad \& \quad m_1^* \psi'_1(0) = m_2^* \psi'_2(0) \end{aligned}$$

- 2) Periodyczne struktury półprzewodnikowe, n.p. supersieci, scharakteryzowane są przez periodyczny potencjał $V(z)$, tzn. $V(z+nL) = V(z)$, gdzie L jest okresem supersieci. Funkcja falowa elektronu w supersieci spełnia równanie

$$(a) \quad \psi(z+nL) = \psi(z) \quad (b) \quad \psi(z+nL) = \psi(L) \quad (c) \quad \psi(z+nL) = n\psi(z) \quad (d) \quad \psi(z+nL) = \exp(iknL)\psi(z),$$

gdzie k jest wektorem falowym supersieci.

- 3) Wektor falowy k (wektor quasi-pędu) supersieci o okresie L należący do Strefy Brillouina przyjmuje wartości z przedziału:

$$(a) \quad]-\pi/L, \pi/L] \quad (b) \quad]-\pi L, \pi L] \quad (c) \quad [0, \pi/L] \quad (d) \quad]-\pi/2L, \pi/2L]$$

- 4) A & B są dwoma operatorami w przestrzeni Hilberta. Relacja $\exp(A+B) = \exp(A)\exp(B)$ zachodzi dla

$$(a) \text{ dowolnych operatorów} \quad (b) \text{ operatorów, dla których } [A, B] = 0 \quad (c) \text{ tylko dla } A = B = I \text{ (I – op. jednostkowy).}$$

- 5) Rozwój czasowy układu zadanego hamiltonianem $H = T + V$, gdzie T jest operatorem energii kinetycznej układu a V operatorem energii potencjalnej niezależnym od czasu, zadany jest operatorem $\hat{U}(t, t_0) = \exp[-\frac{i}{\hbar}(\hat{T} + \hat{V})(t - t_0)]$

Dla małych odstępów czasowych $t - t_0 = \delta_t$ stan układu w chwili $t_0 + \delta_t$, $|\psi(t_0 + \delta_t)\rangle$, oraz w chwili t_0 , $|\psi(t_0)\rangle$, można łączyć relacją $|\psi(t_0 + \delta_t)\rangle \approx \exp[-\frac{i}{2\hbar}\delta_t\hat{T}]\exp[-\frac{i}{\hbar}\delta_t\hat{V}]\exp[-\frac{i}{2\hbar}\delta_t\hat{T}]|\psi(t_0)\rangle$

która jest prawdziwa:

$$(a) \text{ z dokładnością do członów } \delta_t, \quad (b) \text{ z dokładnością do członów } \delta_t^2, \quad (c) \text{ z dokładnością do członów } \delta_t^3$$

- 6) Elektron poruszający się w jednym kierunku (x) może być rozpraszany w obszarze $x_L < x < x_R$, a jego funkcja falowa poza obszarem rozpraszania dana jest równaniem

$$\psi^{(+)} = \begin{cases} e^{ik_l x} + r_l e^{-ik_l x} & x \approx x_L \\ t_r e^{ik_r x} & x \approx x_R \end{cases} \quad \text{gdzie } k_l \text{ oraz } k_r \text{ są wektorami falowymi elektronu}$$

odpowiednio w obszarze $x < x_L$ oraz $x > x_R$,

r_l amplitudą fali odbitej, a t_r amplitudą fali

przechodzącej. Współczynnik transmisji $T_{L \rightarrow R}$ dany jest

następującym równaniem:

$$a) \quad T_{L \rightarrow R} = |t_r|^2 \quad b) \quad T_{L \rightarrow R} = \frac{k_r}{k_l} |t_r|^2 \quad c) \quad T_{L \rightarrow R} = \frac{k_l}{k_r} |r_l|^2$$

- 7) Prawdopodobieństwo przejścia układu opisanego zmienną dynamiczną q_i w czasie t_i do zmiennej dynamicznej leżącej w przedziale $[q_j, q_j + \delta q_j]$ w późniejszym czasie t_j zadane jest relacją $\Phi(q_i, t_i | q_j, t_j) \delta q_j$. **Procesy Markowa** to takie, w których prawdopodobieństwo przejścia
- Jest niezależne od jakiejkolwiek informacji o układzie w chwilach wcześniejszych do t_i
 - Zależy od całej historii układu
 - Zależy od wartości zmiennej dynamicznej tylko w pewnych chwilach wcześniejszych niż t_i

8) Model Isinga opisuje oddziaływanie spinów umieszczonych w węzłach sieci $\hat{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j$

gdzie $\langle ij \rangle$ oznacza sumowanie po najbliższych sąsiadach (tylko raz). *Ferromagnetyczne* oddziaływanie spinów opisuje stała J , taka że:

- (a) $J > 0$ (b) $J = 0$ (c) $J < 0$

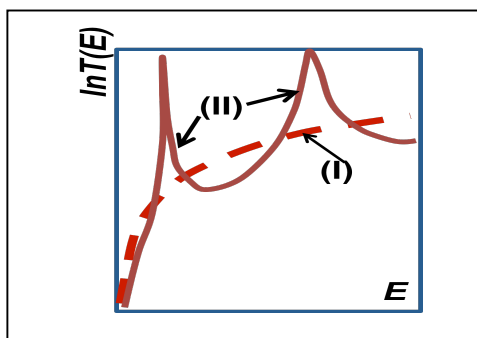
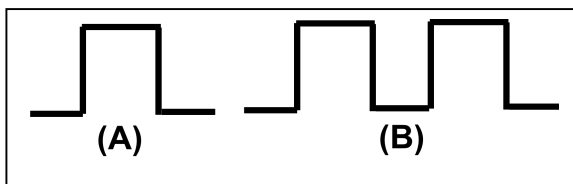
- 9) Rozważmy powyżej opisany Model Isinga. Niech ν, μ oznacza pewne konfiguracje spinowe (czyli pewne rozkłady spinów na węzłach sieci) i niech prawdopodobieństwo wystąpienia tych konfiguracji wynosi odpowiednio $P(\nu)$ oraz $P(\mu)$. Jeżeli prawdopodobieństwo przejścia ze stanu ν do μ wynosi $P(\nu, \mu)$, a ze stanu μ do ν $P(\mu, \nu)$ to zasada równowagi szczegółowej mówi że:

- (a) $P(\nu) P(\nu, \mu) = P(\mu) P(\mu, \nu)$ (b) $P(\nu) P(\mu) = P(\nu, \mu) P(\mu, \nu)$ (c) $P(\nu) P(\mu, \nu) = P(\mu) P(\nu, \mu)$

- 10) Na rysunku przedstawiony jest współczynnik transmisji (tunelowania) $T(E)$ przez pojedynczą barierę prostokątną (A) oraz przez dwie bariery o tej samej szerokości i wysokości co bariera pojedyncza (B).

Przyporządkuj krzywą transmisji barierze :

- (A) $\longleftrightarrow$
(B) $\longleftrightarrow$



- 11) (2 punkty). Rozpatrzmy prosty model ciasnego wiązania dla trójatomowej cząsteczki składającej się z trzech identycznych atomów, każdy z jednym orbitalem na atom. Oznaczmy stany związane z atomami 1,2,3 odpowiednio $|1\rangle$, $|2\rangle$, oraz $|3\rangle$. Oddziaływania w cząsteczce są takie, że $\langle i|H|i\rangle = \epsilon$, dla $i=1,2,3$, oraz $\langle 1|H|2\rangle = \langle 2|H|3\rangle = t$ ($t < 0$), $\langle 1|H|3\rangle = 0$. Stany $|1\rangle$, $|2\rangle$, $|3\rangle$ są orthonormalne, tzn $\langle i|j\rangle = \delta_{ij}$. Energiami stanów własnych cząsteczki są:

- (a) $E_1 = \epsilon - |t|$ $E_2 = \epsilon$ $E_3 = \epsilon + |t|$
(b) $E_1 = \epsilon - \sqrt{2}|t|$ $E_2 = \epsilon$ $E_3 = \epsilon + \sqrt{2}|t|$
(c) $E_1 = \epsilon - 2|t|$ $E_2 = \epsilon + |t|$ $E_3 = \epsilon + |t|$
(d) $E_1 = \epsilon - \sqrt{2}|t|$ $E_2 = \epsilon + |t|$ $E_3 = \epsilon + \sqrt{2}|t|$