

تاریخ انتشار: ۲۳ آذر ۱۳۹۹

تاریخ تحویل: ۷ آذر ۱۳۹۹

تمرین ها و مطالب سر کلاس مکمل کتاب های معرفی شده هستند و از محتوای هر دو برای طرح سوالات امتحانی استفاده میشود. در مواردی که مطالب گفته شده در کتاب های معرفی شده موجود باشد به فصل های کتاب مورد نظر اشاره می شود.

برای درک بهتر تمامی تمرین های زیر میتوانید از اپلت های معرفی شده در پورتال **courses** در قسمت لینک های کمکی استفاده کنید.

(۱) تفسیر دو چاه پتانسیل به شکل تابع دلتا (مثال دو دلتا فانکشن در جلسه ۱۳ و ۱۴ حل شده است به سوالات تفسیری زیر پاسخ دهید)

الف) انرژی مقید ترین حالت سیستم (The most tightly bound state) بر حسب فاصله چگونه تغییر می کند؟ نمودار رسم کنید. (حل آنالیتیک لازم نیست، توسط هر نرم افزاری که راحتید مثل octave یا matlab حل عددی انجام دهید، معادله را بدهید نمودار تحویل بگیرید). محور عمودی انرژی و محور افقی فاصله باشد.

ب) فرض کنید که ذره ای را در کم انرژی ترین حالت مقید سیستم (Lowest energy bound state) قرار میدهیم. رفتار دو تابع دلتا چگونه خواهد بود؟ تمایل به نزدیک شدن خواهند داشت یا دور شدن؟ نیروی به وجود آمده بین دو تابع دلتا را بر اساس فاصله بینشان رسم کنید. (حل عددی مثل گزینه الف)

ج) با توجه به سوالات بالا، اگر دو چاه پتانسیل نماینده ی دو هسته پروتونی باشند که پتانسیل زیادی را در نزدیکی خود به الکترون (ذره) وارد می کنند توضیح دهید که چطور مولکول دو هسته ای H_2^+ مولکول پایدار است.

(۲) چاه پتانسیل به شکل یک تابع دلتا (مثال دو دلتا فانکشن در جلسه ۱۳ و ۱۴ حل شده است، همان مراحل را برای یک تابع دلتا انجام دهید.)

(۳) راه حل های فرد (تابع فرد) چاه پتانسیل متناهی Finite well odd solutions (در جلسه ۱۰ راه حل زوج توضیح داده شد، راه حل های فرد را بر همان اساس به دست آورید).

الف) مسئله را برای توابع موج فرد حل کنید. آیا همیشه یک bound state وجود خواهد داشت؟

ب) تابع موج را نرمالایز کنید و ضرایب را به دست آورید. (ضرایب معادل ضریب A در حل کلاس)

ب) آیا در حد پتانسیل بینهایت همان حل های چاه بینهایت به دست می آیند؟ (نشان دهید)

ج) به راه حل های با انرژی صفر (طبق نامگذاری کلاس $E = 0$ راه حل های مرزی یا Threshold bound states گفته میشود. با ذکر مثال علت را توضیح دهید.

۴) پروسکایت های دو بعدی ماده اصلی در سلول های خورشیدی غیر سیلیکونی (مقاله 2D perovskite را از پورتال درسی (قسمت تمرین ها) دانلود کنید و به سوالات زیر پاسخ دهید):

الف) پروسکایت های دو بعدی از دو قسمت: ماده جامد پروسکایت (PbI_3) و یک قسمت نرم و عایق (مولکول های با شاخه های الکیلی طولانی مثلا AVA) تشکیل شده اند. به نظر شما الکترون از کدام قسمت راحت تر عبور می کند؟

ب) ساختار الکترونی این ماده از ابتدا به ذره در جعبه (particle in the box) یا چاه پتانسیل بینهایت تشبیه شده است، به نظر شما کدام قسمت ماده نقش چاه را بازی می کند؟ (جلوی عبور الکترون را میگیرد؟)

ج) با توجه به حل پتانسیل بینهایت در کلاس توضیح دهید که ضخیم بودن یا نازک بودن لایه های پروسکایت و AVA هر کدام چطور بر ساختار الکترونی (تعداد و فاصله تراز ها یا باند های انرژی) تاثیر می گذارد.

محاسبات خوبی داشته باشید،

نگار اشعری آستانی