

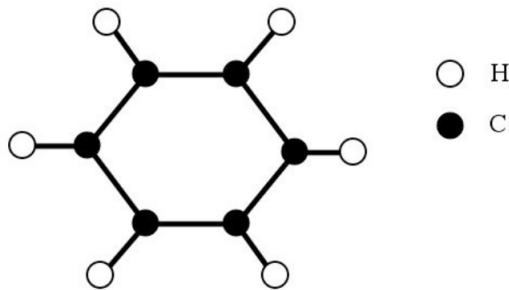
به نام خدا

دانشگاه صنعتی اصفهان - دانش کدهی فیزیک

گوشه دهم

نام و نام خانوادگی: _____ شماره دانشجویی: _____

مولکول زیر را که از اتم‌های کربن و هیدروژن تشکیل شده است، در نظر بگیرید. در این مولکول فاصله $C-H$ برابر a_0 است.



الف) این مولکول را می‌توان با توابع پایه بهنجار متعامد $|j\alpha\rangle$ توصیف کرد. j معرف موقعیت گروه $C-H$ است و α معرف اتم‌های کربن و هیدروژن. با به کار بستن تقریب نزدیکترین همسایه‌ها و با در نظر گرفتن مولفه‌های ماتریسی غیرصفر زیر، ویژه مقادیر انرژی این مولکول را به دست آورید.

$$\langle jC|H|jC\rangle = \epsilon_C$$

$$\langle jH|H|jH\rangle = \epsilon_H$$

$$\langle jC|H|jH\rangle = \gamma_0$$

$$\langle jC|H|j \pm 1 C\rangle = \gamma_C$$

ب) در حد $0 \rightarrow \gamma_0$ ویژه مقادیر انرژی را حساب کنید.

ج) در حد $0 \rightarrow \gamma_C$ ویژه مقادیر انرژی را حساب کنید.

(۴۰ نمره)

فرمول‌ها:

$$|\psi_{\vec{k}}\rangle = \frac{1}{N^{1/2}} \sum_{\vec{R}} \sum_{n=1}^2 e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} A_n^{\vec{k}} |\vec{R} n\rangle$$
$$E(\vec{k}) A_n^{\vec{k}} = \sum_{\vec{R}} \sum_n e^{i\vec{k}\cdot(\vec{R}-\vec{R}')} A_n^{\vec{k}} \langle \vec{R}' n | H | \vec{R} n \rangle$$

«موفق باشید-اسماعیل عبدالحسینی»