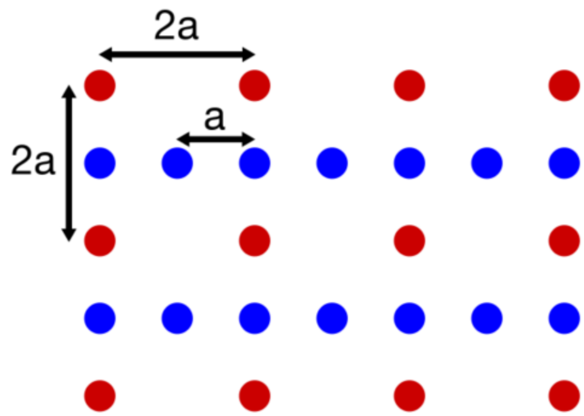
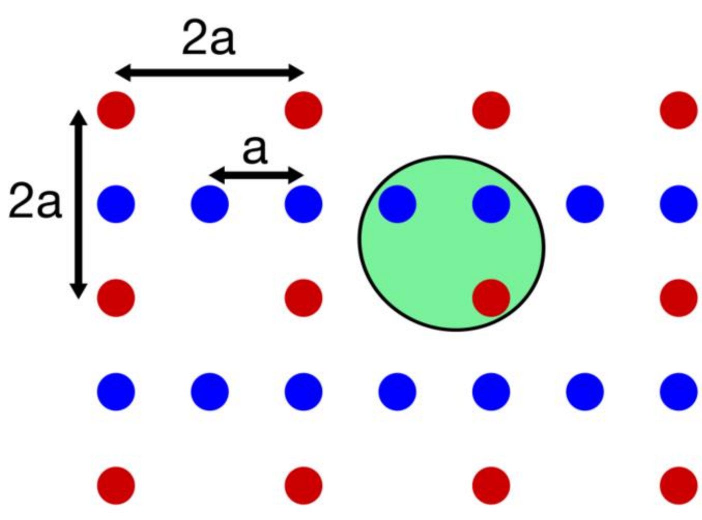
ESS 12/4/24

1. Considerare la struttura in **Fig. 1**. È un reticolo di Bravais? In caso negativo, proporre una possibile combinazione base-reticolo. Noto a = 1.5nm, determinare la densità atomica superficiale.



Soluzione

Non è un reticolo di Bravais. È possibile ricondursi ad un reticolo quadrato scegliendo la base in figura:



Il reticolo quadrato così ottenuto ha passo 2a = 3 nm. La densità atomica superficiale risulta quindi:

$$\rho_{at} = \frac{N_{\frac{at}{cell}}}{A_{cell}} = \frac{3 \cdot 4 \cdot \frac{1}{4}}{9\,(nm)^2} = 0.33 \cdot 10^{14}\ cm^{-2}$$

2. Si consideri un cristallo cubico semplice sottoposto ad esperimento di diffrazione con sorgente a raggi X di energia E = 10 keV. Sapendo che il primo picco di diffrazione associato ai piani {100} si ottiene per θ_1 = 34°, determinare il passo cristallino a e la famiglia di piani avente la minima distanza interplanare risolvibile.

Soluzione

Ricordando la condizione di diffrazione di Bragg:

$$n\lambda = 2d\sin(\theta)$$

Dove la lunghezza d'onda della radiazione entrante si può ricavare a partire dall'energia del fascio come:

$$\lambda = \frac{hc}{E} = 0.124\ nm$$

Per i piani della famiglia {100} la distanza interplanare è pari a:

$$d = \frac{a}{\sqrt{1^2 + 0^2 + 0^2}} = a$$

Il passo cristallino è quindi dato da:

$$a = \frac{\lambda}{2\sin(\theta_1)} = 0.11\ nm$$

La minima distanza interplanare risolvibile è data da:

$$d_{min} = \frac{\lambda}{2} = 0.062\ nm$$

Ovvero:

$$\sqrt{h^2 + l^2 + k^2} = \frac{a}{d_{min}} = 1.77 = \sqrt{3.13}$$

La famiglia di piani avente la minima distanza interplanare risolvibile deve quindi rispettare:

$$d > d_{min} = \frac{a}{\sqrt{3.13}}$$

Ne consegue che tale famiglia di piani è la {111}, per la quale si ha:

$$d_{111} = \frac{a}{\sqrt{3}} = 0.0635\ nm > d_{min}$$

Si può verificare che la famiglia subito successiva, ovvero la {210}, ha una distanza interplanare troppo piccola per dare origine a diffrazione:

$$d_{210} = \frac{a}{\sqrt{5}} = 0.049\ nm < d_{min}$$

3. Una cavità di raggio r = 1 cm all'equilibrio termodinamico emette una potenza P_1 = 16 kW da un orifizio. Determinare l'energia media del modo associato al picco dello spettro di emissione parametrizzato in lunghezza d'onda.

Soluzione

Ricordando che la potenza emessa da un corpo nero è descritta dalla legge di Stefan-Boltzmann:

$$P = \sigma A T^4$$

È possibile ricavare la temperatura del corpo nero come:

$$T = \left(\frac{P}{\sigma A}\right)^{\frac{1}{4}} = \left(\frac{P}{\sigma \cdot 4\pi r^2}\right)^{\frac{1}{4}} = 3871\ K$$

A tale temperatura, il picco dello spettro di emissione parametrizzato in lunghezza d'onda è localizzato a:

$$\lambda = \frac{c_w}{T} = 0.723\ \mu m$$

La frequenza di tale modo è pari a:

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = 415\ THz$$

L'energia media associata al modo in cavità è quindi pari a:

$$E = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} = 10.2\ meV$$

4. Una particella è descritta da una combinazione lineare $\Psi = a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2$ di autofunzioni Ψ_1, Ψ_2 con autovalori λ_1, λ_2. Sapendo che su 1000 misure si riscontra il valore λ_1 in 700 casi, stimare il modulo del coefficiente a_2.

Soluzione

Ricordando che il modulo quadro dei coefficienti della combinazione lineare corrisponde alla probabilità di misurare il corrispondente autovalore, allora:

$$|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$$

$$|a_1|^2 = \frac{700}{1000} = 0.7$$

Conseguentemente:

$$|a_2| = \sqrt{1 - |a_1|^2} = \sqrt{0.3} = 0.5477$$

5. Si consideri un setup di esperimento fotoelettrico in cui un fascio luminoso ($\lambda = 230\ nm$) viene fatto incidere su un target in titanio (W = 4.3 eV). Calcolare la tensione di stopping V_{stop}, e la velocità degli elettroni all'anodo in presenza di una tensione applicata $V_A = 1\ V$.

<u>Soluzione</u>

Il fascio luminoso ha energia:

$$E_{ph} = \frac{hc}{\lambda} = 5.4\ eV$$

Nel punto di emissione al catodo, l'elettrone avrà quindi un'energia cinetica pari a:

$$E_{k,c} = E_{ph} - W = 5.4\ eV - 4.3\ eV = 1.1\ eV$$

Per azzerare tale energia cinetica all'anodo, è necessaria una tensione di stopping:

$$V_{stop} = -\frac{E_{k,c}}{q} = -1.1\ V$$

Applicando invece una tensione $V_A = 1V$, l'elettrone viene accelerato fino ad avere, all'anodo, un'energia cinetica pari a:

$$E_{k,a} = E_{k,c} + qV_A = 2.1\ eV$$

La velocità all'anodo sarà quindi pari a:

$$v_a = \sqrt{\frac{2E_{k,a}}{m}} = 8.59 \cdot 10^5\ m/s$$

6. Si consideri la barriera di potenziale in **Fig. 2** di altezza V_0 = 1 eV. Determinare la larghezza a della barriera affinché, applicando un campo F = 5 V/nm, la probabilità di tunneling per un elettrone di energia E = 0.25 eV aumenti di un fattore 10^{10} rispetto al caso in assenza di campo applicato.

Soluzione

Ipotizziamo che, a seguito dell'applicazione del campo, la barriera risulti essere in condizione di tunneling Fowler-Nordheim. Allora la probabilità di tunneling è pari a:

$$P_{T,FN} = e^{-\frac{4\sqrt{2m}}{3\,q\hbar F}(V_0-E)^{\frac{3}{2}}} = 0.4122$$

La corrispondente probabilità di tunneling in assenza di campo applicato deve quindi essere pari a:

$$P_{T,F=0} = \frac{P_{T,FN}}{10^{10}} = 0.4122 \cdot 10^{-10}$$

Ricordando che per una barriera rettangolare in approssimazione WKB vale:

$$P_T = e^{-2\alpha a}$$

Dove:

$$\alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} = 4.43 \cdot 10^9\ m^{-1}$$

Allora la larghezza della barriera necessaria è pari a:

$$a = -\frac{\ln\left(P_{T,F=0}\right)}{2\alpha} = 2.7\ nm$$

Si può verificare che, con una barriera di tale larghezza, l'applicazione di un campo F = 5 V/nm risulta in una condizione di tunneling Fowler-Nordheim:

$$V(x = a) = V_0 - qFa = 1\ eV - 13.5\ eV = -12.5\ eV < E = 0.25\ eV$$

Confermando così l'ipotesi iniziale.

7. Si consideri una buca a pareti infinite di larghezza a = 5 nm. Determinare la lunghezza d'onda λ del fotone associato al rilassamento dal quarto autostato al secondo autostato. Se si considerasse una buca a pareti finite, la lunghezza d'onda associata al medesimo rilassamento sarebbe maggiore o minore?

Soluzione

Gli autostati della buca a pareti infinite sono facilmente calcolabili come:

$$E_n = n^2 \frac{h^2}{8ma^2} = n^2 \cdot 15.1\ meV$$

Il secondo e il quarto autostato hanno quindi energie:

$$E_2 = 4 \cdot 15.1\ meV = 60.4\ meV$$

$$E_4 = 16 \cdot 15.1\ meV = 241.6\ meV$$

Il fotone associato al rilassamento avrà quindi energia:

$$\Delta E_{42} = 241.6\ meV - 60.4\ meV = 181.2\ meV$$

Corrispondente ad una lunghezza d'onda:

$$\lambda_{ph} = \frac{hc}{\Delta E_{42}} = 6.85\ \mu m$$

Se la buca fosse a pareti finite, ogni autostato mostrerebbe una penetrazione nello strato di barriera laterale e una conseguente diminuzione dell'energia in ragione del minor confinamento. L'effetto sarebbe più pronunciato sui livelli ad energia maggiore, così che:

$$E_4' = E_4 - \Delta E_4$$

$$E_2' = E_2 - \Delta E_2$$

Con $\Delta E_4 > \Delta E_2 > 0$. Conseguentemente:

$$\Delta E_{42}' = E_4' - E_2' = E_4 - E_2 - (\Delta E_4 - \Delta E_2) = \Delta E_{42} - (\Delta E_4 - \Delta E_2) < \Delta E_{42}$$

L'energia del fotone sarebbe dunque minore, poiché il livello E_4 scenderebbe di più rispetto al livello E_2. Conseguentemente, la lunghezza d'onda sarebbe maggiore:

$$\lambda' = \frac{hc}{\Delta E_{42}'} > \frac{hc}{\Delta E_{42}} = \lambda$$

8. Si consideri un profilo di potenziale del tipo $V(x) = \alpha x^{\beta}$. Sapendo che i livelli energetici sono descritti dalla relazione $E_n = E_0 + E_1 n^{4/3}$, con E_0 = 13.9 meV, E_1 = 36 meV ed $n \geq 0$, determinare il parametro β. Si costruisca quindi uno stato non stazionario come combinazione lineare delle autofunzioni dei primi due livelli energetici. Rappresentare graficamente in modo qualitativo il modulo quadro dell'autofunzione dello stato non stazionario al tempo t = 28.76 fs.

Soluzione

Noto il profilo di potenziale, è possibile stimare la spaziatura degli autovalori imponendo:

$$\Delta p \Delta x \simeq n\hbar$$

$$\Delta p = 2\sqrt{2mE_n}$$

$$\Delta x = 2\left(\frac{E_n}{\alpha}\right)^{\frac{1}{\beta}}$$

$$\Delta p \Delta x = \frac{4\sqrt{2m}}{\alpha^{\frac{1}{\beta}}} \cdot E^{\frac{\beta+2}{2\beta}} = n\hbar$$

Da cui si ricava che la serie degli autovalori è proporzionale a:

$$E_n \propto n^{\frac{2\beta}{\beta+2}}$$

Nota dal testo tale spaziatura, è possibile calcolare il parametro β come:

$$\frac{2\beta}{\beta+2} = \frac{4}{3}$$

$$6\beta - 4\beta = 8$$

$$\beta = 4$$

Quindi il profilo di potenziale è di tipo quartico: $V(x) = \alpha x^4$.

Lo stato non stazionario associato ai primi due livelli è dato da:

$$\Psi(x,t) = e^{-i\omega_1 t}\left(\psi_1(x) + \psi_2(x)e^{-i\frac{\Delta E}{\hbar}t}\right)$$

Il modulo quadro è quindi funzione del tempo come:

$$|\Psi(x,t)|^2 = \left|\psi_1(x) + \psi_2(x)e^{-i\Delta\omega t}\right|^2$$

Dove:

$$\Delta\omega = \frac{E(n=1) - E(n=0)}{\hbar} = \frac{E_1}{\hbar} = 2\pi \cdot 8.69\, THz \qquad \leftrightarrow \qquad T = \frac{2\pi}{\Delta\omega} = 115\, fs$$

Al tempo richiesto, il termine di fase sarà quindi pari a:

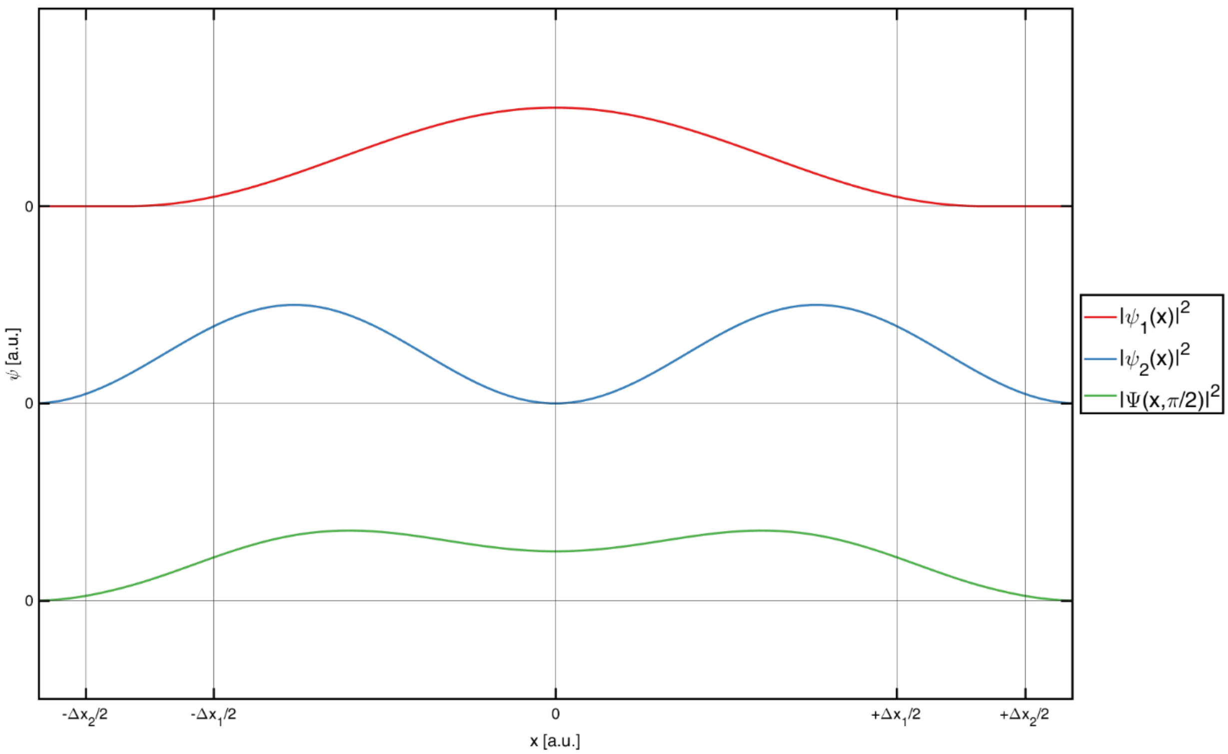
$$e^{-i\Delta\omega t} = e^{-i\frac{\pi}{2}} = -i$$

$$|\Psi(x,t_1)|^2 = \left|\psi_1(x) + \psi_2(x)e^{-i\frac{\pi}{2}}\right|^2 = |\psi_1(x) - i\psi_2(x)|^2 = |\psi_1(x)|^2 + |\psi_2(x)|^2$$

Nel determinare la forma delle autofunzioni $\psi_1(x)$, $\psi_2(x)$ occorre tenere conto della diversa larghezza effettiva di buca sperimentata dai due livelli. L'autofunzione $\psi_1(x)$ mostrerà un singolo lobo ad una larghezza di buca Δx_1. L'autofunzione $\psi_2(x)$ mostrerà due lobi ad una larghezza di buca $\Delta x_2 > \Delta x_1$. È possibile stimare il rapporto $\Delta x_2/\Delta x_1$ come:

$$\frac{\Delta x_2}{\Delta x_1} = \frac{2\left(\frac{E(n=1)}{\alpha}\right)^{\frac{1}{\beta}}}{2\left(\frac{E(n=0)}{\alpha}\right)^{\frac{1}{\beta}}} = \left(\frac{E(n=1)}{E(n=0)}\right)^{\frac{1}{\beta}} = 1.38$$

Il modulo quadro può quindi essere rappresentato graficamente come:



9. Si consideri un pacchetto d'onda gaussiano centrato in $k_0 = 10^{10}\, m^{-1}$ con $\sigma_k = k_0/10$, propagantesi in un materiale con relazione di dispersione del tipo $E(k) = E_0(1 + \cos(2ka))$ con a = 0.5 nm ed E_0 = 1eV. Calcolare la dispersione spaziale del pacchetto $\sigma_x(t)$ ai tempi $t_1 = 0$, $t_2 = 1$ fs, $t_3 = 1$ ps.

<u>Soluzione</u>

La velocità di gruppo è data dalla derivata prima della relazione di dispersione valutata nel centro del pacchetto:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}\Big|_{k=k_0} = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}\Big|_{k=k_0} = \frac{1}{\hbar}(-E_0 \cdot 2a\sin(2k_0 a)) = 8.254 \cdot 10^5\, m/s$$

La dispersione spaziale è data da:

$$\sigma_x(t) = \sqrt{\alpha + \frac{\beta^2}{\alpha}t^2}$$

Dove:

$$\alpha = \frac{1}{2}\frac{1}{\sigma_k^2} = (0.7071\, nm)^2$$

$$\beta = \frac{1}{2}\frac{d^2\omega}{dk^2}\Big|_{k=k_0} = \frac{1}{2\hbar}\frac{d^2E}{dk^2}\Big|_{k=k_0} = \frac{1}{2\hbar}(-E_0 \cdot 4a^2 \cdot \cos(2k_0 a)) = 6.365 \cdot 10^{-4}\frac{m^2}{s}$$

Pertanto:

$$\sigma_x(0) = \sqrt{\alpha} = 0.7071\, nm$$

$$\sigma_x(1\, fs) = 1.14\, nm$$

$$\sigma_x(1\, ps) = 900\, nm$$

10. Un elettrone in un cristallo di passo a = 0.3nm è descritto da un'autofunzione $\psi_k(x) = u_k(x)e^{ikx}$. Sapendo che l'autofunzione torna in fase dopo N = 6 passi reticolari, determinare il valore del parametro k dell'autofunzione. Si tracci quindi il profilo della parte reale della funzione inviluppo e della parte reale dell'autofunzione su 9 passi reticolari, sapendo che la funzione di Bloch è di tipo pari con un solo massimo in corrispondenza dell'atomo, e si annulla nella regione di barriera.

Soluzione

La condizione di ritorno in fase per l'autofunzione è esprimibile come:

$$k \cdot (6a) = 2\pi$$

Da cui:

$$k = \frac{2\pi}{6a} = 3.49 \cdot 10^9 \, m^{-1}$$