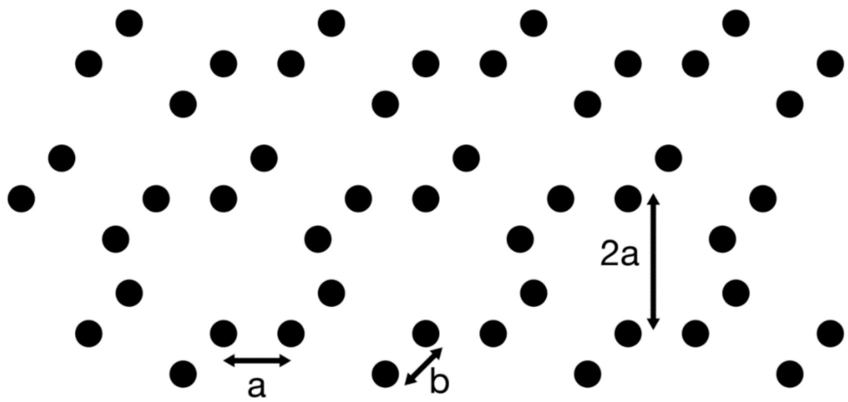
ESS 21/04/2023

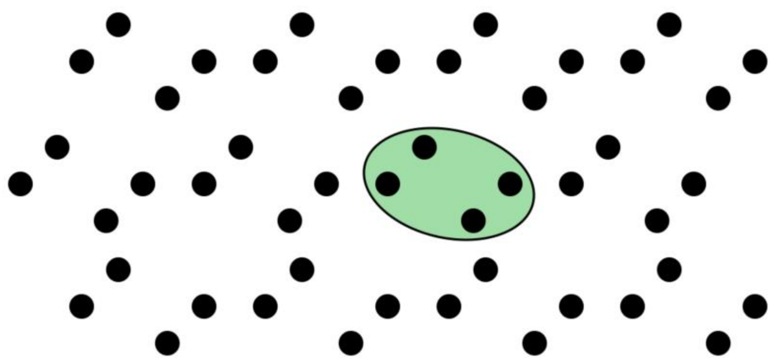
Esercizio 1

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

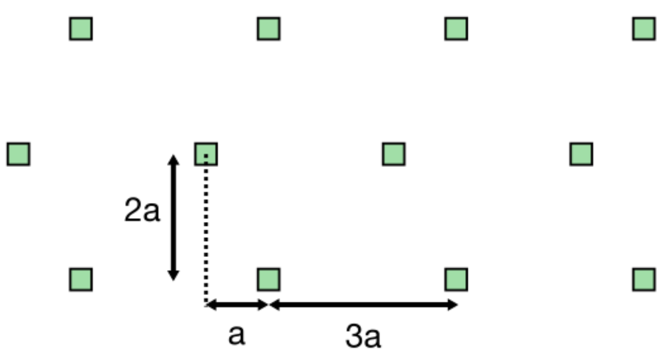


Soluzione 1

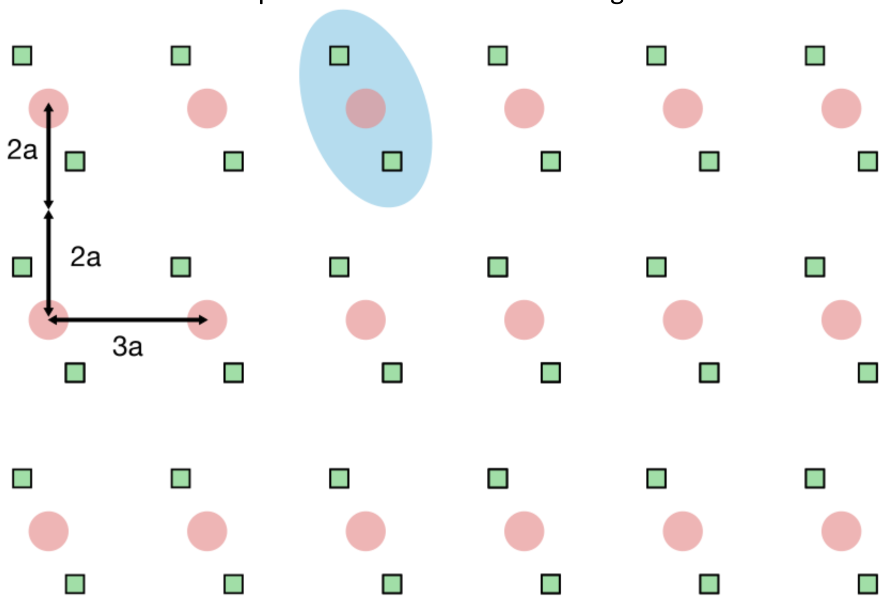
Non è un reticolo di Bravais. Una possibile base è data dal quartetto in figura:

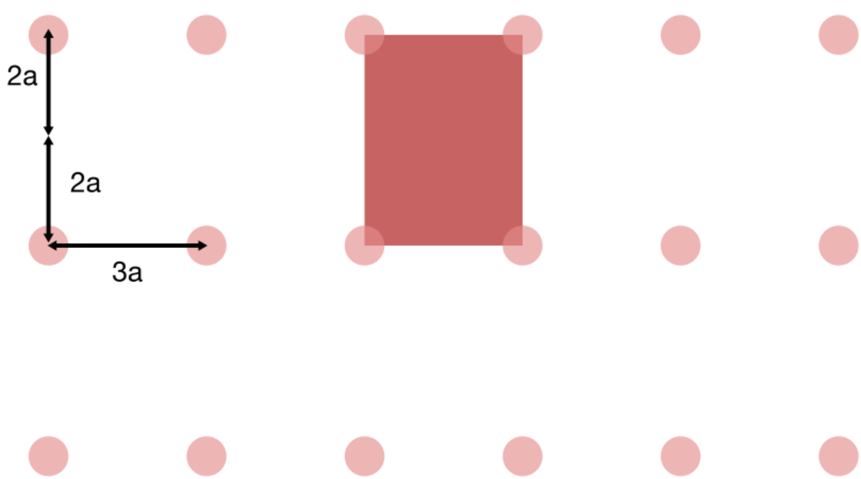


Da cui ci si riconduce a un reticolo intermedio:



Una seconda riduzione evidenzia la presenza di un reticolo rettangolare:





La cella unitaria ha area $A_{cell} = 12a^2 = 12\ (nm)^2$. Ogni cella presenta 4 basi, ciascuna condivisa fra 4 celle adiacenti. Ogni base del secondo reticolo contiene due basi del primo, ciascuna con quattro atomi. Pertanto:

$$N_{at/cell} = N_{\frac{at}{base_1}} \cdot N_{\frac{base_1}{base_2}} \cdot N_{\frac{base_2}{cell}} = \ 4 \cdot 2 \cdot 4 \cdot \frac{1}{4} = 8$$

La densità atomica superficiale risulta quindi:

$$\rho_{at} = \frac{N_{\frac{at}{cell}}}{A_{cell}} = \frac{8}{12(nm)^2} = 0.67 \cdot 10^{14}\ cm^{-2}$$

Esercizio 2

Si consideri un cristallo cubico semplice con passo reticolare a = 0.5 nm sottoposto ad esperimento di diffrazione con sorgente a raggi X. Determinare la minima energia E_{min} del fascio per osservare interferenza dai piani {100}. Supponendo di usare una sorgente avente energia $5E_{min}$, determinare tutti gli angoli di diffrazione per i piani {110}.

Soluzione 2

I piani {100} sono caratterizzati da una distanza interplanare:

$$d_{100} = \frac{a}{\sqrt{h^2 + l^2 + k^2}} = a = 0.5\, nm$$

Ricordando la condizione di Bragg:

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

La massima lunghezza d'onda (e quindi la minima energia) per rivelare i piani {100} è quindi:

$$\lambda = 2d = 1\, nm$$

Corrispondenti ad un'energia:

$$E = \frac{hc}{\lambda} = 1.24\, keV$$

La sorgente usata ha quindi energia e lunghezza d'onda:

$$E = 6.22\, keV$$
$$\lambda = 0.2\, nm$$

Considerando i piani {110}, la distanza interplanare sarà pari a $d_{110} = \frac{a}{\sqrt{2}}$. Pertanto deve valere:

$$\theta = \arcsin\left(\frac{n\lambda}{2a}\sqrt{2}\right)$$

Per trovare il numero di angoli di diffrazione attesi, si impone che l'argomento della funzione arcoseno sia minore di 1:

$$\frac{n\lambda}{2a}\sqrt{2} \le 1$$
$$n \le \frac{2a}{\lambda\sqrt{2}} = 3.53$$

Quindi sono validi n = 1, 2, 3, per i quali si trovano gli angoli di diffrazione:

$$\theta_1 = 16.43\,°$$
$$\theta_2 = 34.45\,°$$
$$\theta_3 = 58.05\,°$$

Esercizio 3

Un corpo nero emette una potenza P_1 = 16 kW e ha una temperatura pari al doppio di quella di un secondo corpo nero di pari area. Sapendo che per il secondo corpo nero il picco dello spettro di emissione (parametrizzato in lunghezza d'onda) si trova a $\lambda = 2\ \mu m$, determinare la temperatura del primo corpo nero e la potenza emessa dal secondo corpo nero.

Soluzione 3

La temperatura di emissione del secondo corpo nero si ricava a partire dalla legge di Wien:

$$T_2 = \frac{c_w}{\lambda} = 1400\ K$$

La temperatura del primo corpo è quindi:

$$T_1 = 2T_2 = 2800\ K$$

Ricordando che la potenza di emissione è descritta dalla legge di Stefan-Boltzmann:

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

E sapendo che i due corpi hanno pari area, allora:

$$\frac{P_2}{P_1} = \left(\frac{T_2}{T_1}\right)^4$$

$$P_2 = \frac{1}{2^4} \cdot P_1 = 1\ kW$$

Esercizio 4

Si consideri un setup di esperimento fotoelettrico in cui un fascio luminoso ($\lambda = 230\ nm$) viene fatto incidere su un target in metallo ignoto. Nota la tensione di stopping $V_{stop} = -1\ V$, determinare la velocità v_e degli elettroni all'elettrodo di emissione e la funzione lavoro W del metallo.

Soluzione 4

Il fascio luminoso ha energia:

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

In condizioni di stopping, l'energia cinetica dell'elettrone all'elettrodo di raccolta è nulla:

$$E_k(x = L) = E_{ph} - W - q|V_{stop}| = 0 \rightarrow E_{ph} - W = q|V_{stop}|$$

Viceversa, l'energia cinetica dell'elettrone all'elettrodo di emissione è sempre dettata dalla differenza fra la radiazione entrante e la funzione lavoro:

$$E_k(x = 0) = E_{ph} - W$$

L'energia cinetica iniziale è funzione della velocità degli elettroni all'elettrodo di emissione come:

$$E_k(x = 0) = \frac{1}{2} m_e v_e^2$$

La velocità iniziale si può quindi ricavare come:

$$v_e = \sqrt{\frac{2E_k(x = 0)}{m}} = \sqrt{\frac{2(E_{ph} - W)}{m}} = \sqrt{\frac{2q|V_{stop}|}{m}} = 5.93 \cdot 10^5\ m/s$$

La funzione lavoro del metallo si ricava invece, noti V_{stop} ed E_{ph}:

$$W = E_{ph} - q|V_{stop}| = 5.4\ eV - 1\ eV = 4.4\ eV$$

Esercizio 5

Si consideri il profilo di potenziale riportato in **Fig. 2**, dove un elettrone viaggia da sinistra verso destra con E = 5 eV. Sapendo che il flusso riflesso è pari a 1/3 del flusso trasmesso, determinare il valore del potenziale V_1 nella prima regione.

Soluzione 5

Ricordando l'espressione per flusso incidente, trasmesso e riflesso:

$$J_r = |R|^2 J_i$$
$$J_t = |T|^2 J_i$$

Dove, detti k e k' i vettori d'onda nella prima e nella seconda regione:

$$|R|^2 = \left(\frac{k' - k}{k + k'}\right)^2$$
$$|R|^2 + |T|^2 = 1$$

Dal testo si ha $J_r = \frac{J_t}{3}$, pertanto:

$$|T|^2 = 3|R|^2$$
$$|R|^2 + |T|^2 = 4|R|^2 = 1 \rightarrow |R|^2 = \frac{1}{4}$$

Dalla definizione di $|R|^2$:

$$k' - k = \frac{1}{2}(k + k')$$
$$k\left(-1 - \frac{1}{2}\right) = k'\left(\frac{1}{2} - 1\right)$$
$$k = k'\frac{2-1}{2+1} = \frac{k'}{3}$$

Sapendo che il potenziale nella seconda regione è pari a 0 eV, si può ricavare k' come:

$$k' = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = 1.144 \cdot 10^{10}\ m^{-1}$$

Da cui il vettore d'onda nella prima regione:

$$k = \frac{k'}{3} = 3.8 \cdot 10^{9}\ m^{-1} = \frac{\sqrt{2m(E - V_1)}}{\hbar}$$

Quindi:

$$V_1 = E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = 4.44\ eV$$

Esercizio 6

Si consideri la barriera di potenziale in **Fig. 3**, dove a = 1 nm e V_0 = 10 eV. Determinare la lunghezza b della regione intermedia affinché la probabilità di trasmissione totale per un elettrone ad energia E_1 = 5eV sia pari a $P_t = 3 \cdot 10^{-8}$.

Soluzione 6

L'elettrone vede una sequenza di tunneling Fowler-Nordheim – rettangolare – FN. Pertanto:

$$P_t = P_{tFN,1} \cdot P_{tR} \cdot P_{tFN,2}$$

Ricordando che per il tunneling Fowler-Nordheim vale:

$$P_t = e^{-\frac{4}{3} \cdot \frac{\sqrt{2m}}{q\hbar F} \phi^{\frac{3}{2}}}$$

$$F = \frac{V_0}{qa} = 10 \frac{V}{nm}$$

$$\phi_1 = V_0 - E_1 = 5\ eV$$

Essendo le barriere triangolari identiche (stessa larghezza e stesso campo), le probabilità di tunneling saranno identiche nella prima e nell'ultima regione:

$$P_{tFN,1} = P_{tFN,3} = P_{tFN} = \exp\left(-\frac{4}{3}\frac{\sqrt{2m}}{q\hbar F}\phi_1^{\frac{3}{2}}\right) = 4.86 \cdot 10^{-4}$$

Nota la probabilità di tunneling totale, si può ricavare quella attraverso la barriera rettangolare:

$$P_{tR} = \frac{P_t}{P_{tFN^2}} = 0.127$$

Ricordando che per una barriera rettangolare vale:

$$P_t = e^{-2\frac{\sqrt{2m\phi}}{\hbar}b}$$

Allora:

$$-2\frac{\sqrt{2m\phi_1}}{\hbar}b = \ln(P_{tR})$$

$$b = -\ln(0.127) \cdot \frac{\hbar}{2\sqrt{2m\phi_1}} \simeq 0.09\ nm$$

(Si osserva che $\alpha b = 1.03 \simeq 1$: siamo cioè al limite di validità dell'approssimazione WKB).

Esercizio 7

Stimare mediante principio di indeterminazione la posizione dei primi 3 autostati del profilo di potenziale in **Fig. 4**, dove $\alpha_1 = 3$ eV/(nm)^2 e $\alpha_2 = 1$ eV/(nm)^2. Commentare qualitativamente come cambierebbero i valori e la dipendenza dal numero quantico se si considerasse un profilo (a) $V_1(x) = \frac{1}{2}\alpha_1 x^2$ e (b) $V_2(x) = \frac{1}{2}\alpha_2 x^2$.

Soluzione 7

Si procede con stima mediante principio di indeterminazione. Per il momento, assumiamo incertezza:

$$\Delta p = p_{max} - p_{min} = 2\sqrt{2mE}$$

Per la posizione, procediamo calcolando:

$$x_{max} := E = \frac{1}{2}\alpha_1 x_{max}^2 \rightarrow x_{max} = \sqrt{\frac{2E}{\alpha_1}}$$

$$x_{min} := E = \frac{1}{2}\alpha_2 x_{min}^2 \rightarrow x_{min} = -\sqrt{\frac{2E}{\alpha_2}} = -\sqrt{3} \cdot \sqrt{\frac{2E}{\alpha_1}}$$

$$\Delta x = x_{max} - x_{min} = \sqrt{\frac{2E}{\alpha_1}} \cdot \left(1 + \sqrt{3}\right)$$

Gli autovalori stimati si troveranno quindi alle energie:

$$\Delta x \Delta p = n\hbar$$

$$2\sqrt{2mE} \cdot \sqrt{\frac{2E}{\alpha_1}} \cdot \left(1 + \sqrt{3}\right) = n\hbar \quad \rightarrow \quad 4\sqrt{\frac{m}{\alpha_1}} \cdot E \cdot \left(1 + \sqrt{3}\right) = n\hbar \quad \rightarrow \quad E = n \cdot \frac{\hbar\sqrt{\frac{\alpha_1}{m}}}{4\left(1 + \sqrt{3}\right)}$$

Dove gli n validi sono n = 1,2,.. poiché la soluzione E = 0 non è ammissibile in presenza di confinamento. Pertanto i primi tre autostati si trovano a:

$$E_1 = \frac{\hbar\sqrt{\frac{\alpha_1}{m}}}{4\left(1 + \sqrt{3}\right)} = 43.8\, meV$$

$$E_2 = 2E_1 = 87.6\, meV$$

$$E_3 = 3E_1 = 131.4\, meV$$

Consideriamo adesso le due buche V_1 e V_2 e le loro differenze rispetto alla buca V della Fig. 4 nel testo, notando che $\alpha_1 > \alpha_2$.

La buca descritta dal potenziale $V_1 = \alpha_1 x^2/2$ impone un maggior confinamento della particella nella regione $x < 0$ rispetto al potenziale V, ovvero $\Delta x' < \Delta x$. Ne consegue che deve essere $\Delta p' > \Delta p$, e quindi $E' > E$: gli autovalori della buca V_1 si troveranno quindi ad energie maggiori dei corrispondenti nella buca V.

Viceversa, la buca descritta dal potenziale $V_2 = \alpha_2 x^2/2$ impone un minor confinamento della particella nella regione $x > 0$, ovvero $\Delta x'' > \Delta x$. Conseguentemente, dovrà essere $\Delta p'' < \Delta p$, da cui $E'' < E$: gli autovalori della buca V_2 si troveranno quindi ad energie minori dei corrispondenti della buca V.

Riassumendo, dovrà quindi valere $E_n'' < E_n < E_n'$. Tuttavia, poiché in tutte e tre le buche il potenziale ha forma parabolica, la dipendenza degli autostati dal numero quantico sarà sempre la medesima (lineare).

Esercizio 8

Si considerino due buche rettangolari di pari larghezza a accoppiate a mezzo di una barriera deltiforme di modulo u_0. Sapendo che lo stato non stazionario associato al primo doppietto oscilla a una frequenza $\Delta\nu = 10\ THz$ e che l'energia dell'autostato dispari è $E_d = 100\ meV$, stimare la larghezza a delle due buche e l'ampiezza u_0 della barriera.

Soluzione 8

La relazione di dispersione per gli autostati dispari nel caso di due buche accoppiate è data da:

$$\tan(k_d a) = 0$$

Nota l'energia dell'autostato dispari, si ricava:

$$k_d = \frac{\sqrt{2mE_d}}{\hbar} = 1.618 \cdot 10^9\ m^{-1}$$

$$\tan(k_d a) = 0 \to \sin(k_d a) = 0 \to k_d a = m\pi \quad m = 1,2, \ldots$$

Dove è stata scartata la soluzione m = 0, che corrisponderebbe ad E = 0 (non fisica). L'autostato fa parte del primo doppietto, pertanto $m = 1$ da cui:

$$a = \frac{\pi}{k_d} = 1.94\ nm$$

Per ricavare il modulo, ricordiamo invece la relazione di dispersione per gli autostati pari:

$$\tan(k_p a) = -\frac{\hbar^2 k_p}{m u_0}$$

Nota la frequenza di oscillazione dello stato non stazionario, l'energia dell'autostato pari è data da:

$$E_p = E_d - h\Delta\nu = 100\ meV - 41.4\ meV = 58.6\ meV$$

Da cui il vettore d'onda:

$$k_p = \frac{\sqrt{2mE_p}}{\hbar} = 1.24 \cdot 10^9\ m^{-1}$$

Il modulo della barriera deltiforme risulta pertanto:

$$u_0 = -\frac{\hbar^2 k_p}{m \tan(k_p a)} = 0.1\ eV \cdot nm$$

Esercizio 9

Si consideri un pacchetto d'onda gaussiano centrato in $k_0 = 10^9\ m^{-1}$ con $\sigma_k = k_0/5$, propagantesi in un materiale caratterizzato da una relazione di dispersione del tipo $E(k) = E_0 + \frac{E_0}{2}\cos(ka)$ con a = 0.1 nm. Sapendo che al tempo t = 10 ps la dispersione spaziale del pacchetto è il doppio di quella iniziale (t = 0), determinare il valore (in modulo) del parametro E_0.

Soluzione 9

La dispersione spaziale del pacchetto nel tempo è descritta da:

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

Dove:

$$\alpha = \frac{1}{2\sigma_k^2} = (3.53\ nm)^2$$

Sapendo che a $\bar{t} = 10\ ps$ la dispersione è il doppio di quella iniziale, possiamo ricavare β:

$$\sigma_x(0) = \sqrt{\alpha}$$

$$\frac{\sigma_x(\bar{t})}{\sigma_x(0)} = 2 = \sqrt{\alpha + \frac{\beta^2 t^2}{\alpha}} \cdot \frac{1}{\sqrt{\alpha}} = \sqrt{1 + \frac{\beta^2}{\alpha^2}\bar{t}^2}$$

$$|\beta| = \sqrt{3} \cdot \frac{\alpha}{\bar{t}} = 2.165 \cdot 10^{-6}\ \frac{m^2}{s}$$

Sapendo che:

$$\beta = \frac{1}{2} \cdot \frac{d^2\omega}{dk^2}|_{k=k_0} = \frac{1}{2\hbar} \cdot \frac{d^2 E}{dk^2}|_{k=k_0} = \frac{1}{2\hbar}\left(-\frac{E_0}{2} a^2 \cos(k_0 a)\right)$$

Si può quindi ricavare il valore di E_0:

$$E_0 = -\frac{4\beta\hbar}{a^2\cos(k_0 a)} = \pm 574\ meV$$

Esercizio 10

Un elettrone in un cristallo di passo a = 1 nm è descritto da un'autofunzione $\psi_k(x)$ con $k = 1.571 \cdot 10^9\ m^{-1}$. Dopo aver stimato il numero N di passi reticolari affinché l'autofunzione $\psi_k(x)$ torni in fase, tracciare il profilo della parte reale della funzione inviluppo e il profilo della parte reale dell'autofunzione su 2N passi reticolari, sapendo che la funzione di Bloch è di tipo pari con un solo massimo in corrispondenza dell'atomo.

Soluzione 10

La differenza di fase dell'autofunzione fra due punti dello spazio è data da:

$$\Delta\phi = k\Delta x$$

Imponendo il ritorno in fase si ottiene:

$$\Delta\phi = 2\pi = k\Delta x \rightarrow \Delta x = 3.9995\ nm$$

$$N = \frac{\Delta x}{a} \simeq 4$$