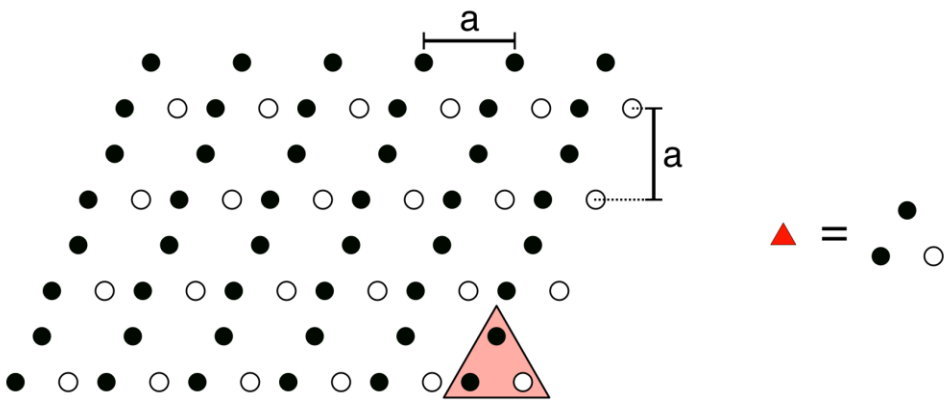
ESS 07/04/2025

Esercizio 1

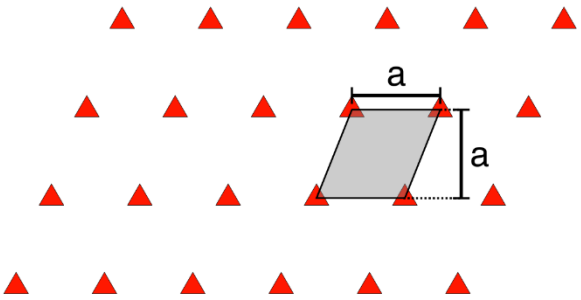
Considerare la struttura bidimensionale in **Fig. 1**. È un reticolo di Bravais? In caso negativo, proporre una possibile combinazione base-reticolo. Nota la densità atomica superficiale $\rho = 1.5 \cdot 10^{14}$ cm^{-2}, determinare il valore del parametro a.

Soluzione 1

Non è un reticolo di Bravais. Una possibile base è la terna triatomica in figura:



Sostituendo ogni terna con la corrispondente base, si ottiene un reticolo obliquo:



Il passo reticolare si può pertanto ricavare a partire dalla densità atomica superficiale, imponendo:

$$\rho_{at} = \frac{N_{\frac{at}{cell}}}{A_{cell}} = \frac{N_{\frac{basi}{cella}} \cdot N_{\frac{at}{base}}}{A_{cell}} = \frac{4 \cdot \frac{1}{4} \cdot 3}{a^2} = \frac{3}{a^2} \quad \rightarrow \quad a = \sqrt{\frac{3}{\rho_{at}}} = 1.41\ nm$$

Esercizio 2

Un cristallo cubico semplice con passo reticolare a = 1.25 nm è sottoposto ad esperimento di diffrazione con sorgente di elettroni a velocità v_e = 10^6 m/s. Determinare la minima distanza interplanare risolvibile e calcolare gli angoli di diffrazione per i piani della famiglia {110}.

Soluzione 2

Ricordando la condizione di diffrazione di Bragg:

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

Poiché la sorgente di diffrazione è elettronica, occorre considerare la lunghezza d'onda di de Broglie associata al fascio elettronico. Ricordando:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = 0.728\ nm$$

La minima distanza interplanare risolvibile si ottiene minimizzando:

$$d_{min} = \min\left(\frac{n\lambda}{2\sin(\theta)}\right) = \frac{\lambda}{2} = 0.364\ nm$$

Per i piani della famiglia {110} la distanza interplanare è pari a:

$$d = \frac{a}{\sqrt{1^2 + 1^2 + 0^2}} = \frac{a}{\sqrt{2}} = 0.883\ nm$$

Il numero atteso di picchi di diffrazione è pari a:

$$n = \frac{2d\sin(\theta)}{\lambda} \leq \frac{2d}{\lambda} = 2.428 \ \rightarrow \ \ n = 1, 2$$

Gli angoli richiesti sono pertanto:

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

$$n = 1 \rightarrow \ \theta_1 = \arcsin\left(\frac{\lambda}{2d}\right) \simeq 24\,°$$

$$n = 2 \rightarrow \ \theta_2 = \arcsin\left(\frac{2\lambda}{2d}\right) = \arcsin\left(\frac{\lambda}{d}\right) \simeq 55\,°$$

Esercizio 3

Si considerino una cavità C_1 di raggio r = 1 cm all'equilibrio termodinamico, emittente attraverso un orifizio una potenza P = 2 kW, e un corpo B_1 alla stessa temperatura di C_1. Sapendo che lo spettro di emissione di B_1 presenta un picco in corrispondenza di λ = 2 μm, stabilire se B_1 è un corpo nero.

Soluzione 3

Considerando la cavità C_1 come un corpo nero, la potenza emessa è descritta dalla legge di Stefan-Boltzmann:

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

La temperatura di C_1 è quindi pari a:

$$T = \left(\frac{P}{\sigma A}\right)^{\frac{1}{4}} = \left(\frac{P}{\sigma \cdot 4\pi r^2}\right)^{\frac{1}{4}} = 2302\ K$$

Il testo riporta che anche il corpo B_1 si trova a tale temperatura. Per determinare se sia un corpo nero, si può verificare la legge di Wien:

$$\lambda T = 4.6 \cdot 10^{-3}\ K \cdot m \neq 2.8 \cdot 10^{-3}\ K \cdot m = c_W$$

Poiché il prodotto λT non rispetta la legge di Wien, si può concludere che B_1 non è un corpo nero.

Esercizio 4

In un setup di esperimento fotoelettrico un catodo in oro (W = 5.1 eV) viene irraggiato con una sorgente luminosa $\lambda = 200$ nm. Determinare la tensione di stopping V_{stop} da applicare al setup affinché non si osservi fotocorrente all'anodo. Assumendo tensione nulla ai capi degli elettrodi, calcolare la lunghezza d'onda di de Broglie dell'elettrone λ_{dB}.

Soluzione 4

Il fascio luminoso ha energia:

$$E_{ph} = \frac{hc}{\lambda_1} = 6.2\ eV$$

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

$$E_{k,c} = E_{ph} - W = 6.2\ eV - 5.1\ eV = 1.1\ eV$$

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

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

In assenza di tensione applicata, l'elettrone fotoemesso ha energia cinetica.

$$E_k = E_{ph} - W = 1.1\ eV$$

La sua lunghezza d'onda è quindi data da:

$$E_k = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2}{2m\lambda_{dB}^2} \quad \rightarrow \quad \lambda_{dB} = \frac{h}{\sqrt{2mE_k}} = 1.16\ nm$$

Esercizio 5

Dato uno stato stazionario di un elettrone in una buca di potenziale simmetrica V(-x) = V(x), calcolare il valore d'aspettazione della posizione e del momento dell'elettrone.

Soluzione 5

Il valore d'aspettazione per un generico operatore è dato da:

$$\bar{o} = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{O} \psi(x)\, dx$$

Dove la funzione d'onda dell'elettrone, essendo confinata in un potenziale simmetrico, deve parimenti essere simmetrica o antisimmetrica, ovvero:

$$\psi(x) = \psi(-x) \quad \vee \quad \psi(x) = -\psi(-x)$$

Ricordando le definizioni dell'operatore posizione e momento:

$$\hat{x} = x \qquad\qquad \hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

Allora per la posizione:

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \cdot x \cdot \psi(x)\, dx = \int_{-\infty}^{+\infty} x \cdot |\psi(x)|^2\, dx$$

Dalle condizioni di simmetria dell'autofunzione, segue che $|\psi(x)|^2 = |\psi(-x)|^2$, cioè $|\psi(x)|^2$ è pari sia per le autofunzioni pari che per le autofunzioni dispari; viceversa, x è una funzione dispari, pertanto prodotto di x e $|\psi(x)|^2$ è dispari:

$$\bar{x} = \int_{-\infty}^{0} x \cdot |\psi(x)|^2\, dx + \int_{0}^{+\infty} x \cdot |\psi(x)|^2\, dx = -\int_{0}^{+\infty} x \cdot |\psi(x)|^2\, dx + \int_{0}^{+\infty} x \cdot |\psi(x)|^2\, dx = 0$$

Per il momento:

$$\bar{p} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left(-i\hbar \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right) dx$$

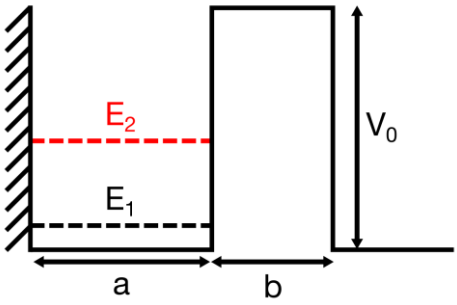
Le autofunzioni in uno stato confinato sono reali o possono essere scelte come tali, pertanto $\psi^*(x) = \psi(x)$. La derivata di una funzione dispari è una funzione pari; viceversa, la derivata di una funzione pari è una funzione dispari. In entrambi i casi, pertanto, il prodotto di $\psi(x)$ e $\frac{\partial \psi(x)}{\partial x}$ è una funzione dispari:

$$\psi^*(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} = -\psi^*(-x) \frac{\partial \psi(-x)}{\partial x}$$

Ne consegue pertanto che anche per il momento il valor medio è nullo: $\bar{p} = 0$.

Esercizio 6

Si consideri il sistema buca-barriera in **Fig. 2**, dove a = 2 nm, b = 1.5 nm, e V_0 = 2 eV. Determinare il campo F da applicare alla barriera affinché il tempo medio di tunneling per un elettrone sul secondo livello energetico della buca sia t_{TUN} = 1 ns. Si usi l'approssimazione di buca a pareti infinite ai soli fini del calcolo dei livelli energetici.



Soluzione 6

In approssimazione di buca a pareti infinite, gli autostati della buca sono localizzati alle energie:

$$E_n = n^2 \frac{h^2}{8ma^2} \quad \rightarrow \quad E_2 = 4\frac{h^2}{8ma^2} = 0.377\ eV$$

Il tempo di tunneling è definito come:

$$t_{TUN} = \frac{t_{AR}}{P_t}$$

Dove il tempo di andata e ritorno può essere studiato in via semiclassica come:

$$t_{AR} = \frac{2a}{v} = \frac{2a}{\sqrt{\frac{2E_2}{m}}} = 2a\sqrt{\frac{m}{2E_2}} \simeq 11\ fs$$

La probabilità di tunneling attraverso la barriera deve quindi valere:

$$P_t = \frac{t_{AR}}{t_{TUN}} = 1.1 \cdot 10^{-5}$$

In assenza di campo applicato la probabilità di tunneling per l'elettrone sul secondo livello vale:

$$P_t|_{F=0} \simeq e^{-2\alpha b} = e^{-2\frac{\sqrt{2m(V_0-E_2)}}{\hbar}b} = 3.2 \cdot 10^{-9}$$

Che è quindi insufficiente a garantire il tempo di tunneling richiesto. Supponiamo, a valle dell'applicazione del campo, di essere in condizione di tunneling Fowler-Nordheim. Allora:

$$P_t \simeq e^{-\frac{4\sqrt{2m}}{3\,q\hbar F}(V_0-E_2)^{\frac{3}{2}}}$$

Per garantire la probabilità richiesta, il campo dovrebbe quindi essere:

$$F = -\frac{4}{3}\frac{\sqrt{2m}}{q\hbar}(V_0 - E_2)^{\frac{3}{2}}\frac{1}{\log(P_t)} = 1.23\ V/nm$$

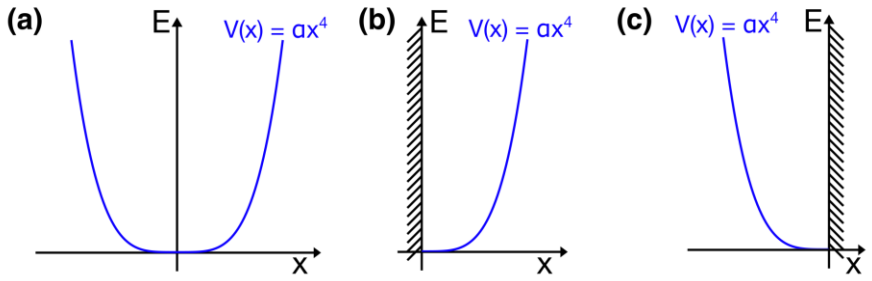
Occorre a questo punto verificare la validità dell'ipotesi iniziale di tunneling Fowler-Nordheim:

$$\mathrm{V}_0 - qFb = 0.147\ eV < 0.377\ eV = E_2$$

Poiché l'estremo della barriera si trova al di sotto dell'energia E_2 a seguito dell'applicazione del campo, l'ipotesi iniziale è valida.

Esercizio 7

Si consideri il profilo di potenziale del tipo $V(x) = \alpha x^4$ mostrato in **Fig. 3a**, dove $\alpha = 1$ eV/(nm)^4. Stimare a mezzo del principio di indeterminazione di Heisenberg la dipendenza dell'energia degli autostati dal numero quantico n e la posizione dei primi 3 autostati E_1, E_2, E_3. Considerare quindi le due semibuche in **Fig. 3b** e **Fig. 3c**, ottenute inserendo una parete infinita di potenziale in x = 0. Commentare qualitativamente le differenze attese fra le tre buche in termini di (i) dipendenza degli autostati dal numero quantico e (ii) posizione degli autostati.



Soluzione 7

Per stimare gli autostati dal principio di indeterminazione si può imporre:

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

Dove le incertezze sulla posizione e sul momento possono essere approssimate a:

$$\Delta p \simeq p_{max} - p_{min} = 2\sqrt{2mE} \qquad \Delta x \simeq x_{max} - x_{min} = 2\left(\frac{E}{\alpha}\right)^{\frac{1}{4}}$$

Da cui quindi gli autostati:

$$2\sqrt{2mE} \cdot 2\left(\frac{E}{\alpha}\right)^{\frac{1}{4}} = \frac{4\sqrt{2m}}{\alpha^{\frac{1}{4}}} E^{\frac{3}{4}} \simeq n\hbar$$

$$E_n \simeq \left(\frac{\alpha^{\frac{1}{4}}\hbar}{4\sqrt{2m}}\right)^{\frac{4}{3}} \cdot n^{\frac{4}{3}} = E_1 n^{\frac{4}{3}}$$

Dove $E_1 = 17.9$ meV. Pertanto:

$$E_1 = 17.9\ meV \qquad E_2 = 45\ meV \qquad E_3 = 77.3\ meV$$

Considerando le tre configurazioni in figura, il maggiore confinamento imposto dalle configurazioni (b) e (c) suggerisce uno spostamento verso energie maggiori degli autostati, poiché diminuendo l'indeterminazione sulla posizione ($\Delta x_a > \Delta x_b \simeq \Delta x_c$) dovrà aumentare l'indeterminazione sul momento ($\Delta p_a < \Delta p_b \simeq \Delta p_c \rightarrow E_a < E_b \simeq E_c$). Mantenendosi tuttavia invariata la dipendenza del potenziale dalla posizione, non ci si attende uno scostamento significativo della dipendenza dal numero quantico nel passare dalla buca (a) alla buca (b) o alla buca (c).

Esercizio 8

Due buche di pari larghezza a sono accoppiate a mezzo di una barriera deltiforme di modulo u_0. Sapendo che il sesto autostato del sistema è localizzato ad energia E_6 = 1.2 eV e che la densità di probabilità dello stato non stazionario associato al primo doppietto oscilla con periodo $T_{1\text{-}2}$ = 100 fs, determinare l'energia E_1 del primo autostato e il modulo u_0 della barriera.

Soluzione 8

Gli autostati di un sistema di due buche accoppiate di pari larghezza a sono distinguibili in due serie alternantesi, una caratterizzata da autofunzioni pari e una da autofunzioni dispari, per le quali valgono:

$$\tan(k_p a) = -\frac{\hbar^2 k_p}{m_e u_0} \qquad \text{pari}$$

$$\tan(k_d a) = 0 \qquad \text{dispari}$$

Gli autostati seguono una successione pari-dispari. Pertanto, il sesto autostato della buca corrisponde al terzo autostato dispari. Allora:

$$\tan(k_6 a) = 0 \quad \leftrightarrow \quad k_6 a = n\pi \qquad n = 3$$

Nota l'energia E_6 è quindi possibile calcolare la larghezza delle due buche come:

$$a = 3\pi \cdot \frac{\hbar}{\sqrt{2 m_e E_6}} = 1.68\ nm$$

Il secondo autostato, ovvero il primo autostato dispari, è quindi localizzato ad energia:

$$k_2 = \frac{\pi}{a} = 1.87 \cdot 10^9\ m^{-1} \quad \rightarrow \quad E_2 = 133\ meV$$

Noto il periodo di oscillazione dello stato non stazionario associato al primo doppietto, è possibile ricavare l'energia del primo autostato come:

$$E_1 = E_2 - \Delta E_{2-1} = E_2 - h\nu_{2-1} = E_2 - \frac{h}{T_{2-1}} = 92\ meV \quad \rightarrow \quad k_1 = \frac{\sqrt{2 m_e E_1}}{\hbar} = 1.55 \cdot 10^9\ m^{-1}$$

Il modulo u_0 della barriera si può quindi ricavare come:

$$\tan(k_1 a) = -\frac{\hbar^2 k_1}{m_e u_0} \quad \rightarrow \quad u_0 = -\frac{\hbar^2 k_1}{m_e \tan(k_1 a)} = 0.2\ eV \cdot nm$$

Esercizio 9

Un pacchetto d'onda gaussiano con $\sigma_k = 10^8$ m^{-1} si propaga in un materiale caratterizzato da una relazione di dispersione del tipo $E(k) = E_0 \cdot [1+2 \cdot \cos(2ka)]$, dove $E_0 = 1$ eV e $a = 1$ nm. Sapendo che il pacchetto è centrato nel minimo k_0 compreso fra 0 e π/a tale da non avere dispersione, determinarne la velocità di gruppo v_g e la deviazione standard nello spazio σ_x.

Soluzione 9

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

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}|_{k=k_0} = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}|_{k=k_0}$$

Per identificare il k_0 intorno a cui è centrato il pacchetto, è possibile sfruttare l'informazione sull'assenza di dispersione. Ricordando che la deviazione standard nello spazio è data da:

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

Allora perché il pacchetto non subisca dispersione deve essere $\beta = 0$. Ricordando che:

$$\beta = \frac{1}{2}\frac{d^2\omega}{dk^2}|_{k=k_0} = \frac{1}{2\hbar}\frac{d^2E}{dk^2}|_{k=k_0} = \frac{1}{2\hbar}(-E_0 \cdot 8a^2 \cdot \cos(2k_0a))$$

Allora deve essere (imponendo il requisito sul minimo k_0 fra 0 e π/a):

$$\cos(2k_0a) = 0 \quad \rightarrow \quad 2k_0a = \frac{\pi}{2} + n\pi \quad \rightarrow \quad 2k_0a = \frac{\pi}{2} \quad \rightarrow \quad k_0 = \frac{\pi}{4a} = 0.78 \cdot 10^9 \ m^{-1}$$

Pertanto:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk}|_{k=k_0} = \frac{1}{\hbar}\frac{dE}{dk}|_{k=k_0} = -\frac{4E_0 \cdot a \cdot \sin(2k_0a)}{\hbar} = -6.07 \cdot 10^6 \ m/s$$

La deviazione standard è quindi legata al solo parametro α, che a sua volta dipende dalla deviazione standard del peso del pacchetto nello spazio del momento:

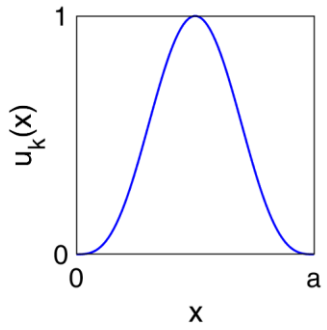
$$\alpha = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{\sigma_k^2} = (7.07 \ nm)^2$$

Da cui quindi:

$$\sigma_x(t) = \sqrt{\alpha + \frac{\beta^2}{\alpha}t^2} = \sqrt{\alpha} = 7.07 \ nm$$

Esercizio 10

Un elettrone in un cristallo di passo a = 1.5 nm è descritto da un'autofunzione $\psi_k(x) = u_k(x)e^{ikx}$. Sapendo che il minimo valore (in modulo) non nullo ammesso per k è pari a $k_{min} = 0.523 \cdot 10^9$ m^{-1}, determinare il numero di atomi N che compongono il cristallo. Nota la funzione di Bloch mostrata in **Fig. 4**, tracciare quindi il profilo della parte reale dell'autofunzione $\psi_k(x)$ in corrispondenza di $k = 2.094 \cdot 10^9$ m^{-1}.



Soluzione 10

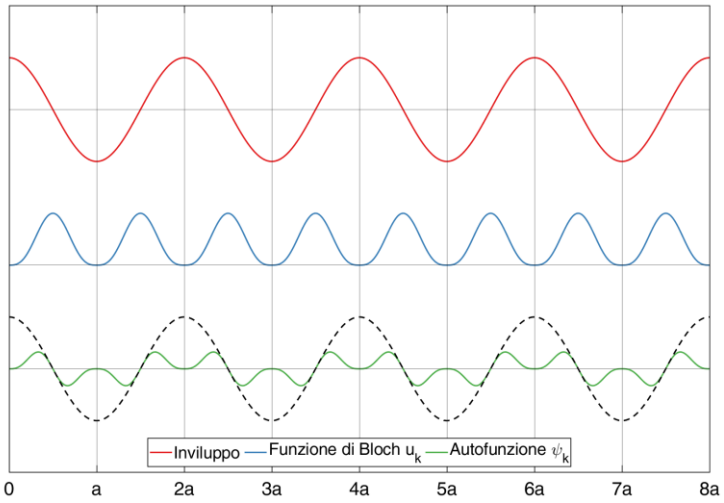
In un cristallo composto da un numero N di atomi, gli stati disponibili sono dati da:

$$k = \frac{2\pi n}{Na} \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm \frac{N}{2}$$

Il minimo valore in modulo che può quindi assumere il vettore d'onda si ha in n = 1, ovvero:

$$k_{min} = \frac{2\pi}{Na} \quad \rightarrow \quad N = \frac{2\pi}{k_{min} a} = 8$$

Per tracciare il grafico nel k richiesto, calcoliamo la periodicità della funzione inviluppo:

$$e^{ik(x+L)} = e^{ikx} \quad \rightarrow \quad kL = 2\pi \quad \rightarrow \quad L = \frac{2\pi}{k} = 3nm = 2a$$

Che corrisponde quindi a 2 passi reticolari.