Raccolta di esercizi e temi d'esame
per il Corso di
FISICA DELLO STATO SOLIDO
Università di Trieste

Questa raccolta di problemi, disponibile all' indirizzo
http://www-dft.ts.infn.it/ esmargia/physics/eserc-www.ps , comprende:

(i) esercizi d'esame, sia d'appello che per i compitini in corso d'anno,

(ii) esercizi usualmente svolti durante le esercitazioni,

(iii) alcuni esercizi più lunghi e complessi da svolgere a casa.

Riguardo alla categoria (i), a cui appartengono gli esercizi il cui titolo è preceduto da un asterisco, si noti che per l'esame scritto o compitino a volte si chiede la soluzione di due problemi, a volte di uno, in funzione della complessità dei problemi stessi. Inoltre, spesso il totale di punti a disposizione in una data prova, in particolare per i compitini, può essere leggermente superiore al massimo di 30/30; le domande possono avere, e spesso hanno, peso diverso. Il tempo totale a disposizione è solitamente di tre ore.

Siccome lo scopo dell' esame è di valutare la capacità dello studente di risolvere problemi, si chiede che, per quanto possibile, tutti i passaggi siano resi espliciti e siano motivati, in modo che si possa comprendere il processo di soluzione usato. In caso in cui i dettagli siano carenti o si dia solo il risultato la risposta non viene conteggiata. L'uso di notazioni chiare e compatte è vivamente incoraggiato, così come l'uso sistematico del controllo dimensionale delle espressioni via via raggiunte. Quando viene chiesta una "valutazione" si intende una valutazione numerica, nelle unità eventualmente richieste. In questo caso a volte può essere necessario lasciare indicato un parametro il cui valore esplicito non è fornito, per esempio $\omega_c = 1.76H$ $(Gauss)$ Hertz. Se non è specificato altrimenti, tutte le valutazioni vanno fornite con 3 cifre significative, *né di più né di meno.*

Il testo di riferimento è il libro di N. Ashcroft e N. D. Mermin, Solid State Physics, Saunders-College (1976). È anche utile il testo di C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, Wiley (1996). Attenzione alle possibili differenze di notazione e di convenzioni!

Sull' Ashcroft-Mermin vi sono numerosi esercizi, di varia difficoltà, alcuni dei quali vengono svolti a lezione. Degni di nota i seguenti: Cap. **1**, n. 5; **2**, 1; **4**, 6; **8**, 1 e 2; **10**, 1, 2 e 3; **12**, 1, 2, 6 e 7; **13**, 1; **16**, 2 e 3; **17**, 3 e 5; **20**, 4; **22**, 1 e 5; **28**, 4, 6 e 7; **34**, 1.

La soluzione di esercizi tratti da altri testi è ovviamente consigliata, con l'avvertenza già fatta. Può essere utile il libro di L. Mihály e M. C. Martin, Solid State Physics: Problems and Solutions (Wiley, 1996).

Contents

1 * Conduttore organico cristallino

Un conduttore organico cristallino ha $\omega_p = 2.50 \times 10^{15} s^{-1}$ come frequenza di plasma e $\tau = 5.03 \times 10^{-15}$ come tempo di rilassamento, a temperatura ambiente.

1. Si calcoli la conducibilità elettrica (*statica*) σ del conduttore utilizzando i dati forniti in c.g.s..

2. Si esprima ora σ in MKSA, ovvero in unità di (ohm cm)$^{-1}$.
Nota che: 1 Volt = 1/300 statvolt (unità cgs di potenziale) e 1 Ampere = 3×10^9 statampere (unità cgs di corrente).

3. Assumendo che il trasporto sia dovuto ad un solo tipo di portatori (elettroni quasiliberi), con densità $n = 7.5 \times 10^{20} cm^{-3}$, si calcoli la massa efficace m^* degli stessi, (i) in grammi e (ii) in unità di masse elettroniche.

4. Si calcoli il parametro r_s dei portatori, usando la definizione $1/n = 4\pi r_s^3 a_0^3/3$.

5. Si calcoli l'energia di Fermi dei portatori in eV.

6. Si calcoli la temperatura di Fermi.

7. Si calcoli il contributo al calore specifico cristallino di tali portatori (trattati come elettroni liberi di massa m^* e nell'approssimazione $T \ll T_F$). Si esprima C_v in $calorie/(mole\ ^oK)$. È corretta l'approssimazione $T \ll T_F$?

2 * Plasmone di superficie

Si consideri un metallo omogeneo che occupi il semispazio $z > 0$, il restante semispazio essendo occupato dal vuoto. La funzione dielettrica del metallo $\varepsilon(\omega)$ (trascurando la dispersione spaziale) sia approssimata con la forma di Drude.

Si considerino onde di densità nel metallo, che quindi non portino ad accumulo di carica $\rho(z) = 0$, $z > 0$. Tali onde dovranno soddisfare l'equazione di Poisson

$$\nabla^2 V(\mathbf{r}) = 0 \tag{1}$$

sia per $z > 0$ che per $z < 0$. Poniamo anche $\mathbf{s} \equiv (x, y)$, così che $\mathbf{r} = (\mathbf{s}, z)$.

1. Si consideri, per $z > 0$, il potenziale $V(\mathbf{r}) = V_0 e^{-\kappa z} cos(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{s})$. Si trovi quale condizione devono verificare $\mathbf{Q}$ e κ perchè l'Eq. 1 sia soddisfatta.

2. Si calcoli il campo elettrico corrispondente al potenziale del punto precedente.

3. Si consideri per $z < 0$ il potenziale $V'(\mathbf{r}) = V_0' e^{\kappa' z} cos(\mathbf{Q}' \cdot \mathbf{s})$. Si trovi che relazione devono soddisfare $\mathbf{Q}'$ e κ'.

4. Si calcoli il campo elettrico corrispondente al potenziale del punto precedente.

5. Imponendo la continuità del campo elettrico parallelo $\mathbf{E}_p \equiv (E_x, E_y, 0)$ a $z = 0$, si ricavino le relazioni tra V_0 e V_0' e tra κ e κ'.

6. Imponendo la continuità dello spostamento trasverso $\mathbf{D}_t \equiv (0, 0, D_z)$ a $z = 0$, si ottenga una condizione sulla frequenza di propagazione ω.

7. Nel regime di collisioni rare o regime di interazione ($\omega\tau \gg 1$) si ottenga una espressione esplicita della frequenza di propagazione in termini della densità media di elettroni n, della loro massa m, carica e.

8. Si valuti la frequenza di cui sopra per l'alluminio metallico a condizioni ambiente.

3 * Plasmone in una sferetta di *jellium* alla densità dell'Sr

Si consideri una sferetta di *jellium*, costituita da (i) una sferetta di raggio R centrata all'origine di carica positiva con densità uniforme [il sostrato o *background*] e (ii) N elettroni che si muovono nel potenziale del sostrato. Il sistema è elettricamente neutro e si considera la situazione nella quale gli elettroni sono distribuiti con densità uniforme su una sfera sempre di raggio R ed inizialmente concentrica con quella di sostrato.

Si descriva il modo [*plasmone*] che corrisponde a piccoli spostamenti della sfera elettronica rispetto a quella di sostrato.

1. Si dia la densità di carica del sostrato in termini dei parametri del problema, denotando il valore assoluto della carica elettronica con e.

2. Sfruttando il teorema di Gauss si calcoli il campo elettrico dovuto al sostrato dentro e fuori la sfera di sostrato.

3. Utilizzando la risposta al punto precedente si dia il campo elettrico dovuto alla sfera di carica elettronica, al suo interno, quando questa sia centrata in $\mathbf{d}$.

4. Si calcoli la forza dovuta a tutte le cariche su una carica test che cada nell'intersezione delle sfere, quando la sferetta elettronica sia spostata di $\mathbf{d}$ dall'origine e naturalmente $d < 2R$.

5. Consideriamo $d \ll R$ e trascuriamo cosa succede agli elettroni fuori dalla sferetta di sostrato. Utilizzando la risposta al punto precedente sia dia la forza su un elettrone quando lo spostamento della sferetta elettronica sia $\mathbf{d}$ e si scriva la sua equazione del moto.

6. Si risolva l'equazione ottenuta al punto precedente e si valuti la frequenza di oscillazione [o frequenza plasmonica] nel caso in cui $R = 5\mathring{A}$ e $N = 125$.

7. Il modo in questione potrebbe essere eccitato con della luce. In che fascia di frequenza: infrarosso, visibile o ultravioletto? [Questa domanda è facoltativa, ma la eventuale risposta va motivata chiaramente.]

4 Gas di elettroni unidimensionale

Si consideri un sistema di N elettroni non interagenti che si possano muovere su un segmento di lunghezza L. Si considerino due diverse condizioni al contorno:

(a) Condizioni al contorno di Born — von Karman: $\psi(x + L) = \psi(x)$

(b) Condizioni di "parete dura", cioè $\psi(L) = \psi(0) = 0$.

Per ognuno dei casi (a) e (b):

1. Si calcolino autofunzioni ed autovalori.
2. Si calcoli la densità $n(x)$. Si faccia un grafico qualitativo. Si consideri in particolare che cosa succede nel limite termodinamico ($N,\ L \longrightarrow \infty;\ N/L = n$).
3. Si calcoli l'energia di Fermi $E_F(N, L)$ e se ne studi il limite termodinamico.
4. Si calcoli l'energia totale $E_{tot}(N, L)$. Si studi $E_{tot}(N, L)$ discutendo se nel limite termodinamico sia possibile spezzarla in un termine di *volume*
$$E_V(N, L) = N\mathcal{E}_V\left(\frac{N}{L}\right)$$
ed uno di *superficie*
$$E_S(N, L) = \mathcal{E}_S\left(\frac{N}{L}\right),$$
più eventuali termini che vanno a zero nel limite considerato. Si discuta una eventuale relazione con l'energia di Fermi.

Indicazioni

1. Sono utili le seguenti relazioni:
$$\sum_{n=1}^{m} n^2 = \frac{1}{6}m(m + 1)(2m + 1)$$
$$\sum_{n=1}^{m} a^n = \frac{a - a^{m+1}}{1 - a}$$
2. Si ricordi l'espressione della funzione di Bessel di ordine zero:
$$j_0(x) = \frac{\sin x}{x}.$$

5 Condizioni al contorno e limite termodinamico

Si considerino N elettroni liberi [senza potenziali esterni] e non interagenti che possano muoversi in una dimensione con $0 \le x \le L$. La densità di particelle è data da $n = N/L$. Nel seguito, si assuma per semplicità $N = 4M + 2$, con M un intero.

1. Si risolva preliminarmente il problema di calcolare gli orbitali di singola particella $\phi_k(x)$ con condizioni al contorno periodiche $\phi_k(x + L) = \phi_k(x)$. Si calcolino i k permessi, quindi ricordandosi che in ciascun orbitale spaziale si possono mettere 2 elettroni con proiezioni di spin opposte si calcolino:
   - i k occupati;
   - l'energia per particella [si usino le identità date di sotto].
   - Si discuta qual è la relazione tra il risultato del punto precedente [relativo a N elettroni sul segmento L] e quello di un sistema di infiniti elettroni che si possano muovere su tutto l'asse reale ma non densità uguale a n. [Si può pensare questo come il limite termodinamico nel quale N ed L vanno ad infinito con $N/L = n$=costante].
2. Si risolva il problema del punto (1) precedente nel caso nel quale le condizioni al contorno siano $\phi_k(x + L) = e^{i2\pi\alpha}\phi_k(x)$ limitatandosi a determinare i k permessi e quelli occupati.
   - Si consideri [senza tentare di calcolarlo in quanto f e' generica] il valor medio di una funzione $f(k)$ sui k occupati
   $$\langle f \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k,occup.} f(k).$$
   Questa quantità dipenderà da α in quanto i k permessi dipendono da α. Quindi $\langle f \rangle = g(\alpha)$.
   - Si mostri che $\overline{g}$, la media su α di $g(\alpha)$,
   $$\overline{g} = \int_{-1/2}^{1/2} d\alpha \, g(\alpha),$$
   con N finito, coincide con il valore di $\langle f \rangle$ nel limite termodinamico e $n = N/L$. Questo vale per qualsiasi funzione f e non solo per l'energia. [Si suggerisce di profittare del fatto che l'integrale della somma sui k permessi diventa la somma di integrali che ricoprono perfettamente un opportuno intervallo.]
   - Per poter mostrare quanto sopra bisogna naturalmente saper scrivere $\langle f \rangle$ nel limite termodinamico come un integrale.

Almeno in questo caso semplice la media sulle condizioni al contorno pur con N e L finiti dà un risultato equivalente al limite termodinamico per un sistema alla stessa densità $n = N/L$!

6 * Film di Elio–3 (He^3).

Si consideri un film di Elio–3, ovvero un sistema nel quale gli atomi di Elio–3 (si tratta di particelle con spin 1/2, dunque fermioni) sono costretti a muoversi in un mondo bidimensionale. Si pensi di essere a temperatura prossima allo zero assoluto. La densità areale del film è $\rho = 2.24 \times 10^{-9} g/cm^2$. Si ponga la massa atomica dell'Elio–3 uguale a 3.

1. Si valuti la densità areale n in $atomi/cm^2$ per il film considerato.

2. Si calcoli r_s, definito come il raggio (in unità di raggi di Bohr) del disco che in media contiene un atomo, come funzione di n. Si valuti r_s.

3. Si calcoli il raggio del disco di Fermi k_F come funzione di n e lo si esprima anche come funzione di r_s.

4. Si calcoli l'energia di Fermi ϵ_F come funzione di r_s in Ry.

5. Si valuti l'energia di Fermi per il film in questione, in eV.

6. Si valuti la temperatura di Fermi per il film in questione in ^{o}K.

7 * Metallo semplice

Un metallo ha un calore specifico di 1879 erg $\mathrm{cm}^{-3}\mathrm{K}^{-1}$ a T=3 K. Si descriva il metallo come un gas di elettroni.

1. Si calcoli la densità elettronica del metallo n in cm^{-3}.

2. Si calcoli l'energia di Fermi in eV.

3. Si calcoli la pulsazione delle oscillazioni di plasma in s^{-1}.

4. È più grande l'energia di Fermi o l'energia del plasmone $\hbar\omega_p$?

5. Si sa che, a T=77 K, $\omega_p\tau = 1644$. Quanto vale a questa temperatura la parte reale della funzione dielettrica alla frequenza di plasma, come ordine di grandezza?

6. Alla stessa temperatura quanto vale la parte immaginaria della funzione dielettrica alla frequenza di plasma, come ordine di grandezza?

8 * Elettroni in 2 dimensioni

Si considerino degli elettroni in 2 dimensioni [cioè vincolati a muoversi nel piano (x,y)]. Gli elettroni sono sottoposti al potenziale periodico

$$U(\mathbf{r}) = -2U\left\{\cos\left[gx\right] + 2\cos\left[\frac{gx}{2}\right]\cos\left[\frac{\sqrt{3}}{2}gy\right]\right\},$$

con $U > 0$.

1. Si scriva $U(\mathbf{r})$ in termini di componenti di Fourier. Quante sono le componenti non nulle? Quali i corrispondenti vettori d'onda $\mathbf{G}$? Quanto valgono le $U_{\mathbf{G}}$?

2. Si dia una base per il reticolo diretto. Si dia anche uno schizzo qualitativo (ma corretto!) del reticolo reciproco e di quello diretto.

3. Quanto vale il potenziale (i) all'origine; (ii) a metà della congiungente tra due siti primi vicini; (iii) ad uno qualsiasi dei 6 punti più lontani dall'origine entro la cella di Wigner-Seitz.

4. Si supponga che ci siano due elettroni per cella e che gli elettroni siano non interagenti. Per $U = 0$ (elettroni liberi) si esprimano k_F e l'energia per elettrone ϵ_{el} in termini di g.

5. Sempre per per $U = 0$ si costruisca lo stato fondamentale *occupando* i vettori d'onda all'interno della prima zona di Brillouin (FBZ), invece che il disco di Fermi. Si esprima l'energia per elettrone ϵ_{rv} in termini di g.

[Si consiglia di sfruttare la simmetria del problema per esprimere l'energia come somma su un dodicesimo della FBZ (ad esempio nell'angolo irriducibile $0 < \phi < \pi/6$).]

6. Quanto valgono i rapporti (i) $k_F/(g/2)$ e (ii) $\epsilon_{el}/\epsilon_{rv}$?

7. Se $g = 7.25\mathring{A}^{-1}$, quanto vale (in $\mathring{A}$) il parametro reticolare del reticolo diretto?

8. E quanto vale ϵ_{el} in Ry?

9 * Reticolo a nido d'ape

Si consideri il *piastrellamento del piano con esagoni*. Nel seguito denoteremo questo reticolo bidimensionale come *a nido d'ape* e lo considereremo orientato in modo che uno dei lati dell'esagono sia parallelo all'asse y. Le posizioni rispettivamente alla base ed estremo superiore del lato verticale dell'esagono sono occupate da atomi di tipo A e B.

1. Il reticolo in questione è un Bravais con base: qual è il Bravais in questione? Si operi una scelta per i vettori primiti del Bravais ($\mathbf{a}_1$ ed $\mathbf{a}_2$) .

2. Si diano i vettori della base ($\mathbf{b}_1$ ed $\mathbf{b}_2$) .

3. Si dia il reciproco del Bravais e i suoi vettori primitivi ($\mathbf{g}_1$ ed $\mathbf{g}_2$) .

4. Si calcoli il fattore di forma geometrico al generico vettore di reticolo reciproco $\mathbf{G} = n_1\mathbf{g}_1 + n_2\mathbf{g}_2$, se f_A e f_B (reali) sono i fattori di forma atomici, indipendenti dal vettore d'onda [possiamo pensare a diffrazione di neutroni].

5. Per quali vettori $\mathbf{G}$ il fattore di forma geometrico $F(\mathbf{G})$ è reale, indipendentemente dal valore assunto dal rapporto $\alpha = f_A/f_B$?

6. Se $f_B = -f_A$, ci sono dei $\mathbf{G}$ per i quali $F(\mathbf{G}) = 0$? Se si, si dica quali e si provi a disegnarli nel reticolo reciproco.

10 * Reticolo quadrato con base

Si consideri un reticolo quadrato di parametro reticolare a, con base $\vec{0}$, $\vec{d} = a(1/2, 1/2)$, occupata da atomi rispettivamente con potenziale $\phi_1(r)$ e $\phi_2(r)$.

1. Si scriva il potenziale cristallino $U(\mathbf{r})$ come somma reticolare.

2. Si scriva il potenziale $U(\mathbf{r})$ in termini delle sue componenti di Fourier.

3. Si ponga $\phi_1(q) = [\alpha(q)+\beta(q)]/2$ e $\phi_2(q) = [\alpha(q)-\beta(q)]/2$ e si riesprimano le componenti di Fourier di $U(\mathbf{r})$ in termini di α e β.

4. Si dica che semplificazioni si ottengono per le componenti $U_{\mathbf{G}}$ del potenziale. In quanti sottoinsiemi si separa l'insieme dei $\{\mathbf{G}\}$?

5. Se $\alpha = 0$, in spazio reciproco il potenziale ha la simmetria di quale reticolo, in particolare con quale parametro reticolare e quali assi?

6. Se $\beta = 0$, in spazio reale il potenziale ha la simmetria di quale reticolo, in particolare con quale parametro reticolare e quali assi?

7. Si scriva l'ampiezza di scattering del cristallo ponendo per i fattore di forma dei due atomi $f_1(q) = [\gamma(q) + \delta(q)]/2$ e $f_2(q) = [\gamma(q) - \delta(q)]/2$. Nel caso in cui $\gamma = 0$, quali operazioni (rotazioni e traslazioni e in che ordine) bisogna fare per riportare il reciproco ad un familiare Bravais?

11 * Riempimento delle bande in un reticolo bidimensionale quadrato.

Si consideri l'equazione di Schrödinger di particella singola per un elettrone che si muova su un piano nel potenziale

$$U(x,y) = -2U\left[cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) + cos\left(\frac{2\pi}{a}y\right)\right].$$

1. In via preliminare si dica quali sono le posizioni e i valori di minimo e di massimo del potenziale $U(x,y)$. Si disegni il reticolo di Bravais corrispondente ai punti di massimo (o minimo).

2. Si dica quali sono gli $U_{\mathbf{G}}$ non nulli e che valore abbiano (*Suggerimento*: si usi la rappresentazione esponenziale complessa per le funzioni trigonometriche).

3. Si disegni la prima zona di Brillouin (FBZ).

4. Supponendo che U sia "piccolo", si calcoli, usando la teoria delle perturbazioni degenere al primo ordine, di quanto si modificano le onde piane agli angoli della FBZ che corrispondono a $k = (\pi/a)(\pm 1, \pm 1)$. In particolare si definisca prima banda la soluzione con energia più bassa.

5. Si ripeta il calcolo di cui sopra per le onde piane al centro dei lati della FBZ e si classifichino come prima e seconda banda rispettivamente la soluzione ad energia più bassa e quella ad energia più alta.

6. Si trovi quale condizione deve essere soddisfatta affinchè la seconda banda al centro del lato della FBZ diventi più bassa in energia della prima banda agli angoli della FBZ.

7. Per un sistema con 2 elettroni per cella, quando la condizione di cui al punto precedente è soddisfatta, quante bande risultano occupate? Si saprebbe fare un disegno della superficie di Fermi (nella FBZ) per $U \to 0$?

Variante: lo stesso esercizio ma con

$$U(x,y) = -2U\left[cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) cos\left(\frac{2\pi}{a}y\right)\right].$$

N.B. Nella variante il reticolo di Bravais sarà diverso, per cui le coordinate degli angoli della FBZ di cui al punto 4 andranno modificate di conseguenza.

12 * Tight binding in una dimensione

Si considerino elettroni vincolati a muoversi in una dimensione. Preliminarmente si consideri il problema di un elettrone in presenza di un potenziale $V(x) = -e^2 U \delta(x/a_B)$, ($U > 0$), con e e a_B rispettivamente la carica dell'elettrone e il raggio di Bohr.

1. Quali sono le unità di U?

2. Si scriva l'equazione di Schrödinger per il problema dell'elettrone in presenza del potenziale di cui sopra in unità atomiche, unità che saranno utilizzate in tutto il resto di questo problema.

3. Si trovi la funzione d'onda dello stato legato (normalizzato) del problema in questione, imponendo (i) la continuità della funzione d'onda e (ii) la discontinuità (nota) della sua derivata prima, all'origine. Ci sono altri stati legati oltre a quello trovato?

4. Si consideri ora una Bravais unidimensionale di delta caratterizzato dal potenziale periodico $v(x) = -U \sum_n \delta(x - n)$ e si pensi di trattarlo in tight binding. Con riferimento alle formule del libro di testo per un singolo orbitale s, si calcoli lo shift β come funzione di U.

5. Si calcoli l'integrale di overlap $\alpha(n)$, come funzione di U.

6. Si calcoli l'integrale di trasferimento $\gamma(n)$, come funzione di U.

7. Si calcoli la massa efficace della banda al suo minimo.

13 * Catena lineare di atomi di idrogeno: bande s e p con il metodo "tight-binding"

Consideriamo una catena lineare (lungo l'asse z) di atomi di idrogeno equispaziati: $\mathbf{R}_n = (0,0,z_n) = (0,0,na)$, n=0, ±1, ±2, $\ldots$. Vogliamo studiare le bande che derivano dai primi stati eccitati degeneri, cioè $2s$ e $2p$. È conveniente considerare p_x, p_y, e p_z (piuttosto che $p_{0,\pm1}$), dimodochè si possono scrivere come $\psi_{2p_x} = x\phi_p(r)$, $\psi_{2p_y} = y\phi_p(r)$, e $\psi_{2p_z} = z\phi_p(r)$ rispettivamente. Nel metodo "tight-binding" le energie delle 4 bande provenienti da tali stati sono date da (trascurando tutti gli integrali di *overlap*):

$$|(\mathcal{E}(k) - E_0)\delta_{ij} + \beta_{ij} + \widetilde{\gamma}_{ij}(k)| = 0$$

dove E_0 è l'energia dei livelli atomici $2s$ e $2p$, e:

$$\begin{aligned}
\widetilde{\gamma}_{ij}(k) &= \sum_n e^{\imath k z_n}\gamma_{ij}(z_n) \approx \gamma_{ij}(a)e^{\imath ka} + \gamma_{ij}(-a)e^{-\imath ka} \qquad (\textit{appross. a primi vicini}) \\
\gamma_{ij}(z_n) &= -\int d\mathbf{r}\ \psi_i(\mathbf{r})\psi_j(\mathbf{r}-\mathbf{R}_n)\Delta U(\mathbf{r}) \qquad (\textit{integrale di ``hopping''}) \\
\beta_{ij} &= \gamma_{ij}(0)
\end{aligned}$$

con gli indici i, j, che corrono sui 4 orbitali atomici di base.

1. Scrivere l'espressione della funzione $\Delta U(\mathbf{r})$ (mettersi nell'approssimazione a elettroni indipendenti, e considerare il potenziale del cristallo dovuto ai soli nuclei puntiformi). Discutere la simmetria di $\Delta U(\mathbf{r})$, e dimostrare che lo sviluppo di $\Delta U(\mathbf{r})$ intorno all'origine e fino a termini del terz'ordine compresi, è dato da

$$\Delta U(\mathbf{r}) \approx c_0 + c_1(x^2+y^2) + c_2 z^2.$$

2. Mostrare che la matrice β_{ij} è diagonale, determinare quanti e quali sono gli elementi indipendenti. (*N.B.: non si chiede il calcolo esplicito degli integrali*)

3. Mostrare che anche gli gli integrali di *hopping* $\gamma_{ij}(\mathbf{R})$ e $\gamma_{ij}(-\mathbf{R})$ si possono ricondurre a pochi elementi indipendenti, che nel linguaggio *tight binding* sono: $\langle ss\sigma\rangle = \gamma_{ss}(a)$, $\langle sp\sigma\rangle = \gamma_{sp_z}(a)$, $\langle pp\sigma\rangle = \gamma_{p_zp_z}(a)$, $\langle pp\pi\rangle = \gamma_{p_xp_x}(a)$. (*N.B.: anche in questo caso non si chiede il calcolo esplicito degli integrali*)

4. Mostrare che la matrice $\widetilde{\gamma}_{ij}$ è diagonale a blocchi, dire quanti e quali sono gli elementi indipendenti, e scriverli esplicitamente in funzione dei suddetti $\langle ss\sigma\rangle$, $\langle sp\sigma\rangle$, $\langle pp\sigma\rangle$, e $\langle pp\pi\rangle$.

5. Scrivere esplicitamente l'equazione che determina la dispersione delle bande, e discuterne le soluzioni, specificando eventuali degenerazioni. Farne un grafico qualitativo nella prima zona di Brillouin. Quali parametri determinano l'*ampiezza* delle bande?

6. Cosa cambierebbe, mantenendo le stesse approssimazioni, se gli atomi anzichè di idrogeno fossero di elio?

14 * Tight binding in un reticolo triangolare.

Si consideri un reticolo triangolare con un atomo ed un singolo orbitale (che si può assumere di tipo s) per sito, che trattiamo in approssimazione *tight binding*. Trascuriamo l'overlap e assumiamo che siano non nulli soltanto β e l'integrale di trasferimento a primi vicini γ, e che $\beta, \gamma > 0$ (notazione dell' A-M). L'energia dell'orbitale imperturbato è $-\epsilon_0$, con $\epsilon_0 > 0$.

Si utilizzi come base in spazio reale $\mathbf{a}_1 = a(1,0)$, $\mathbf{a}_2 = a(1/2, \sqrt{3}/2)$ e come base in spazio reciproco $\mathbf{g}_1 = (4\pi/\sqrt{3}a)(\sqrt{3}/2, -1/2)$ e $\mathbf{g}_2 = (4\pi/\sqrt{3}a)(0,1)$

1. Si disegni la prima zona di Brillouin. Denoteremo (nella zona) $\Gamma = (0,0)$, $A = (4\pi/3a, 0)$, $B = (0, 2\pi/\sqrt{3}a)$

2. Si calcoli la dispersione $\epsilon(\mathbf{k})$ della banda *tight binding*, esprimendola in modo che appaiano solo funzioni reali.

3. Si disegni l'energia di banda sul segmento $\overline{\Gamma A}$, dando in particolare il valore dell'energia a Γ e a A e stando attenti agli andamenti qualitativi a questi punti.

4. Idem come sopra ma sul segmento $\overline{\Gamma B}$.

5. Si calcolino gli elementi del tensore di massa (inverso) ad un generico $\mathbf{k}$.

6. Quanto valgono gli elementi fuori diagonale ai punti Γ, A, B?

7. Si valutino gli elementi diagonali del tensore di massa ai punti in questione e si ordinino le masse efficaci ai suddetti tre punti in ordine di massa crescente.

15 Masse efficaci in un sistema unidimensionale.

Si consideri un cristallo unidimensionale con parametro reticolare a, e sia l'energia degli elettroni data da

$$E(k) = \frac{\hbar^2}{ma^2}\left[7/8 - \cos(ka) + 1/8\cos(2ka)\right].$$

1. Si tracci un grafico della banda.

2. Si determinino le masse efficaci al minimo ed al massimo della banda.

3. Si determini una seconda massa efficace m_i applicando una forza F e scrivendo

$$\frac{dv}{dt} = \frac{1}{m_i}F.$$

Si tracci un grafico di $m_i(k)$.

4. Si determini una terza massa efficace m_v tale che

$$v = \frac{1}{m_v}\hbar k$$

e si tracci un grafico di $m_v(k)$.

5. Si scriva la densità degli stati g in funzione di k. Si scriva una ulteriore massa efficace m_d tale che g assuma la forma della densità degli stati di un gas unidimensionale di elettroni liberi: $g = 2m_d/(\pi\hbar^2 k)$.

6. In che relazione sono fra di loro le masse m_i, m_v ed m_d?

16 * Orbite di elettroni di Bloch in campo magnetico

Si consideri un solido con un reticolo cubico semplice e con una banda di energia che in approssimazione di legame stretto con un singolo orbitale s ha la dispersione $\epsilon(\mathbf{q}) = -2\gamma[cos(q_x a) + cos(q_y a) + cos(q_z a)]$, dove a è il parametro reticolare e si è opportunamente scelto lo zero di energia. Si consideri il solido immerso in un campo magnetico statico $\mathbf{H} = H\hat{z}$.

1. Si scriva la velocità nel piano (x,y) di un elettrone in uno stato della banda considerata

2. Si scriva la condizione che devono soddisfare le orbite nello spazio $\mathbf{q}$, per $q_z = 0$ ed energia $\epsilon(\mathbf{q}) = E$.

3. Qual è l'orbita per $E = -2\gamma[3 - \delta^2/2]$ e $\delta \ll 1$?

4. Qual è il periodo dell'orbita nel caso in questione se si pone $\gamma a^2 = \hbar^2/2m^*$?

5. Si consideri ora il caso $E = -2\gamma$. Limitandosi al primo quadrante in (q_x, q_y), in ragione della simmetria del problema, si scriva la relazione che lega q_x e q_y sul *quarto* di orbita in questione e si disegni tale quarto di orbita, nella prima zona di Brillouin.

6. Si indichi chiaramente in che direzione viene percorsa l'orbita.

7. Si riscrivano le componenti nel piano (x,y) della velocità di cui al punto (1) in termini della sola q_x, utilizzando la risposta al punto precedente.

8. Si utilizzi la risposta al punto 7 per integrare l'equazione di evoluzione temporale per q_x sul quarto di orbita in questione, per ottenere $T/4$, dove T è il periodo dell'orbita. [*Nota* $\int dx/sin(x) = ln(tan(x/2))$]. Quanto vale T?

Variante: si scelga lo zero di energia in modo che il minimo della banda considerata valga -12γ.

1. Si scriva la velocità nel piano (y,z) di un elettrone in uno stato della banda considerata.

2. Si scriva la condizione che devono soddisfare le orbite nello spazio $\mathbf{q}$, per $q_z = 0$ ed energia $\epsilon(\mathbf{q}) = E$.

3. Qual è l'orbita per $E = -4\gamma[3 - \delta^2/4]$ e $\delta \ll 1$?

4. Qual è il periodo dell'orbita in termini delle costanti introdotte finora?

5. Quanto deve valere γ, in eV, affinchè l'orbita abbia lo stesso periodo di quella di un elettrone libero, nel campo assegnato?

6. Si scriva ora la condizione soddisfatta dall'orbita per $q_z = 2\pi/a$ e $E = -4\gamma[-1 + \delta^2]$, con $\delta \ll 1$.

7. Qual'è il punto più vicino all'origine di questa seconda orbita?

8. Si è in grado di fare un disegno qualitativo dell'orbita sulla faccia della zona di Brillouin sulla quale l'orbita giace?

17 * Proprietà di un metallo anisotropo.

Si consideri un metallo, con un elettrone di valenza per cella, la cui banda di conduzione può essere approssimata con:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{k_x^2 + k_y^2}{m_t} + \frac{k_z^2}{m_l}\right).$$

1. Si calcoli il tensore delle masse efficaci $\mathbf{M}$.

2. Si calcoli la densità degli stati elettronici $g(\varepsilon)$.

3. Sapendo che la densità per cm^{-3} di elettroni di valenza è n, si calcoli l'energia di Fermi dalla normalizzazione della densità degli stati elettronici.

4. Sapendo che $n = 10^{22} cm^{-3}$ e $m_l = 2m_e = 4m_t$, si valuti (i) l'energia di Fermi in ^{o}K e (ii) la densità di stati al livello di Fermi in $cm^{-3}eV^{-1}$.

Si supponga ora che al solido in questione sia applicato un campo magnetico $\mathbf{H} = H(\sin\theta, 0, \cos\theta)$.

5. Si scrivano e si risolvano esplicitamente le equazioni semiclassiche del moto elettronico.

6. Si dia l'espressione della massa efficace ciclotronica m_c^*, ottenuta dal punto **5**.

Si ponga ora $\theta = 0$.

7. Si diano le orbite in spazio $\mathbf{k}$, per la scelta menzionata di θ, sfruttando la conservazione dell'energia (invece che le equazioni del moto) e verificando che il risultato ottenuto sia compatibile con quello trovato al punto **5**.

8. Si verifichi che il valore di m_c^* trovato al punto **6** coincide con $\frac{\hbar^2}{2\pi}\frac{\partial A}{\partial \varepsilon}$, dove A è l'area inclusa dalla traiettoria.

18 * Effetto Hall per un sistema con elettroni e buche.

Si consideri un conduttore con elettroni con densità n e buche con densità p in un campo elettrico esterno E_x e campo magnetico $\mathbf{H} = (0, 0, H)$, in geometria Hall. Buche ed elettroni hanno rispettivamente masse m_e e m_b e tempi di collisione τ_e e τ_b. Poniamo $b = (\tau_e/m_e)/(\tau_b/m_b)$.

1. Si scrivano alla stazionarietà le equazioni di evoluzione rispettivamente dell'impulso medio di elettroni e dell'impulso medio delle buche, componente per componente.

2. Essendo il circuito aperto nella direzione y, $j_y = j_y^{(e)} + j_y^{(b)} = 0$. Si imponga tale condizione per ottenere due equazioni che contengano solo $j_x^{(e)}$ e $j_x^{(b)}$.

3. Si ottenga la relazione che lega $j_x^{(e)}$ e $j_x^{(b)}$ allorchè $n = p$.

4. Si calcoli il coefficiente Hall $E_y/(j_x H)$ per $n = p$.

5. Quanto vale E_y allorchè le mobilità ($\mu = e\tau/m$) di elettroni e buche siano uguali e $n = p$?

19 Effetto De Haas-Van Alphen nel rubidio

Si consideri un cristallo di Rubidio di dimensioni lineari dell'ordine del cm, a basse temperature [vedi tabelle Cap 1 dell' AM], nell'approssimazione di elettroni liberi.

1. Si calcoli il periodo in $1/H$ delle oscillazioni di De Haas-van Alphen, esprimendo il campo magnetico in gauss.
2. Si calcoli a che variazione in H corrisponde il periodo in $1/H$, per un campo dell'ordine di $10^4 g$.
3. Si calcoli il raggio delle orbite in spazio reale corrispondenti alle orbite estremali in spazio k.
4. Si dica per quali valori del campo H_1 le orbite estremali in spazio reale diventano dell'ordine delle dimensioni del campione.
5. In che rapporto è H_1 con il campo naturale terrestre?

20 * Tensore di conducibilità in un metallo

Si consideri l'espressione del tensore di conducibilità in approssimazione di tempo di rilassamento

$$\sigma_{ij} = e^2 \int \frac{d\mathbf{k}}{4\pi^3} \tau(\epsilon(\mathbf{k})) \left[\frac{-\partial g^o}{\partial \epsilon(\mathbf{k})}\right] v_i(\mathbf{k}) v_j(\mathbf{k})$$

per un metallo. Si assuma che ci sia una sola banda attraversata dalla superficie di Fermi.

1. Si assuma che $T_F \gg T$ (e che l'energia di Fermi sia ben lontana dagli estremi della banda). Si porti il τ fuori dall'integrale dicendo a che energia va valutato e perché.

2. Sfruttando il fatto che la velocità è un gradiente dell'energia si riscriva l'Eq. 1 facendo apparire il gradiente rispetto a $\mathbf{k}$ di $g^o(\epsilon(\mathbf{k}))$.

3. Si integri per parti l'espressione ottenuta al punto precedente, considerando che tutte le funzioni che appaiono sotto l'integrale sono periodiche e che l'integrale è esteso all'intera zona di Brillouin.

4. Si riarrangi l'espressione precedente in modo da far apparire l'inverso del tensore di massa $\left[\frac{1}{m(\mathbf{k})}\right]_{ij}$.

5. Nell'ipotesi che il tensore di massa sia $m_{ij}(\mathbf{k}) = m_{ij}$, indipendente da $\mathbf{k}$, e che quindi si possa portare fuori dall'integrale, si calcoli esplicitamente quello che rimane dell'integrale e si dia un'espressione di σ_{ij} in termini di n (la densità di portatori nella banda), τ, e il tensore di massa.

6. Se il tensore di massa è diagonale $m_{ij} = \delta_{ij} m^*$ qual è la forma del tensore di conducibilità?

7. Utilizzando l'espressione ottenuta al punto 4 sopra ed il fatto che il tensore di massa è il gradiente di una funzione periodica si riscriva la conducibilità in termini delle buche piuttosto che degli elettroni.

21 Funzione di risposta densità-densità in elettroni non interagenti

Si consideri un insieme di N elettroni non-interagenti in un volume $V = L^d$ in d-dimensioni, con condizioni periodiche al contorno (PBC). Applicando un potentiale esterno $U(\mathbf{r}) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} U(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ la densità elettronica cambia da $n(\mathbf{r}) = n_0 \equiv \frac{N}{V}$ a $n(\mathbf{r}) = n_0 + n_1(\mathbf{r}) + \cdots$, con n_1 lineare in U.

1. Si calcoli la funzione di risposta lineare densità-densità $\chi(q)$, che lega la trasformata di Fourier del cambiamento di densita al primo ordine $n_1(\mathbf{r})$ alle componenti di Fourier di U,
$$n_1(\mathbf{q}) = \chi(q) U(\mathbf{q}).$$
A questo scopo si proceda come di seguito suggerito:
   (a) Si usi la teoria delle perturbazioni (statiche) per calcolare il cambiamento al primo ordine $\psi^1_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ degli orbitali di elettroni non-interagenti
   $$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi^0_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \psi^1_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + \cdots.$$
   Per definizione $\psi^1_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ è lineare nel potenziale U.
   (b) Si calcoli la variazione di densità $n_1(\mathbf{r})$ indotta dal potentiale U utilizzando
   $$n(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})^2 = n_0 + n_1(\mathbf{r}) + \cdots,$$
   con $f_{\mathbf{k}}$ il numeo di occupazione dell'orbitale $\mathbf{k}$.
   (c) Si calcoli la trasformata di Fourier di $n_1(\mathbf{r})$, ottenuta al punto precedente e da questa si ottenga
   $$\begin{aligned} \chi(q) &= V^{-1} \sum_{\mathbf{k}} f_{\mathbf{k}} \left(\frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}} + \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}}\right) \\ &= V^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \frac{f_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2} - f_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}}{\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}/2} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}/2}}. \end{aligned} \tag{2}$$
   (d) In tutte le manipolazioni algebriche dei punti precedenti si tenga conto che $\psi^0_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$. $\epsilon_{\mathbf{k}}$ denota l'energia dell'orbitale $\psi^0_{\mathbf{k}}$.

2. Ci si specializzi al caso $d = 2$ e si calcoli esplicitamente la $\chi(q)$ per elettroni spolarizzati ($f_{\mathbf{k}} = 2$ per $k \leq k_F$) [funzione di Stern] procedendo come segue:
   (a) Si usi la relazione 2 e si riscriva la somma sui $\mathbf{k}$ discreti compatibili con le PBC come integrale in coordinate polari.
   (b) Si valuti prima l'integrale angolare.
   (c) Si valuti poi l'integrale radiale [ovvero integrale in k].

(d) Si dovrebbe ottenere:

$$\begin{aligned}\chi(q) &= -\frac{m}{\pi\hbar^2}, \qquad q < 2q_F \\ \chi(q) &= -\frac{m}{\pi\hbar^2}[1 - \sqrt{1 - 4q_F^2/q^2}], \quad q > 2q_F\end{aligned}$$

Nota: bisogna saper fare gli integrali $\int dt/(1+t^2)$ e $\int dt/(1-t^2)$.

22 * Instabilità di Peierls.

Si consideri un gas di elettroni non interagenti in una dimensione. La definizione di funzione di risposta statica (densità–densità)in trasformata di Fourier è

$$\chi_0(q) = \frac{2}{L}\sum_k \left[\frac{f(k-q/2)-f(k+q/2)}{\varepsilon(k-q/2)-\varepsilon(k+q/2)}\right],$$

con $\varepsilon(k)$ il livello di energia di elettroni non interagenti, e $f(k) = \theta(k_F - |k|)$ la funzione di Fermi a $T = 0$.

1. Si calcoli $\chi_0(q)$ a partire dalla formula data, fornendo tutti i passaggi rilevanti.
2. Si faccia un disegno semiquantitativo di $\chi_0(q)$ come funzione di $Q = q/k_F$, per $Q \geq 0$. Si commenti sulla forma del grafico per $Q \leq 0$, senza disegnarlo.
3. La risposta in densità ad un campo di energia esterno V è data da $\rho(q) = \chi_0(q)V(q)$. Cosa ci si aspetta che accada se si applica un campo comunque piccolo con $V(2k_F) \neq 0$? Quale sarà la periodicità del sistema modulato? (Si ricorda che in una dimensione $k_F = \pi n_0/2$, con $n_0 = N/L$.)
4. L'energia cinetica per elettrone di un gas di elettroni omogeneo in una dimensione è $t(n_0) = Cn_0^2$, con $C = (\hbar^2\pi^2)/(24m)$. Si scriva $E^{LDA}[n]$, il funzionale energia totale in approssimazione di densità locale (LDA) per un sistema inomogeneo.
5. Utilizzando la seguente definizione alternativa per la funzione di risposta di un fluido omogeneo unidimensionale:

   $$\chi_0^{-1}(x,y) = -\left[\frac{\delta^2 E[n]}{\delta n(x)\delta n(y)}\right]_{n(x)=n_0},$$

   dove χ_0^{-1} è tale che

   $$\int dz\; \chi_0(x,z)\chi_0^{-1}(z,y) = \delta(x,y),$$

   si calcoli la funzione di risposta in LDA nello spazio dei vettori d'onda.
6. Si confronti il risultato del punto precedente con quello del primo punto, sul disegno di cui al punto 2, e si dica in che limite i due risultati coincidono e perché.

Nota: Si ricordi che in un sistema invariante per traslazione $\chi_0(x,y) = \chi_0(x-y)$.

23 * Modello per l'energia coesiva in un metallo

Si consideri l'idrogeno metallico, come un gas di elettroni nel quale sia immerso il reticolo degli ioni considerati puntiformi. L'energia coesiva per *atomo* E_a sarà data dall'energia per elettrone E_e più l'energia per ione E_i. Nel seguito si esprimano le lunghezze in unità di a_0, il raggio di Bohr, e le energie in unità di Rydberg ($1Ry = e^2/(2a_0) = \hbar^2/(2m_e a_0^2)$). Si ponga in particolare $V/N_e = 4\pi r_s^3 a_0^2/3$ per N_e elettroni in un volume V.

Si consideri E_e come data dall somma dell'energia cinetica K_e per particella di un gas di elettroni più l'energia di scambio (Hartree-Fock) per particella V_x.

Supponendo che gli ioni *vedano* gli elettroni come una distribuzione omogenea di carica, si approssimi E_i come l'energia coulombiana dell'unità formata da uno ione puntiforme al centro di una sferetta di carica elettronica di raggio $r_s a_0$. E_i è quindi dato dalla somma di: (i) l'interazione E_{ie} dello ione con la di carica elettronica, più (ii) l'energia di autointerazione coulombiana E_{ee} della sferetta.

1. Si scriva K_e in Ry come funzione di r_s

2. Si scriva V_x in Ry come funzione di r_s.

3. Si calcoli E_{ie} e se ne dia l'espressione in Ry come funzione di r_s.

4. Si calcoli il campo elettrico generato dalla sferetta di carica elettronica per (i) $r < r_s$ e (ii) $r > r_s$

5. Si calcoli l'energia E_{field} immagazzinata dal campo elettrico prodotto dalla sferetta in tutto lo spazio.

6. Che relazione c'e' tra E_{field} e E_{ee}?

7. Si dia E_a in Ry come funzione di r_s.

8. Si calcoli il valore di r_s al quale $E_a(r_s)$ è minima.

9. Si dica se in questa descrizione il metallo è stabile rispetto allo stato di gas atomico.

24 * Solido quantistico.

Si consideri un sistema modello unidimensionale [moto ristretto ad una linea] di atomi di He^4.

1. Si supponga per il momento che ciascun degli atomi sia costretto in un segmento di lunghezza $a = 1/n$, dove n è la densità lineare di atomi [numero di atomi per unità di lunghezza]. Si risolva il problema del singolo atomo libero di muoversi sul segmento a con condizione $\psi(0) = \psi(a) = 0$ e sia dia l'energia (cinetica) dello stato fondamentale $t(a)$.

2. Supponendo di avere una catena lineare finita di N atomi, qual è la forza (pressione) che bisogna applicare agli estremi della catena per evitare che questa si espanda?

3. Si considerino ora gli atomi interagenti con un potenziale di van der Waals: si scriva l'energia potenziale per atomo $u(a)$ della catena infinita sapendo che $\sum_{n=1}^{\infty} n^{-6} = 1.02$ e $\sum_{n=1}^{infty} n^{-12} = 1.00$ e considerando gli atomi equidistanziati.

4. Si consideri l'energia totale per atomo

$$e(a) = t(a) + u(a) = A\left(\frac{\sigma}{a}\right)^2 + B\left(\frac{\sigma}{a}\right)^{12} - C\left(\frac{\sigma}{a}\right)^6 .$$

Si valutino le costanti A, B, C, sapendo che i parametri di van der Waals per l'He^4 sono $\varepsilon = 10.2^o K$ e $\sigma = 2.56 \mathring{A}$.

5. Si valutino gli estremi della funzione $e(a)$ come funzione di a nei due casi semplificati: (i) $A = 0$ e B, C come sopra; (ii) $B = 0$ ed A, C come sopra. Si dica per ciascuno se si tratta di minimo o massimo.

6. La soluzione completa di $de(a)/da = 0$ con $d^2e(a)/da^2 > 0$ da $a^* \simeq 1.14\sigma$. Si valuti la forza di cui al punto 2) in dyne, al parametro a di equilibrio.

7. Si valuti il *modulo di bulk* $\mathcal{B}$ del solido unidimensionale all'equilibrio, in dyne.

8. Che pressione bisogna applicare al solido per variare il parametro reticolare a del 2% rispetto al suo valore all'equilibrio? [Si usi la risposta al punto precedente.]

25 * Proprietà di una catena ionica

Si consideri una catena lineare di ioni di valenza ± 1 disposti a segni alterni ed equidistanti. Oltre all'interazione Coulombiana tra ioni puntiformi $[\pm\phi(|x|) = \pm e^2/|x|]$ è presente una repulsione a corto raggio che agisce solo tra primi vicini ed è della forma $v(|x|) = e^2 b \ln 2/x^2$, con b una lunghezza caratteristica del problema.

1. Si scriva l'energia (potenziale) totale U della catena in termini di ϕ e v.

2. Si scriva l'energia per coppia ionica u_p in termini di ϕ e v.

3. Si scriva il contributo Coulombiano u_c ad u_p esplicitando la forma di $\phi(|x|)$: si sommi la serie di Madelung risultante sfruttando il fatto che $\sum_{m=1}^{\infty} 1/[(2m(2m-1)] = \ln 2$.

4. Utilizzando il risultato del punto precedente nell'espressione di u_p si calcoli la distanza a^* tra primi vicini all'equilibrio in termini di b.

5. Si dia l'espressione di $u_p(a^*)$ in termini di e e b, effettuando tutte le semplificazioni possibili ma nessuna valutazione numerica.

6. Si dia l'espressione del "modulo di bulk" $B(a^*) = L d^2E/dL^2$, dove L è la lunghezza della catena. Di nuovo si esprima il risultato in termini di e e b, effettuando tutte le semplificazioni possibili ma nessuna valutazione numerica.

7. Utilizzando i risultati dei due punti precedenti si valutino $u_p(a^*)$ e $B(a^*)$, rispettivamente in eV ed eV/Å, quando $b = 2a_B$.

26 Catena unidimensionale di atomi di gas raro

Si consideri una catena lineare di atomi di Kripton e si assuma un'interazione di coppia della forma di Lennard-Jones $\phi(|x|) = 4\epsilon[(\sigma/x)^{12} - (\sigma/x)^6]$.

1. Si scriva l'energia potenziale per particella $u(a)$ quando le particelle siano disposte in modo regolare spaziate di a, cioè quando $x_n = na$. Si calcoli: (i) la distanza a_0 d'equilibrio in termini di σ e (ii) l'energia coesiva in termini di ϵ.

2. Si calcoli la dispersione dei fononi [cioe $\omega(q)$ come funzione di q], nell'ipotesi che le interazioni oltre i primi vicini possano essere trascurate. Si esprima esplicitamente la legge di dispersione in termini di ϵ, σ, M, dove M è la massa dell'atomo di gas raro.

3. Si consideri la situazione nella quale a $t = 0$ uno degli atomi sia spostato dalla posizione di equilibrio della quantità l con $l \ll a_0$, mentre tutti gli altri sono in posizione d'equilibrio. Tutti gli atomi hanno velocità zero a $t = 0$. In simboli, se $u(n,t)$ indica al tempo t lo spostamento dell'atomo n-esimo dalla posizione d'equilibrio na_0, stiamo considerando la situazione

$$\begin{aligned} u(n,0) &= l\delta_{n,0}, \\ \dot{u}(n,0) &= 0, \forall n. \end{aligned}$$

   A. Si determini l'evoluzione temporale della catena per $t > 0$.

   B. Si calcoli a quale tempo $t_1 > 0$ [in secondi] l'atomo 0-esimo ripassa dalla posizione d'equilibrio [$u(0,t_1) = 0$].

   C. Si calcoli la velocità [in cm/sec] con la quale l'atomo 0-esimo ripassa dalla posizione d'equilibrio per $t = t_1$.

Suggerimenti:

- I parametri del potenziale di Lennard-Jones per i gas rari si possono trovare sull' Ashcroft-Mermin [AS].

- Valori numerici delle funzioni zeta di Riemann [$\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-s}$] si possono trovare, ad esempio, sul libro [HMF]:*Handbook of Mathematical Functions*, Edited by M. Abramowitz and I. A. Stegun, (Dover, New York, 1970 o altra data).

- Si ricordi che i fononi sono i modi normali di oscillazione della catena, in approssimazione armonica. Quindi qualsiasi spostamento degli atomi dalla posizione d'equilibrio [purchè sufficientemente piccolo da poter essere considerato armonico, può essere analizzato in termini di fononi]. Bisogna quindi trovare qual è la combinazione lineare di oscillazioni normali che soddisfa le condizioni della (1).

- Si ricordi l'identità $\sum_q exp(iqna_0) = N\delta_{n,0}$ dove la somma su q è sulla prima zona di Brillouin e si considera una catena di N atomi con condizioni periodiche al contorno.

- Si rammenta la definizione di funzione di Bessel

$$J_n(z) = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi} dx\ cos(nx - zsinx).$$

Zeri ed altre proprietà delle funzioni di Bessel si possono trovare sul libro HMF citato sopra, o su vari altri libri specifici.

27 * Stabilità di cristalli monoatomici a $T > 0$

Si consideri un cristallo armonico con un atomo per cella in D dimensioni (evidentemente siamo interessati in particolare a $D = 1, 2, 3$.)

1. Si mostri che la densità di stati fononici a basse frequenze ($\omega_s(\mathbf{k}) = c_s(\hat{\mathbf{k}})k$ per $\omega < \omega_c$) ha l'andamento $g(\omega) = A\omega^{D-1}$.

[Per la precisione dovrebbe risultare $A = [D\Omega_D]/[(2\pi)^D c^D]$, con Ω_D *l'angolo solido* in D dimensioni e c una opportuna media su angoli e polarizzazioni di una funzione di $c_s(\hat{\mathbf{k}})$: quale?]

2. Si consideri ora, lo spostamento quadratico medio degli atomi dalla posizione di equilibrio, definito da

$$\overline{\mathbf{u}^2} = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{R}}\langle \mathbf{u}^2(\mathbf{R})\rangle,$$

con $\langle \ldots \rangle$ la media a data temperatura. Si esprima $\overline{\mathbf{u}^2}$ come una somma sulle frequenze dei modi normali.

[Si consiglia di utilizzare tra l'altro i seguenti fatti:
(i) $\mathbf{u}(\mathbf{R}) = (1/\sqrt{N})\sum_{\mathbf{k},s}\mathbf{u}_s(\mathbf{k})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}$, con $\mathbf{u}_s(\mathbf{k})$ le coordinate *normali* e $\mathbf{k} \in$ FBZ; (ii) $\mathbf{u}_s(\mathbf{k}) \propto \boldsymbol{\epsilon}_s(\mathbf{k})$, e $\boldsymbol{\epsilon}_s(\mathbf{k}) = \boldsymbol{\epsilon}_s(-\mathbf{k})$; (iii) il valor medio a data temperatura dell'energia potenziale di un oscillatore normale eguaglia evidentemente metà del valor medio dell'energia totale $\hbar\omega_s(\mathbf{k})(n_s(\mathbf{k}) + 1/2)$.]

3. Si riesprima $\overline{\mathbf{u}^2}$ come un integrale in frequenza, introducendo la densità di stati.

4. Si specializzi la formula precedente ad un sistema finito, semplicemente limitando l'integrale in frequenze a $\omega > \omega_t = 2\pi c/L$, dove nella frequenza di taglio ω_t vale $L = N^{1/D}/\rho^{1/D}$, con ρ la densità di atomi e a meno di costanti adimensionali di ordine 1.

5. Si stimi per $T > 0$ il contributo dominante a $\overline{\mathbf{u}^2}$ dovuto ai modi a bassa frequenza ($\omega_t < \omega < \omega_c$), nel regime $\beta\hbar\omega \ll 1$.

6. Cosa succede a $\overline{\mathbf{u}^2}$ per $D = 2$ quando $N \to \infty$?

7. Idem come sopra per $D = 1$.

28 Catene unidimensionali con interazioni a lungo raggio: modi di vibrazione e stabilità

Si consideri un sistema di particelle costrette a muoversi in una sola direzione [ad esempio l'asse x] interagenti con un potenziale di coppia $\phi(|x_n - x_m|; |n-m|)$.

1. Si scriva l'energia potenziale per particella $u(a)$ quando le particelle siano disposte in modo regolare spaziate di a, cioè quando $x_n = na$.

2. Si considerino piccole oscillazioni delle particelle intorno alla disposizione regolare del punto 1, cioè $x_n = na + \delta_n$ con $|\delta_n| \ll a$. Si scriva allora l'energia potenziale totale in potenze dei δ_n, fino al secondo ordine incluso. Il termine di ordine zero, ovviamente coincide con $Nu(a)$, se si considera un pezzo di catena con N particelle [e condizioni al contorno di Born - von Karman].

   2.a) Si mostri che il termine del primo ordine è sempre assente, così che la configurazione $x_n = na$ è sempre un estremo dell'energia per ogni a.

   2.b) Si scriva la matrice dinamica $D(|n-m|)$, che determina il pezzo del secondo ordine, in termini dei $\phi''(|n|a; |n|)$, dove il doppio apice indica la derivata seconda di ϕ rispetto al suo primo argomento.

   2.c) Usando il risultato del punto 2.b) si scriva la relazione di dispersione per le piccole oscillazioni [vibrazioni armoniche] in termini dei $\phi''(|n|a; |n|)$, assumendo che la massa delle particelle sia M; cioè si scriva esplicitamente $\omega^2(k)$.

3. Si consideri un potenziale di coppia del tipo

$$\phi(|x|; |n|) = \frac{C}{|x|^\alpha} + \frac{e^2}{|x|}(-1)^n,$$

   che comprende sia una repulsione [$C > 0$ e consideriamo per il momento $\alpha > 0$ per avere una repulsione che decresca con la distanza], sia interazioni di tipo Coulombiano.

   3.a) Si scriva la relazione di dispersione in questo caso particolare, usando la notazione: $G = \alpha(\alpha+1)C/a^{\alpha+2}$, con G una costante di forza, $\sigma = e^2/(Ga^3)$ un parametro adimensionale che misura l'importanza relativa della interazione Coulombiana rispetto a quella repulsiva, e $\omega_0^2 = 4G/M$. Si dovrebbe ottenere

$$\frac{\omega^2(k)}{\omega_0^2} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{\alpha+2}} sin^2(\frac{kna}{2}) + \sigma \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n^3}[1 - cos(kna)]$$

   .

   3.b) Si consideri la relazione ottenuta in 3.a) al bordo zona, cioè per $k = \pi/a$. A questo scopo si introduca la funzione di Riemann $\zeta(s) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-s}$. Si tenga anche conto della identità $\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n n^{-s} = -\zeta(s)(1-2^{1-s})$, che può essere agevolmente dimostrata separando la somma in termini pari e dispari e sommando e sottraendo una volta i termini pari.

3.c) Usando il risultato di 3.b) si mostri che il quadrato della frequenza diventa negativo per $\sigma \geq \sigma_c^\pi = 4\zeta(\alpha+2)/(7\zeta(3))$. Questo segnala un'instabilità del cristallo unidimensionale. Ovvero la configurazione assunta come d'equilibrio è solo un estremo e non corrisponde ad un minimo.

3.d) Si consideri la dispersione a piccoli k, cioè per $k \to 0$. Assumendo che $\alpha > 1$, si calcoli esplicitamente la velocità del suono. Si mostri che questa diventa immaginaria per $\sigma \geq \sigma_c^0 = \zeta(\alpha)/(2ln2)$. Con conclusioni simili a quelle del punto precedente.

4. Chiaramente per $\sigma \geq \sigma_c^\pi$, ci sono frequenze immaginarie vicino al bordo zona e per $\sigma \geq \sigma_c^0$ anche al centro zona. Questo tipo di instabilità, peraltro, riguarda deformazioni del cristallo a *densità* fisse, cioè a fissato a.

4.a) Si provi a studiare la stabilità rispetto alle variazioni di a, considerando l'energia d'equilibrio $u(a)$ del punto 1. Si mostri che la richiesta che $u(a)$ sia minima fornisce un parametro d'equilibrio $a_0 = [\alpha C\zeta(\alpha)/(e^2 ln2)]^{1/(\alpha-1)}$, con la condizione addizionale che $\alpha > 1$. [Confronta con l'assunzione del punto 3.d)].

4.b) Si assuma di considerare le piccole oscillazioni intorno alle posizioni d'equilibrio ottenute in (4.a). Allora ad a_0 corrisponderà un G_0 e quindi un $\sigma_0 = \zeta(\alpha)/((\alpha+1)\ln 2)$. Si mostri che in questo caso la velocità del suono rimane sempre reale. Con riferimento al punto 3.c, si provi a discutere cosa succede al bordo zona per valori interi di α, con $\alpha > 1$. [Se si vuole attaccare l'ultimo punto bisogna valutare numericamente $\zeta(n)$,che si può trovare tabulata nel libro *Handbook of Mathematical Functions*, edit. M. Abramowitz and I. Stegun, (Dover, NY, 1972).]

29 * Catena unidimensionale di gas raro e sua stabilità.

Si consideri una catena lineare di atomi di Xenon. Si assuma un'interazione di coppia della forma di Lennard-Jones $\phi(|x|) = 4\epsilon[(\sigma/x)^{12} - (\sigma/x)^6]$. Si assuma che gli atomi siano equispaziati all'equilibrio (con spaziatura a: $x_n^0 = na$) e che possano compiere piccole oscillazioni intorno alle posizioni d'equilibrio ($x_n = x_n^0 + u_n = na + u_n$, $u_n \ll a$).

1. Si calcoli l'energia per particella $e(a)$ per data spaziatura, come funzione di ϵ e σ. [*Nota:* approssimando ciascuna delle somme $\zeta(p) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-p}$, $p = 6, 12$, con i primi 3 termini si trova $\zeta(6) = 1.02$ e $\zeta(12) = 1.00$].

2. Si calcoli la spaziatura d'equilibrio come funzione di σ e si valuti l'energia coesiva per particella per il sistema in esame (Xenon) in eV.

3. Si esprima la matrice dinamica $D(n-m)$ in termini del potenziale di coppia ϕ.

4. Si calcoli la branca di dispersione fononica $\omega(q)$ per la catena assumendo di trascurare le interazioni oltre i primi vicini.

5. Si valuti la frequenza a bordo zona $\omega(q = \pi/a)$ (in Hertz).

6. Lo spostamento quadratico medio di un atomo dalla posizione d'equilibrio, per una catena di lunghezza N può essere calcolato usando la formula

$$\langle u_n^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_q \frac{\hbar}{2M\omega_q}(1 + 2n(q)),$$

con $n(q)$ l'occupazione media del modo q–esimo, $n(q) = [\exp(\beta\hbar\omega_q) - 1]^{-1}$. Si calcoli $\langle u_n^2 \rangle$ a $T = 0$, come funzione di N. [Per catena grande ma finita si approssimi la somma in questione con un integrale, escludendo peraltro il modo a $q = 0$: $q_c \leq |q| \leq \pi/a$ con $q_c = 2\pi/(Na)$.] Cosa succede quando $N \longrightarrow \infty$? È sensato parlare di piccole oscillazioni per una catena *lunga*?

7. Per quale valore di N si ha $\sqrt{\langle u_n^2 \rangle} = a$, per lo Xenon? Quanto sarebbe lunga la catena, in metri?

Nota: $\int dx\ [\sin(x)]^{-1} = \log(\tan(x/2))$.

30 * Anomalia di Kohn.

Si consideri una catena lineare di atomi identici con spaziatura d'equilibrio a. Sia $u(n)$ la deviazione dalla posizione d'equilibrio (na) dell n–esimo atomo. Ci sono molle agenti tra tutti gli atomi, così che la forza sull'atomo n–esimo è data da $F(n) = \sum_m C_m[u(n+m) - u(na)]$.

1. Si scriva l'equazione del moto del generico atomo.

2. Si mostri che soluzioni del tipo $e^{i(qna-\omega_q t)}$ soddisfano le equazioni del moto, ottenendo un'espressione per ω_q^2.

3. Si assuma che

$$C_m = C\frac{sin(mk_0a)}{ma}$$

e si calcoli $d\omega_q^2/dq$.

4. Quanto vale $d\omega_q^2/dq$ a $q = k_0$?

5. Si faccia un disegno qualitativo di ω_q in funzione di q intorno a $q = k_0$.

31 * Catena unidimensionale con interazioni a più vicini.

Si considerino i modi di oscillazioni di una catena lineare di atomi con massa M, nel caso nel quale ci siano interazioni oltre i primi vicini.

1. Si scriva l'energia della catena denotando con $u(na)$ lo spostamento dalla posizione di equilibrio na dell'atomo $n-$esimo e con C_m la costante di forza di ordine m, $m \geq 1$.
Si ricorda che l'energia di interazione tra tra l'atomo $n-$esimo e il suo $m-$esimo vicino è $(1/2)C_m\left[u(na) - u[(n+m)a]\right]^2$.

2. Si scriva la relazione di dispersione $\omega(k)$.

3. Si consideri $C_1 = C$, con $C_m = 0$ per $m > 1$, e si disegni $\tilde{\omega}(q) \equiv \omega\sqrt{M/C}/2$, dove $q \equiv ka/2$, per $0 \leq q \leq \pi/2$.

4. Si consideri ora $C_1 = C$, $C_2 = C/4$ con $C_m = 0$ per $m > 2$ e si disegni di nuovo $\tilde{\omega}(q)$. [È sufficiente concentrarsi sulle differenze dal caso di cui al punto 3 per piccoli q e per $q = \pi/2$.]

5. Si consideri ora $C_1 = C$, $C_2 = C/4$, $C_3 = -C/5$ con $C_m = 0$ per $m > 3$, e si disegni di nuovo $\tilde{\omega}(q)$. [Si consiglia di considerare esplicitamente il comportamento a piccoli q e i punti $q = \pi/6, \pi/3, \pi/2$.]

32 * Eccitazioni localizzate in una catena unidimensionale

Si considerino i modi normali (fononi) di una catena lineare infinita di atomi con spaziatura di equilibrio a, in approssimazione armonica, con *molle* solo tra primi vicini.

1. Si scrivano esplicitamente le soluzioni indipendenti delle equazioni del moto $u_{\pm}(q, n, t)$ in termini di q, n, t e $\omega(q)$, come esponenziali complessi descriventi delle onde. Per convenienza si pensi ad una catena di lunghezza $L = Na$, con condizioni al contorno periodico. Per ogni $-\pi/a \leq q < \pi/a$ il $\pm$ si riferisce rispettivamente al modo con $\pm\omega(q)$.

2. Si consideri una sovrapposizione lineare di tali modi con ampiezza $a_+(q) = a_-(q) = a(q) = C\, exp(-l^2 q^2)$. In particolare, si scelga (i) $C = (2\sqrt{\pi}\, l\, a)/(10L)$ e si assuma (ii) $l \gg a/\pi$ in modo che la sovrapposizione coinvolga solo modi acustici. Sfruttando le semplificazioni che seguono dalla condizione (ii) si calcoli esplicitamente

$$u(n, t) = \sum_{\sigma=\pm, q} a_\sigma(q) u_\sigma(q, n, t).$$

3. Quanto è la velocità di ciascun atomo a $t = 0$ per questa eccitazione?

4. Quali atomi sono spostati dalla posizione di equilibrio a $t = 0$ e di quanto?

5. Quali atomi sono spostati dall'equilibrio a $t = na/c$ e di quanto?

6. Si descriva in modo qualitativo l'eccitazione a tempi $t > 0$.

33 * Calore specifico di una catena lineare

Si consideri una catena lineare di atomi di Zinco connessi da molle di costante K ignota. Nella configurazione classica di equilibrio gli atomi sono equidistanziati con passo reticolare $a = 2.88\mathring{A}$.

1. Si esprima la velocità del suono in funzione di K e di M [la massa dell'atomo di Zinco].

2. Sapendo che $c = 100\ m/s$ si valuti K, in cgs.

3. Si ottenga il calore specifico "reticolare" c_V^L a basse temperature, sfruttando semplificazioni simili a quelle utilizzate nel caso tridimensionale. Come dipende c_V^L dalla temperatura ad ordine dominante?

4. Si valuti il calore specifico a $T = 1^o$K, per unità di lunghezza, in cgs.

5. Supponendo che la catena sia metallica e che gli atomi di Zinco abbiano la stessa valenza del metallo tridimnsionale si valuti il calore specifico elettronico c_V^e (per unità di lunghezza e nel modello di Sommerfeld) a ordine dominante in T. (N.B.: È possibile usare la formula valida per elettroni in tre dimensioni purchè si usi la densità di stati elettronica unidimensionale $g(E) = n/(2\sqrt{\epsilon_F E})$ con n il numero di elettroni per unità di lunghezza).

6. Che precisione sperimentale è richiesta per poter controllare la predizione di cui sopra per il calore specifico totale $c_V = c_V^L + c_V^e$ a basse temperature, ovvero per discriminare c_V^e su c_V?

Nota: $\int_0^\infty dx\ x/(e^x - 1) = \pi^2/6$.

34 * Cristallo armonico quadrato

Si consideri un cristallo quadrato con parametro reticolare a. Ciascun atomo di massa M è connesso ai primi vicini da molle di costante G_x nella direzione x e G_y nella direzione y.

1. Si scriva l'energia potenziale U del cristallo quando gli atomi compiano piccole escursioni dai siti del reticolo. [Le molle hanno lunghezze di riposo a e il moto è strettamente bidimensionale.]

2. Si scriva l'equazione del moto per il generico atomo.

3. Si risolva l'equazione ottenuta in (2) utilizzando una soluzione ad onda piana e si caratterizzino i due modi ottenuti

4. Qui e nel seguito di prenda $G_y = 4G_x$. Si disegnino i due modi: (i) lungo il cammino (in unità di π/a) (0,0) $\rightarrow$ (1,0) $\rightarrow$ (1,1) $\rightarrow$ (0,1) $\rightarrow$ (0,0) e (ii) lungo il cammino (sempre in unità di π/a) (0,0) $\rightarrow$ (1,1). [I cammini sono da intendersi come rette congiungenti i punti dati.]

5. Si dia la dispersione dei due modi quando $\sqrt{q_x^2 + q_y^2}\; a \ll 1$.

6. Si ricavi il calore specifico fononico a basse temperature, in modo simile a quanto si fa in 3 dimensioni e sapendo che $\int_0^\infty dx\; x/(e^x - 1) = \pi^2/6$.

7. Si scriva la matrice dinamica come matrice rispetto agli indici cartesiani (x,y) e di reticolo (m,n). [*Nota:* le traslazioni di Bravais sono $\mathbf{R} = (m, n)a$].

35 * Calore specifico a basse temperature

1. Si calcoli la densità di stati fononici corrispondente all'approssimazione di Debye (3 modi acustici con dispersione $\omega = ck$ per $k \leq k_D$).

2. Si scriva la formula per il calore specifico

$$\frac{\partial}{\partial T} \sum_s \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \frac{\hbar\omega_s(\mathbf{k})}{e^{\hbar\omega_s(\mathbf{k})/K_B T} - 1}$$

come integrale in frequenza introducendo la densità di stati fononici.

3. Si mostri, utilizzando le risposte ai due punti precedenti, che l'approssimazione di Debye da il corretto calore specifico a basse temperature se la velocità del suono c presente al punto 1) soddisfa:

$$\frac{1}{c^3} = \frac{1}{3} \sum_s \int \frac{d\Omega}{4\pi} \frac{1}{c_s(\hat{\mathbf{k}})^3}.$$

4. Utilizzando la definizione di densità di stati e l'esistenza di modi acustici si mostri che per un cristallo in D dimensioni la densità di stati a basse frequenze ha l'andamento $g(\omega) \propto \omega^{D-1}$.

5. Utilizzando il risultato del punto precedente si mostri che il calore specifico a basse temperature varia come T^D in D dimensioni.

6. Si calcoli l'andamento a bassa frequenza di $g(\omega)$ in D dimensioni nel caso in cui i modi a bassa frequenza vadano a 0 con k come k^ν.

7. Si ottenga l'andamento a basse temperature del calore specifico in D dimensioni qualora i modi a bassa frequenza vadano a 0 con k come k^ν.

36 * Masse efficaci in un semiconduttore

L'analisi sperimentale di un semiconduttore mostra che la densità di stati in energia di una particolar banda ha, vicino all'estremo $\mathbf{k}^*$ della banda stessa, l'atteso andamento a radice $g(\epsilon) = C\sqrt{\epsilon}$, ove $\epsilon = |E - E^*|$ e $C = 6.97 \times 10^{20}\, cm^{-3}/eV^{3/2}$. Nel seguito supporremo che il sistema di laboratorio coincida con il sistema di assi principali ($\hat{x}_1$, $\hat{x}_2$, $\hat{x}_3$) del tensore di massa a $\mathbf{k}^*$.

1. Quanto vale il determinante del tensore di massa in unità di m_e^3?

2. Con esperimenti in campo magnetico si trova che ruotando $\mathbf{H}$ intorno all'asse $\hat{x}_3$ la massa efficace di ciclotrone non cambia. Quanti sono al più gli autovalori distinti del tensore di massa? Si argomenti in dettaglio la risposta.

3. Sapendo che per campo magnetico ortogonale all'asse $\hat{x}_3$la massa di ciclotrone vale $m^*(\mathbf{H}) = 0.253 m_e$ si calcolino gli autovalori del tensore massa (in unità di m_e).

4. Si ha un'idea di quale potrebbe essere il semiconduttore in questione?

5. Qual è la forma delle orbite per un campo magnetico lungo $\hat{x}_3$?

6. E per un campo magnetico lungo $\hat{x}_1$?

7. Quale sarà la frequenza di ciclotrone misurata (in cm^{-1}) per un campo magnetico con $\hat{H} = (1/\sqrt{2}, 0, 1/\sqrt{2})$?

37 * Accettori nel silicio.

Si consideri il silicio (Si) drogato con alluminio (Al) a temperature prossime allo zero assoluto. Si considerino alla sommità della banda di valenza due massimi sferici degeneri, ma con masse efficaci diverse. Supponiamo che esperimenti di assorbimento ottico mostrino prima un picco di assorbimento isolato a $\hbar\omega_{12}$ e poi, al crescere dell'energia dei fotoni incidenti un continuo di assorbimento per $\omega > \omega_2 > \omega_{12}$.

Nota: In questo esercizio si richiedono valutazioni numeriche per tutte le risposte.

1. Sapendo che $\hbar\omega_2 = 0.0463eV$ si ricavi la costante dielettrica ϵ del Si.

2. Si calcoli il raggio di Bohr efficace in Å del livello accettore responsable della transizione con energia $\hbar\omega_2$.

3. Si calcoli in eV l'energia $\hbar\omega_1$ dell'altro livello accettore.

4. Si calcoli in Å il raggio di Bohr dell'altro del livello accettore.

5. Si calcoli in eV $\hbar\omega_{12}$.

6. Quanto vale approssimativamente la densità massima di accettori n_c in cm^{-3} perchè l'approssimazione idrogenoide rimanga valida?

7. Se si considera che al raggiungimento della densità n_c le buche dei donori si sleghino e formino un gas di elettroni, quanto vale il k_F di questo gas di elettroni?

38 * Impurezze bivalenti

Si consideri un semiconduttore con costante dielettrica $\epsilon = 12.5$ e massa efficace in conduzione $m = 0.067 m_e$, drogato con pochi donori bivalenti, che quindi possono essere considerati indipendenti. Si ricorda che l'energia di legame totale dell'atomo di He è $E = 5.81 Ry$.

1. Si dia l'espressione ed il valore (in eV) dell'energia di legame ε_1, rispetto alla banda di conduzione, per un singolo elettrone sul donore.
2. Si dia l'espressione ed il valore (in eV) dell'energia di legame ε_2 per l'aggiunta al donore di un secondo elettrone.
3. Si valuti il raggio di Bohr (in $\AA$) efficace dell'impurezza con un solo elettrone e si dica se l'approssimazione "idrogenoide" è ragionevole. Ci si aspetta che con due elettroni la situazione sia peggiore o migliore?
4. Si calcoli l'occupazione media di questi centri donori (indipendenti) facendo l'opportuna media. Quanto vale a $T = 0$?
5. Si determini la posizione del potenziale chimico per $T \to 0$, sapendo che ci sono solo i donori in questione.
6. Se N_d è la densità dei droganti donori e si aggiungono anche dei droganti accettori (monovalenti) con densità $N_a = N_d$, dove si posiziona il potenziale chimico per $T \to 0$?

39 * Conducibilità da impurezze

Si consideri il semiconduttore cristallino GaAs (arseniuro di gallio). Si tratta di un semiconduttore a gap diretta ($E_g \simeq 1.52\ eV$ a T ambiente: si trascuri la dipendenza di E_g da T). La banda di conduzione ha una massa efficace misurata di $m_c = 0.068 m_e$ e quella di valenza $m_v = 0.41 m_e$. La costante dielettrica misurata è $\epsilon = 14.6$.

Si assuma di drogare il semiconduttore con dei donori e si supponga di poter descrivere lo stato degli elettroni in eccesso così introdotti usando il modello *idrogenoide*.

1. Si calcoli l'energia di legame E_d (in eV) degli elettroni di eccesso rispetto al fondo della banda di conduzione.

2. Si calcoli il raggio di Bohr efficace a_B^* (in $\mathring{A}$) di tali elettroni, assumendo che ciascuno sia nel livello fondamentale *idrogenoide* centrato su un donore.

3. Il valore ottenuto per a_B^* è compatibile con il modello idrogenoide utilizzato?

4. Si assuma che quando la distanza media tra i centri donori diventa paragonabile ad a_B^* gli elettroni si *schermino* vicendevolmente, cessando di essere legati e finendo in banda di conduzione. Per quale valore critico della densità n_{cr} di donori (elettroni) questo avviene? Si dia n_{cr} in cm^{-3}.
[Si suggerisce di scrivere la densità media di donori/elettroni come $n_d = [(4\pi/3)a^3]^{-1}$ e di prendere a come misura della distanza media tra donori. Altri possibili modi di stimare n_{cr} non sono peraltro scoraggiati.]

5. Si stimi la densità di portatori ($n_c + p_v$, in cm^{-3}) a $T = 10K^o$ nel semiconduttore puro (senza drogaggio) utilizzando i dati forniti nel preambolo.

6. Confrontando le densità di portatori ottenute al punto 4 e al punto 5, si dica se a $T = 100K^o$ e per $n_d > n_{cr}$ il semiconduttore drogato è in regime estrinseco (dominato dal drogaggio) o intrinseco.

7. A $T = 0$ e per una densità di donori $n_d > n_{cr}$, l'$GaAs$ drogato è un isolante, un semiconduttore o un metallo? E perchè?

40 * Semiconduttore drogato

Si consideri un semiconduttore che in regime intrinseco abbia una gap $E_g = 1.1200eV$. Si sa inoltre da esperimenti di risonanza di ciclotrone a $B = 1000$gauss che gli elettroni alla sommità della banda di valenza hanno $\omega_c = 3.59 \times 10^{10}$ cicli e gli elettroni al fondo della banda di conduzione $\omega_c = 5.18 \times 10^{10}$ cicli. Si sa inoltre che la soglia di fotoassorbimento del semiconduttore drogato con soli donori è a 0.0338 eV. Sia la banda di conduzione che quella di valenza hanno dispersione sferica all'estremo.

1. Si dica qual è la massa efficace in valenza, in unità di m_e.

2. Quanto vale (in eV) l'energia di legame del livello donore?

3. Quanto vale la costante dielettrica?

4. Si calcoli il raggio di Bohr efficace a_B^* del livello donore (in unità di a_B).

5. Si dica se l'approssimazione idrogenoide è ragionevole nel trattare tale donore, motivando in dettaglio la risposta.

6. Quanto vale la massa efficace in valenza?

7. A che energia comincerebbe il fotoassorbimento in un campione (i) drogato con soli accettori e (ii) drogato con accettori e donori?

Nota: Si diano le valutazioni numeriche con 5 cifre significative.

41 * Elettroni in pozzi quantistici a base di GaAs/AlGaAs

È possibile realizzare in laboratorio eterostrutture a base GaAs/AlGaAs nelle quale si realizza un gas di elettroni (circa) bidimensionale.

Si sa che la costante dielettrica di questi sistemi è $\epsilon = 12.5$. Inoltre esperimenti di risonza ciclotronica con un campo $B = 10^4 gauss$ rivelano una frequenza di ciclotrone $\omega_c = 1.76 \times 10^{11} s^{-1}$ per gli elettroni.

Si può assumere che gli elettroni in questione si muovano in un *continuo* dielettrico.

1. Si valuti la massa efficace m^* degli elettroni in unità di massa elettronica m_e.

2. Quanto valgono l'energia per elettrone ε e l'energia di Fermi E_F (in eV) per tale gas di elettroni bidimensionale se la densità è $n = 3.18 \times 10^9 cm^{-2}$?

3. Quanto vale T_F in K?

4. Si faccia una grafico qualitativo della funzione di Fermi in funzione dell'energia per $0 \leq E \leq 0.1 eV$, riportando $f(E)$ come funzione di E/E_F.

5. L'importanza dell'interazione tra gli elettroni può essere misurata dal rapporto γ tra (i) l'energia potenziale di due elettroni alla tipica distanza media $a = \sqrt{1/(\pi n)}$ e (ii) l'energia di Fermi E_F. Quanto vale γ in questo gas di elettroni?

42 * Trasferimento di carica in pozzi quantici accoppiati

Si considerino due pozzi quantici simmetrici strettamente bidimensionali a distanza d.

[Ciascun pozzo quantico intrappola gli elettroni costringendoli a muoversi esclusivamente in un piano. Il primo pozzo (A) può essere schematizzato come il piano ortogonale all'asse z e passante per $z = 0$, il secondo (B) è parallelo al primo e passa per $z = d$. Inizialmente ciascun piano è neutro con una densità areale (di numero) di elettroni $N/A = \rho$ neutralizzata da un sostrato uniforme di carica positiva con densità (areale di carica) $e\rho$. Si noti che i due sostrati sono fissi, mentre gli elettroni possono trasferirsi da un piano all'altro.]

Senza perdita di generalità considereremo la possibilità che elettroni si trasferiscano da B ad A. Le distribuzioni di densità elettroniche rimangono sempre uniformi in ciascun piano.

1. Si dica qual è la variazione di energia elettrostatica per unità di area $E_H(n, d)$ causata dal traferimento di $n \leq \rho$ elettroni (per unità di area) da B as A. [Suggerimento: il traferimento di carica porta ad una densità di carica netta $-en$ sul piano A e $+en$ sul piano B. Si consideri l'energia immagazzinata dal campo per unità di area, o equivalentemente il lavoro per unità di area necessario a separare i due piani carichi da distanza 0 a distanza d.]

2. In Hartree-Fock gli elettroni in ciascun piano interagiscono tra di loro con una energia per unità di area della forma $E_I(\rho_I) = C\rho_I^2 - D\rho_I^{3/2}$, I=A, B, con $C = e^2\pi a_B/2$ e $D = e^2(4/3)\sqrt{2/\pi}$; evidentemente $\rho_B = \rho - n$ e $\rho_A = \rho + n$. Si scrivano le energie per unità di area dovuta alle interazioni nei due piani $E_A(\rho + n)$ e $E_B(\rho - n)$.

3. Si scriva l'energia totale per unità di area $E_T(\rho, n, d) = E_A + E_B + E_H$

4. Si scriva (i) il cambiamento in energia totale corrispondente al trasferimento di carica da B ad A $\Delta(\rho, n, d) = E_T(\rho, n, d) - E_T(\rho, 0, d)$ e (ii) si consideri poi in particolare il caso di trasferimento totale $n = \rho$ ovvero si calcoli $\Delta_t = \Delta(\rho, \rho, d)$.

5. Per fissata distanza d ci sono situazioni nelle quali il trasferimento totale è energeticamente favorevole (cioè $\Delta_t < 0$)? Se sí, si specifichi la condizione che deve essere soddisfatta dalla densità ρ.

6. Nell'ipotesi di risposta affermativa al punto precedente si consideri il caso particolare nel quale $d = 200\AA$ e il raggio di Bohr efficace $a_B = 100\AA$ e si stimi la densità massima ρ^* (in cm^{-2}) alla quale il trasferimento può essere osservato.

7. Quanto vale il raggio r_s^* del disco di Wigner corrispondente alla densità del punto precedente? [$\pi(r_s^* a_B)^2 = \rho^{*-1}$]

43 * Proprietà di molecole con stato eccitato di tripletto.

Si considerino delle molecole con uno stato eccitato di tripletto ad energia di Δ superiore allo stato fondamentale di singoletto. Entrambi gli stati hanno momento angolare orbitale nullo. Tutti gli altri stati eccitati si possono trascurare alle temperature di interesse. Si immagini un gas non interagente di tali molecole a temperatura T.

1. Si scriva l'energia libera di Helmoltz per molecola di tale gas, in presenza di un campo magnetico $\mathbf{B} = B\hat{z}$.
2. Si calcoli la magnetizzazione media per molecola.
3. Si calcoli la suscettività magnetica molecolare.
4. Si diano espressioni limite per la suscettività magnetica quando (i) $\beta\Delta \ll 1$ e (ii) $\beta\Delta \gg 1$.
5. Si calcoli l'entropia per molecola a campo $B = 0$ e si provi a farne un grafico qualitativo in funzione di $K_B T/\Delta$.
6. Si calcoli il calore specifico molecolare e se ne dia un grafico qualitativo in funzione di $K_B T/\Delta$.

44 * Magnetismo del gas di elettroni e condizione di Stoner.

Un gas di elettroni omogeneo in 3 dimensioni è immerso in un campo magnetico B nella direzione z. Si consideri uno stato nel quale N_+ elettroni hanno proiezione di spin positiva (lungo z) e N_- negativa e si definisca la polarizzazione di spin $\zeta = (N_+ - N_-)/N$ con $N = N_+ + N_-$. L'energia di ciascuna componente di spin ($\sigma = \pm$) consta di 3 contributi: (i) l'energia cinetica $N_\sigma(3/5)(\hbar^2 K_{F,\sigma}^2)/(2m)$, (ii) l'energia di scambio $N_\sigma(3e^2 K_{F,\sigma})/(4\pi)$, e l'energia di accoppiamento tra i momenti magnetici di spin e il campo B; evidentemente $K_{F,\sigma}$ è il vettore d'onda di Fermi delle componente di spin con proiezione σ.

1. Si scriva l'energia degli elettroni con spin in su.
2. Si scriva l'energia degli elettroni con spin in giù.
3. Si scriva l'energia totale e si dia la condizione che determina la polarizzazione d'equilibrio ad N e V costanti.
4. Si specializzi la condizione di cui al punto precedente al caso $\zeta \ll 1$ e si dia una formula esplicita per lo ζ d'equilibrio.
5. Si dica per quali valori di r_s, considerando dei B di circa 10^4 gauss, lo ζ trovato al punto precedente risulta effettivamente piccolo.
6. Qual è la condizione per la quale lo stato con $\zeta = 0$ diventa instabile (un massimo!).

45 Calore specifico in un ferromagnete di Heisenberg

Si consideri un ferromagnete di Heisenberg in 3 dimensioni, in assenza di campi magnetici esterni. Gli spins abbiano *grandezza* S e siano posti su un reticolo BCC con parametro reticolare a_L. Si assumano interazioni di scambio *a soli primi vicini*, con costante di accoppiamento di scambio J.

1. Si considerino eccitazioni dallo stato fondamentale nella forma di onde di spin. Si trovi la dispersione delle energie di eccitazione per piccoli valori del vettore d'onda $\mathbf{k}$, scrivendo esplicitamente l'energia di eccitazione $\epsilon(\mathbf{k})$ dell'onda di spin in funzione di S, a_L, J, k.

2. Si consideri il calore specifico per unità di volume, a volume costante, c_v^M, derivante dalle eccitazioni magnetiche, *nel limite di basse temperature*, assumendo che le eccitazioni di bassa energie siano dovute ad onde di spin e abbiano la forma trovata al punto precedente.
   Si esprima c_v^M in termini di S, a_L, J, K_B, T. [*Nota: il problema è assai simile a quello del calore specifico a basse temperature dovuto alle vibrazioni reticolari, laddove si considerino le onde di spin (o magnoni) al posto dei fononi.*]

3. Si dia per noto il calore specifico reticolare c_v^L a basse temperature [in termini di $K_B, T, \hbar, c$, con c l'opportuno valor medio della velocita del suono].
   Assumendo che il cristallo in questione sia un isolante e che il calore specifico totale $c_v = c_v^M + c_v^L$, derivi dai soli contributi reticolare e magnetico, si stimi a quale temperatura T^* [espressa in termini di $K_B, \hbar, c, S, a_L, J$] si ha $c_v^M = c_v^L$.

4. Con riferimento al punto 3, si dica quale condizione deve essere soddisfatta dalla temperatura affinché il calore specifico magnetico domini su quello reticolare e sia quindi facilmente osservabile.

Nota: La funzione zeta di Rieman, $\zeta(s) = \sum_{1,\infty} n^{-s}$, n intero, si può trovare tabulata nel libro: Jahnke-Emde-Lösche, *Tables of higher functions*, McGraw-Hill, NY 1960.

46 * Instabilità di Peierls in un conduttore unidimensionale

Si consideri un sistema di ioni ed elettroni costretti a muoversi su una linea. Gli ioni sono di carica unitaria e c'è un elettrone per ione, così che il sistema è globalmente neutro. Si supponga che gli ioni siano nelle posizioni $X_n^0 = na$ e che si conoscano i livelli di energia elettronici $\epsilon^0(q)$. Per semplicità assumeremo $\epsilon^0(q) = \hbar^2 q^2/2m$. Nello stato fondamentale sono occupati i livelli con $|q| \leq q_F$, con $q_F = \pi/2a$ e l'energia per elettrone risulta essere $E_e^0 = \epsilon_F/3$.

Si consideri una deformazione del reticolo

$$\begin{aligned} X_n &= X_n^0 + u(n), \\ u(n) &= \Delta\, cos(2q_F na) = \Delta\, cos(\pi n) \end{aligned}$$

dove Δ è un parametro.

1. Qual è la periodicità del reticolo deformato?

2. Si calcoli la variazione di energia ione-ione (per ione) E_a, descrivendo l'interazione tra gli ioni come dovuta a molle di costante elastica C (e lunghezza a riposo a), che uniscono ciascuno ione ai suoi primi vicini.

3. La deformazione reticolare induce un potenziale addizionale elettrone-ione della forma

$$U_{ei} = 2A\Delta cos(2q_F x) = A\Delta(e^{i2q_F x} + e^{-i2q_F x}).$$

U_{ei} accoppia stati con vettori d'onda che differiscono di $2q_F \equiv G_1$, con ampiezza $U_{G_1} = A\Delta$.

Nello schema a due livelli, ogni autovalore $\epsilon^0(q)$ dà luogo a due livelli perturbati. Evidentemente ad ogni q gli elettroni occuperanno il livello più basso $\epsilon(q) \equiv \epsilon_-(q)$. Si calcoli l'energia per elettrone nel reticolo deformato

$$E_e = \frac{1}{q_F}\int_0^{q_F} dq\ \epsilon(q).$$

(Per valutare agevolmente l'integrale si suggerisce di passare alla variable $y = q_F - q$).

4. Si determini il Δ^* di equilibrio minimizzando l'energia totale $E(\Delta) = E_a + E_e$ rispetto a Δ, ovvero imponendo

$$\frac{dE(\Delta)}{d\Delta} = 0.$$

5. Si sfrutti l'espressione di Δ^* per mostrare che $E(\Delta^*) - E(0) < 0$. Questo dimostra che il sistema con deformazione ha energia più bassa e quindi è lo stato d'equilibrio. Il sistema con deformazione è un metallo o un isolante?

6. Si semplifichi l'espressione di Δ^* assumendo che $C\epsilon_F/A^2$ sia molto maggiore di uno, così che $\sinh(x) \approx e^x/2$. Si riscriva poi la quantità $C\epsilon_F/A^2$ in termini della densità di stati in q al livello di Fermi, $N_0 = g(\epsilon_F)/2$, e del potenziale efficace elettrone-elettrone $V_0 = A^2 a/2C$. L'espressione trovata ricorda qualcosa?

Note:

1. Si ricorda che: $\int dt\ \sqrt{1+t^2} = (1/2)[t\sqrt{1+t^2} + \text{arcsinh}(t)]$, e $(d/dx)\text{arcsinh}(x) = 1/\sqrt{1+x^2}$.

2. Si ricorda che in D dimensioni la densità di stati di elettroni liberi è

$$g(\epsilon) = \frac{Dn}{2\epsilon_F}\left[\frac{\epsilon}{\epsilon_F}\right]^{D/2-1},$$

con n la densità.

47 * Superconduttori

Si consideri un metallo che ha un calore specifico elettronico a basse temperature $c_v = \gamma T$, con $\gamma = 4.410^{-4} cal - mole^{-1} K^{-2}$ e temperatura di debye $\Theta = 170K$. Si sa inoltre che il metallo diventa superconduttore a $T = 3.72K$

1. Si calcoli la densità di stati elettronica alla superficie di Fermi ($cm^{-3} eV^{-1}$).

2. Quanti cicli vale la frequenza di Debye ω_D?

3. Quanto vale (in teoria BCS) V_0, l'attrazione media tra elettroni, in eVcm^3?

4. Quanto vale la gap di energia del superconduttore a $T = 0$, in eV?

5. Sapendo che la massa efficace degli elettroni è 1 (in unità di m_e), si stimi la lunghezza di correlazione nella fase superconduttrice a $T = 0$.

48 * Onde elettromagnetiche in un superconduttore

Si consideri un superconduttore nel modello a due fluidi, secondo il quale c'e' una frazione di elettroni superconduttori con densità n_S ed una frazione di elettroni normali con densità n_N. Evidentemente $n = n_S + n_N$ e $\mathbf{j} = \mathbf{j}_S + \mathbf{j}_N$. Per la corrente normale vale la solita relazione $\mathbf{j}_N = \sigma_0 \mathbf{E}$ mentre per quella superconduttrice vale la la relazione di London & London. Nel seguito si chiede di ricavare la relazione di dispersione per la propagazione di onde elettromagnetiche nel superconduttore.

1. Si scrivano le equazioni di Maxwell in termini di $\mathbf{E}$ e $\mathbf{B}$, trascurando in quella per il rotore di $\mathbf{B}$ il termine di magnetizzazione.
2. Si scriva l'equazione delle onde in termini del campo $\mathbf{B}$, dando la condizione (di dispersione) che deve essere soddisfatta per onde piane.
3. Utilizzando l'espressione di Drude per la conducibilità statica si esprima la relazione di dispersione in modo da far apparire la frequenza di plasma.
4. Sotto quale condizione il contributo degli elettroni normali può essere trascurato?
5. Scrivendo la relazione di dispersione come una relazione per q^2c^2 dove q è il vettore d'onda dell'onda e c la velocità della luce si stimi l'ordine di grandezza dei vari contributi a q^2c^2, in s^{-2}, usando valori tipici per la lunghezza di London a densità metalliche, e ricordandosi che la propagazione delle onde nel superconduttore non deve distruggere la superconduttività. Si consideri $n_S = n/2$.

49 * Penetrazione del campo magnetico in un superconduttore

Si consideri un superconduttore, che occupa la regione di spazio $|z| \leq d$, immerso in un campo magnetico uniforme $B_0\hat{x}$. Evidentemente d sarà molto maggiore della lunghezza di London Λ.

1. Si scriva l'equazione soddisfatta dal campo all'interno della regione superconduttrice.
2. Sfruttando le condizioni di continuità del campo $\mathbf{B}$ alle superfici di separazione tra vuoto e regione superconduttore, si determini il campo $\mathbf{B}$ all'interno del superconduttore e se ne faccia un grafico qualitativo.
3. Si calcoli la densità di corrente all'interno del superconduttore e se ne faccia un grafico qualitativo.
4. Si dia l'espressione della magnetizzazione all'interno del superconduttore.
5. Considerazioni elementari mostrano che, in presenza di un campo magnetico B minore del campo critico, l'energia libera di un volumetto di superconduttore è più grande che in assenza del campo stesso della quantità $B(\mathbf{r})^2 d\mathbf{r}/(4\pi)$. Si dica di quanto è la crescita di energia libera per unità di volume per il superconduttore in questione.
6. Si dia il valore medio della magnetizzazione nel superconduttore in questione.

50 Coppia di Cooper in onda p

Si consideri di aggiungere 2 elettroni ad un metallo normale. Il metallo normale è descritto con il modello di Sommerfeld, di elettroni non interagenti, che occupano tutte le onde piane all'interno della sfera di Fermi.

Si consideri la funzione d'onda dei 2 elettroni aggiunti che soddisfa l'equazione

$$\left[-\frac{\hbar^2\nabla_1^2}{2m} - \frac{\hbar^2\nabla_2^2}{2m} + V(\mathbf{r_1} - \mathbf{r_2}) - E\right]\Psi(\mathbf{r_1}, \mathbf{r_2}) = 0.$$

L'equazione in questione è separabile nelle variabili del centro di massa $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)/2$ e del moto relativo $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$. Il moto del centro di massa è libero. Quindi si può porre $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \exp(i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{R})\phi(\mathbf{r})$. Evidentemente lo stato fondamentale corrisponde a $Q = 0$, che implica $\Psi_0(\mathbf{r_1}, \mathbf{r_2}) = \phi_0(\mathbf{r})$

1. Si scriva l'equazione di Schrödinger soddisfatta da $\phi_0(\mathbf{r})$ nella rappresentazione delle onde piane, ovvero l'equazione soddisfatta dai cofficienti $g(\mathbf{k})$, $\phi_0(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} g(\mathbf{k}) exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$. Si assuma che $\langle\mathbf{q}|V|\mathbf{k}\rangle = -V_1\hat{q}\cdot\hat{k}$, per onde piane con energie $\epsilon_F \leq \epsilon^{(0)}(q \leq \epsilon_F + \hbar\omega_D$, dove ω_D è una tipica frequenza di Debye.

2. Si dica quale simmetria abbia $g(\mathbf{k})$ rispettivamente per lo stato di singoletto e per lo stato di tripletto.

3. Si dica quale è l'energia minima dello stato di singoletto.

4. Per il tripletto, utilizzando la formula di addizione riportata in calce e sviluppando $g(\mathbf{k})$ in armoniche sferiche, $g(\mathbf{k}) = \sum_l \sum_{m=-l}^{l} g_{lm}(k) Y_{lm}(\hat{k})$ si dica quali $g_{lm}(k)$ sono non nulli e si scriva l'equazione autoconsistente da essi soddisfatta.

5. La condizione per la quale l'equazione precedente risulta soddisfatta determina l'energia dello stato fondamentale: si calcoli tale energia introducendo la densità di stati (per proiezione di spin) e approssimandola nell'integrale con il suo valore al livello di Fermi, n_0.

6. Si approssimi la formula precedente nel caso in cui $V_1 n_0 \ll 1$.

7. Prendendo per ω_D una tipica frequenza fononica ed assumendo che $V_1 n_0 \simeq 0.5$ si dica quanto vale (in eV) l'energia di legame della coppia definita come $\varepsilon = 2\epsilon_F - E$.

Nota: La formula di addizione esprime l'angolo tra due direzioni assegnate in termini delle armoniche sferiche:

$$\hat{q}\cdot\hat{k} = \frac{4\pi}{3}\sum_{m=-1}^{1} Y_{1,m}^*(\hat{q})Y_{1,m}(\hat{k}) = \frac{4\pi}{3}\sum_{m=-1}^{1} Y_{1,m}^*(\hat{k})Y_{1,m}(\hat{q})$$