

II PROVA PARZIALE

INTRODUZIONE ALLA FISICA DELLA MATERIA

PROBLEMA 1

Una molecola biatomica eteronucleare AB ha un potenziale elettronico detto di Morse

$$V(R) = D[e^{-2\alpha(R-R_0)} - 2e^{-\alpha(R-R_0)}]$$

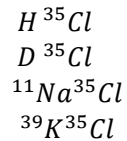
con $D = 4.62$, $\alpha = 1.87 \text{ \AA}^{-1}$ e $R_0 = 1.27 \text{ \AA}$.

La molecola possiede un'energia di dissociazione di 4.487 eV . Si calcoli

- a) la costante di forza elastica della molecola
- b) la frequenza caratteristica dell'oscillazione (ω) in approssimazione armonica
- c) il rapporto tra il numero di molecole nel primo stato eccitato vibrazionale e quello delle molecole nello stato fondamentale a $T_1 = 300 \text{ K}$
- d) il rapporto tra il numero di molecole nel decimo stato eccitato vibrazionale e quello delle molecole nello stato fondamentale a $T_2 = 3000 \text{ K}$ e si commenti il risultato in relazione al punto c)

Si determini inoltre

- e) quale delle seguenti molecole può essere un possibile candidato per la molecola AB?



Si motivi la risposta

Quantità utili:

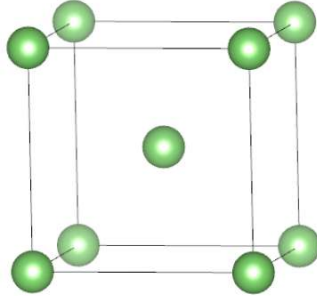
Massa del protone: $m_p = 1.67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

Costante di Planck ridotta: $\hbar = 1.055 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s} = 6.582 \cdot 10^{-16} \text{ eV} \cdot \text{s}$

Costante di Boltzmann: $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} = 8.62 \cdot 10^{-5} \text{ eV} \cdot \text{K}^{-1}$

PROBLEMA 2

Il Litio è un metallo caratterizzato da un reticolo di Bravais cubico a corpo centrato (bcc), con costante reticolare a e un atomo per cella primitiva.



- Si indichi il numero di primi vicini di questa struttura cristallina e i vettori \mathbf{R} relativi, in funzione del parametro reticolare a
- Si indichi il numero di primi vicini di questa struttura cristallina e i vettori \mathbf{R} relativi, in funzione del parametro reticolare a
- Si calcoli la struttura a bande dello stato fondamentale in approssimazione di tight-binding, sapendo che in questa approssimazione vale la relazione

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = E_0 + \beta + \sum_{\substack{\mathbf{R} \\ (p.v.)}} \gamma(R) \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R})$$

dove E_0 è l'energia del livello atomico s ,

$$\beta = \int d\mathbf{r} \Delta U(\mathbf{r}) |\phi(\mathbf{r})|^2,$$

$$\gamma(\mathbf{R}) = - \int d\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r}) \Delta(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}).$$

(non è richiesto il calcolo esplicito di E_0 , β , $\gamma(\mathbf{R})$, ma eventuali osservazioni possono permettere una semplificazione del calcolo)

- Si rappresenti graficamente la banda $\varepsilon(\mathbf{k})$ lungo la direzione k_x