Struttura della Materia, Prof. Montalenti. Scritto del 16/02/2021. Un esercizio risolto in modo completo e senza alcun errore (nemmeno di calcolo nelle stime quantitative delle grandezze, considerate parte importante dell'esame) garantisce la sufficienza e l'ammissione all'orale. Due esercizi risolti a metà valgono meno di un esercizio svolto interamente. Tempo a disposizione: due ore.

1. Si consideri un sistema di N particelle distinguibili non interagenti mantenute ad una temperatura T. Sapendo che le particelle hanno spin s=1/2, e che i livelli di singola particella sono gli stessi di una particella di massa M vincolata a muoversi su una circonferenza di raggio R, calcolare l'energia media del sistema nell'ipotesi che alla funzione di partizione di particella singola contribuiscano solo lo stato fondamentale, il primo e il secondo stato eccitato. In particolare, calcolare i limiti per T tendente a 0 e a infinito, fornire un'interpretazione fisica del risultato, e discutere la validità dell'approssimazione sfruttata nel calcolare la funzione di partizione nei due limiti.

2. Fissato lo stato di spin, la densità di carica associata a una funzione d'onda a due elettroni $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ è data da: $\rho(\vec{r}) = -2e \int d\vec{r}_2 |\Psi(\vec{r}, \vec{r}_2)|^2$. Utilizzando tale espressione, si calcoli la densità di carica in corrispondenza di uno dei due nuclei in una molecola di H_2 nello stato eccitato $\Phi = \mathrm{X}_0^0 \psi_u(\vec{r}_1)\psi_u(\vec{r}_2)$, dove X_0^0 rappresenta lo stato di spin di singoletto, $\psi_u(\vec{r}_1)$ la (nota) soluzione ungerade per l'elettrone 1 , $\psi_u(\vec{r}_2)$ la (nota) soluzione ungerade per l'elettrone 2. N.B. Si scriva il risultato sfruttando la seguente notazione: $C = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{1+I(R)}}$; E=$\psi_{1s}(0)$; F=$\psi_{1s}(R)$, dove *I(R)* è l'integrale di overlap calcolato alla distanza internucleare *R*, e ψ_{1s}è la nota funzione d'onda 1s dell'atomo di idrogeno.

3. Si consideri un reticolo di Bravais bidimensionale finito, generato dalla coppia di vettori $\vec{a}_1 = a(1,0)$; $\vec{a}_2 = \frac{a}{2}(0,1)$. Sapendo che il numero di atomi del reticolo nella direzione individuata da $\vec{a}_1$ ($\vec{a}_2$) è pari a $N_1 = 3$ ($N_2 = 5$), calcolare e rappresentare graficamente tutti i vettori $\vec{k}$ di Bloch in prima zona di Brillouin, immaginando di applicare condizioni periodiche alla Born-von Karman.