

## Elettroni nei Cristalli – esame finale

A.A. 2007/2008, 3 aprile 2008

(tempo 3 ore)

- Si risolvano tutti gli esercizi che hanno complessivamente una valutazione massima di 36 punti. Il voto tra 33 e 36 viene considerato 30 e lode, tra 30 e 32 viene considerato 30.
- Si diano tutti i passaggi necessari a capire in dettaglio il procedimento di soluzione. Risposte con il solo risultato o dettagli insufficienti non saranno considerate;
- se richieste, si diano le valutazioni (numeriche) con 3 cifre significative.

### Esercizio 1: Elettroni liberi

Nel modello di elettroni liberi in 3D l'espressione del vettore d'onda di Fermi in funzione della densità elettronica  $n$  è  $\mathbf{k}_F = (3\pi^2 n)^{1/3}$ .

1. Qual è in 2D la relazione tra  $\mathbf{k}_F$  e  $n$ ?
2. Considerare il caso 3D. Mostrare che la sfera di Fermi tocca le facce della prima zona di Brillouin (IBz) in un reticolo fcc quando il numero medio di elettroni di valenza per atomo è  $\langle Z \rangle = n/n_a = 1.36$ , con  $n_a$  la densità atomica.
3. Il rame ha struttura fcc. Supponiamo che alcuni atomi di Cu (monovalenti) vengano sostituiti da atomi di Zn (bivalente): per concentrazioni di Zn fino a 36% la lega che si forma (ottone) mantiene la struttura fcc. A quale concentrazione di Zn la superficie di Fermi tocca le facce della IBz ?

### Esercizio 2: Diffrazione

1. Sia  $a_0 = 2.62 \text{ \AA}$  la costante reticolare di un cristallo cubico. Determinare l'angolo di Bragg corrispondente alla riflessione dai piani (100), (110), (111), (200) e (211), per una lunghezza d'onda del fascio incidente  $\lambda = 1.54 \text{ \AA}$ .
2. Sapendo che per la medesima lunghezza d'onda l'angolo di riflessione di Bragg dai piani (110) nel Fe con struttura bcc è di  $22^\circ$ , calcolare il passo reticolare del Fe.
3. Calcolare il fattore di forma atomico per un atomo con  $Z$  elettroni di valenza supponendo che questi siano uniformemente distribuiti all'interno di una sfera di raggio  $R$ .

### **Esercizio 3:** *Elettroni quasi liberi*

Si consideri un reticolo quadrato 2D di costante reticolare  $a$ .

1. Si disegnino la prima e la seconda zona di Brillouin (Bz), esplicitando le coordinate  $(k_x, k_y)$  dei punti rilevanti che le delimitano.
2. Considerare lo spigolo  $\mathbf{q} = (\pi/a, \pi/a)$  della prima Bz. Quale vettore  $\mathbf{K}$  del reticolo reciproco identifica il (NB: uno solo!) piano di Bragg su cui si trova  $\mathbf{q}$ ?
3. Considerare un debole potenziale cristallino con la periodicità del reticolo considerato:

$$U(x, y) = -4U \cos(2\pi x/a) \cos(2\pi y/a)$$

Nell'approssimazione di elettroni quasi liberi e in uno schema a due livelli (livelli vicini a un singolo piano di Bragg), trovare il gap di energia che separa i primi due livelli altrimenti degeneri in  $\mathbf{q}$  (*Fare uso dell'opportuna formula; non si chiede di ricavarla, essendo questo già fatto sul testo A&M*)

### **Esercizio 4:** *Modello tight binding e velocità di elettroni di Bloch*

1. Considerare un cristallo 1D e scrivere l'espressione dell'energia nel modello *tight binding* per una banda  $s$ , trascurando l'overlap ma tenendo in considerazione le interazioni a tutti gli ordini di vicini.
2. Scrivere esplicitamente anche l'espressione per la velocità di un elettrone di Bloch in questo modello e mostrare che essa è nulla al centro e ai bordi della zona di Brillouin.
3. In quei punti calcolare il valore della massa efficace.