

Elettroni nei Cristalli – esame finale

A.A. 2006/2007, 4 luglio 2007

(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 - modello di Sommerfeld

L'alluminio (Al) in condizioni normali di temperatura e pressione é un metallo con struttura FCC e densità di circa 2.7 g cm^{-3} . Ha numero di massa 27 e energia di Fermi E_F di 11.7 eV.

1. A partire dall'energia di Fermi data, calcolate la densità n di elettroni liberi presenti nel metallo.
2. Usando l'espansione di Sommerfeld, calcolare il calore specifico (a densità costante) a temperatura ambiente.
3. A partire dalla densità del solido e dal suo numero di massa, calcolate la densità numerica n_{at} degli atomi di Al presenti nel metallo e quindi il numero medio di elettroni liberi per atomo. E' come vi aspettavate? Commentate.

Esercizio 2: Modello semiclassico per la dinamica dell'elettrone

Considerare un solido 3D con relazione di dispersione $E(\mathbf{K}) = 2\gamma[\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)]$, con $\gamma < 0$, a parametro reticolare, in un campo magnetico uniforme statico $\mathbf{H} = H\hat{x}$. Si sottintende un'opportuna scelta dello zero dell'energia.

1. Scrivere la velocità degli elettroni di Bloch nel piano (y,z) .
2. Scrivere l'equazione di un'orbita (nello spazio \mathbf{k}) per $k_x = 0$ sulla superficie di energia costante $E(\mathbf{k}) = E^* = 2\gamma$ e disegnarla.
3. Specificare l'espressione della velocità (a) su quest'orbita in termini di k_y . Indicare la direzione del moto lungo l'orbita.

Esercizio 3: Modello tight binding

Considerare elettroni di tipo s in un reticolo unidimensionale con passo reticolare a . Si usi un modello *tight binding* con *hopping a primi e secondi vicini* e con *overlap* trascurabile. Facendo riferimento alla definizione di $\gamma(\mathbf{R})$ data dal libro di testo, si consideri: $\gamma(\mathbf{R}_{NN})=t$ dove \mathbf{R}_{NN} congiunge due primi vicini, $\gamma(\mathbf{R}_{NNN})=t'$ dove \mathbf{R}_{NNN} congiunge due secondi vicini, $\gamma(\mathbf{R})=0$ altrimenti.

1. Dimostrare che l'espressione esplicita per la banda, ponendo per semplificare la scrittura $E_s - \beta \equiv E_0$ (sempre facendo riferimento al testo per la definizione di β) è:

$$E(k) = E_0 - 2[t \cos(ka) + t' \cos(2ka)]$$

2. Considerare $t' = -t$ e fare un grafico della banda nella prima zona di Brillouin, specificando i punti di massimo e minimo.
3. Calcolare la massa efficace nei punti di massimo e minimo della banda d'energia calcolata al punto precedente (2).
4. Fare l'estensione a 2 dimensioni considerando un reticolo quadrato ma *hopping solo a primi vicini*. Scrivere anche in questo caso l'espressione esplicita per la banda. (si ponga $E_s - \beta \equiv E_0$)
5. Quanto vale l'energia di Fermi nel caso di banda riempita per metà', cioè con un solo elettrone di spin-1/2 per cella, e $T=0$?
6. Si faccia per il caso al punto sopra (5) il disegno della superficie (o meglio, "curva" in 2D) di Fermi nel piano (k_x, k_y) .