

Elettroni nei Cristalli – esame finale

A.A. 2007/2008, 19 settembre 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: *Diffrazione*

1. Si consideri il Na che ha struttura BCC. Sapendo che per una lunghezza d'onda $\lambda=3.033 \text{ \AA}$ l'angolo di riflessione di Bragg dalla famiglia di piani (110) è di 30° , calcolare il passo reticolare del Na.
2. L'Al ha invece struttura FCC con passo reticolare 4.05 \AA . Calcolare l'angolo di riflessione di Bragg corrispondente alla riflessione dalla famiglia di piani (111), per la stessa lunghezza d'onda del fascio incidente.
3. Si consideri il cloruro di sodio e si denoti con f_{Cl} e f_{Na} il fattore di forma atomico del cloro e del sodio rispettivamente. Nel seguito si trascurerà la loro dipendenza dal vettore d'onda trasferito. Evidentemente la struttura in questione è un Bravais con base. Si specifichi qual è il reticolo di Bravais e quale la base, dandone i vettori \mathbf{d}_j .
4. Si scriva l'espressione esplicita del fattore di struttura geometrico $S(\mathbf{k})$ su un generico vettore k dello spazio reciproco, in funzione di f_{Cl} e f_{Na} .
5. Si calcoli esplicitamente $S(\mathbf{k})$ per $f_{Cl}=f_{Na}$ sui vettori di reticolo reciproco \mathbf{K} , si dia la condizione aggiuntiva che deve essere soddisfatta da \mathbf{K} perchè $S(\mathbf{K})$ sia non nullo e si dica quale reticolo formano tali \mathbf{K} .
6. Come sopra quando $f_{Cl}=-f_{Na}$. C'è relazione tra i due reticoli trovati ai due punti precedenti?

Esercizio 2: *Elettroni in un cristallo periodico: metodo Tight binding, modello semiclassico per la dinamica*

1. Usando il metodo *Tight binding* e considerando solo interazioni a primi vicini e *overlap* trascurabile, dimostrare che la relazione di dispersione per la banda d'energia generata da orbitali di tipo s in un reticolo tridimensionale BCC di passo reticolare a è:

$$E(\mathbf{K}) = E_0 - 8t \cos(k_x a/2) \cos(k_y a/2) \cos(k_z a/2),$$

dove $t = \gamma(\mathbf{R}_{NN})$ (riferimento la solita notazione di Ashcroft-Mermin) e \mathbf{R}_{NN} è un vettore congiungente primi vicini.

2. Considerare il cristallo suddetto in un campo magnetico uniforme statico $\mathbf{H} = H\hat{z}$. Nel modello semiclassico per la dinamica dell'elettrone, scrivere la velocità degli elettroni di Bloch nel piano (x,y) .
3. Scrivere l'equazione di un orbita (nello spazio \mathbf{k}) per $k_z = 0$ sulla superficie di energia costante $E(\mathbf{k}) = \text{costante} = E_0 - 8t + \delta^2$ con δ molto piccolo e fare un disegno di tale orbita sul piano (k_x, k_y) , assieme alla sezione della prima zona di Brillouin in quel piano.

Esercizio 3: *Elettroni in un cristallo periodico: masse efficaci*

4. Sempre usando il metodo Tight-binding in approssimazione primi-vicini, come all'esercizio 2, scrivere $E(\mathbf{K})$ per orbitali s nel caso di reticolo bidimensionale quadrato.
5. Calcolare i punti stazionari di $E(\mathbf{K})$.
6. Calcolare il tensore di massa efficace nei punti corrispondenti ai massimi e minimi della banda, specificandone il carattere.