

Elettroni nei Cristalli – esame finale

A.A. 2006/2007, 12 dicembre 2006

(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: *Reticoli di Bravais con base*

Sono interessanti per le proprietà di superconduttività alcuni materiali fatti da layers di CuO_2 , alcuni dei quali hanno una disposizione come quella raffigurata in Fig. 1. Sia a la distanza fra gli atomi di Cu.

1. Disegnare e descrivere una possibile scelta di vettori di base per questo cristallo e la corrispondente cella primitiva unitaria.
2. Nell'ipotesi che i fattori di forma atomici siano $f_{Cu} = 2f_O$, calcolare il fattore di struttura e stabilire per quali vettori del reticolo reciproco è massimo e per quali invece si annulla.
3. In altri composti le posizioni degli atomi di O non sono equivalenti, ma sono come indicato in Fig. 2, con “+” e “-” che indicano spostamenti degli atomi in direzione perpendicolare al piano di una certa quantità $\pm\delta$. Specificare qual è la cella primitiva, il passo reticolare e i vettori di base del reticolo reciproco in quest'altro caso.

Esercizio 2: *Elettroni in 2d: superfici di Fermi, potenziale debole*

1. Considerare un metallo bidimensionale con reticolo di Bravais rettangolare con vettori di base $\mathbf{a}_1=(a,0)$ e $\mathbf{a}_2=(0,b)$, con $a=2\text{\AA}$ e $b=2a$. Dare i vettori di base \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 del reticolo reciproco (con i moduli in cm^{-1}) e disegnare la prima zona di Brillouin.
2. Considerare il caso di elettroni liberi, dare l'espressione generale del raggio della "sfera" (o meglio, "cerchio") nel caso 2D di Fermi in funzione della densità degli elettroni, e poi calcolarne esplicitamente il valore numerico nel caso presente, in cui ci sia un elettrone per cella base.
3. Riportare nello stesso plot della prima zona di Brillouin sul piano (k_x, k_y) questa "sfera" di Fermi corrispondente al caso di elettroni liberi, esprimendo chiaramente se è tutta interna o meno alla zona di Brillouin suddetta. In caso negativo, fare uno schizzo di dove e come sarebbe modificata in presenza di un debole potenziale periodico e fare lo schizzo di una eventuale seconda banda riportata dentro la prima zona di Brillouin.

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. Scrivere l'espressione esplicita per la banda. (si ponga per semplificare la scrittura $E_s + \beta \equiv E_0$, sempre facendo riferimento al testo per la definizione di β)
2. Considerare $t' = -t$ e fare un grafico della banda nella prima zona di Brillouin, specificando i punti particolari.
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) .