$\boxed{\text{Es. 1}}$ 15/11/2019

Esercizio 1: *Modello di Sommerfeld*

1. Scrivere l'espressione della densità di stati $g(E)$ in 1D in termini dei parametri n e E_F (oltre che della variabile E, ovviamente), in modo analogo al caso 3D (eq. [2.63] del libro di testo Ashcroft - Mermin).
2. Scrivere l'espressione esplicita della variazione relativa con la temperatura del potenziale chimico $\mu(T)$ rispetto al valore $\mu(T=0)$ in termini di E_F (oltre che della variabile T, ovviamente) nei casi 1D e 3D, e dimostrare che è uguale ma di segno opposto.
3. Quanto varia in percentuale $\mu(T)$ rispetto al valore $\mu(T=0)$ se T aumenta fino ad un valore pari al 20% di T_F?
4. Un metallo, i cui elettroni sono descrivibili con il modello di Sommerfeld 3D, ha un calore specifico c_v=1879 erg cm^{-3} K^{-1} a T=3K. Ai fini di calcolare la sua densità elettronica, si derivi l'espressione della densità elettronica in termini del calore specifico e della temperatura.
5. Calcolare numericamente la densità elettronica [costanti utili: $\hbar$= $1.05459\cdot10^{-27}$ erg s; m = $9.1095\cdot10^{-28}$ g; k_B=$1.3807\cdot10^{-16}$ erg K^{-1}]

1) A&M. eq 2.63: $\quad g^{3D}(\mathcal{E}) = \frac{3}{2}\frac{n}{\mathcal{E}_F}\left(\frac{\mathcal{E}}{\mathcal{E}_F}\right)^{1/2} \quad \to 1D?$

$$n^{1D} = 2\,\frac{2k_F}{2\pi} = \frac{2}{\pi}\sqrt{\frac{2m\mathcal{E}_F}{\hbar^2}}$$

$$g^{1D} = \frac{dn}{d\mathcal{E}} = \frac{\cancel{2}}{\pi}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\,\frac{1}{\cancel{2}}\,\frac{1}{\sqrt{\mathcal{E}}} \quad (*)$$

$$g^{1D}(\mathcal{E}) = \underset{?}{A}\,\frac{n}{\mathcal{E}_F}\left(\frac{\mathcal{E}_F}{\mathcal{E}}\right)^{1/2}$$ in analogia alla 2.63 e considerando la dipendenza da $\mathcal{E}$

$$\Rightarrow A\,\frac{2}{\pi}\sqrt{\frac{2m\cancel{\mathcal{E}_F}}{\hbar^2}}\,\frac{1}{\cancel{\mathcal{E}_F}}\left(\frac{\cancel{\mathcal{E}_F}}{\mathcal{E}}\right)^{1/2} = A\,\frac{2}{\pi}\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}}\,\frac{1}{\mathcal{E}} \quad (**)$$

Cfr (*) con (**): $A=\frac{1}{2} \Rightarrow \boxed{g^{1D}(\mathcal{E}; n, \mathcal{E}_F) = \frac{1}{2}\frac{n}{\mathcal{E}_F}\left(\frac{\mathcal{E}_F}{\mathcal{E}}\right)^{1/2}}$

2) A&M. eq. 2.77: $\quad \mu(T) = \mathcal{E}_F - \frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\frac{g'(\mathcal{E}_F)}{g(\mathcal{E}_F)}$

$$\Rightarrow \frac{\Delta\mu(T)}{\mu(0)} = \frac{\mu(T)-\mathcal{E}_F}{\mathcal{E}_F} = -\frac{\pi^2}{6}(k_BT)^2\frac{g'(\mathcal{E}_F)}{g(\mathcal{E}_F)}\frac{1}{\mathcal{E}_F}$$

Ricordo: $f(x) = Ax^\alpha \Rightarrow \frac{f'(x)}{f(x)} = \frac{\alpha}{x}$, quindi $\frac{g'(\mathcal{E}_F)}{g(\mathcal{E}_F)} = \pm\frac{1}{2}\frac{1}{\mathcal{E}_F}$ ($+ \to$ 3D, $- \to$ 1D)

$$\Rightarrow \boxed{\frac{\Delta\mu}{\mu} = (\pm)^{1D}_{3D} \frac{\pi^2}{12}\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2}$$

3) $k_B T = 20\% \underbrace{k_B T_F}_{=\varepsilon_F} \rightarrow \frac{\Delta\mu}{\mu} = ?\,\%$

$$\Downarrow$$

$$\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right)^2 = \left(\frac{1}{5}\right)^2 \Rightarrow \frac{\Delta\mu}{\mu} = \pm\frac{\pi^2}{12}\cdot\frac{1}{25} \cong \boxed{3.3\%}$$

4) $c_v^{3D} = 1879 \text{ erg cm}^{-3} K^{-1}$ per $T = 3K$

$n = n(c_v, T) = ?$

$c_v^{3D} = \frac{\pi^2}{2}\left(\frac{k_B T}{\varepsilon_F}\right) n k_B$ (A&M, 2.81)

$\varepsilon_F \xleftrightarrow{?} n \quad k_F^3 = 3\pi^2 n \rightarrow \varepsilon_F = \frac{\hbar^2}{2m}(3\pi^2 n)^{2/3}$

$$c_v^{3D} = \frac{\pi^2}{\cancel{2}} \frac{k_B T \cdot \cancel{2} m\, n\, k_B}{\hbar^2 (3\pi^2 n)^{2/3}} = \frac{m}{\hbar^2}\left(\frac{\pi}{3}\right)^{2/3} k_B^2 T\, n^{1/3}$$

Invertendo:

$$\boxed{n = \hbar^6 c_v^3 \left(\frac{3}{\pi}\right)^2 \frac{1}{m^3 k_B^6 T^3}}$$

5) $$n = \frac{(1{,}05\cdot 10^{-27}\,\text{erg}\cdot s)^6 \cdot (1879 \text{ erg cm}^{-3} K^{-1})^3 \left(\frac{3}{\pi}\right)^2}{(9.11\cdot 10^{-28}\, g)^3 (1.38\cdot 10^{-16}\,\text{erg } K^{-1})^6\, 27\, K^3}$$

$$\frac{s^6\, \text{erg}^3\, \text{cm}^{-9}}{g^3} = \frac{\cancel{s^6}\, \cancel{g^3}\, \text{cm}^6\, \text{cm}^{-9}}{\cancel{g^3}\, \cancel{s^6}} = \text{cm}^{-3} \quad \text{OK}$$

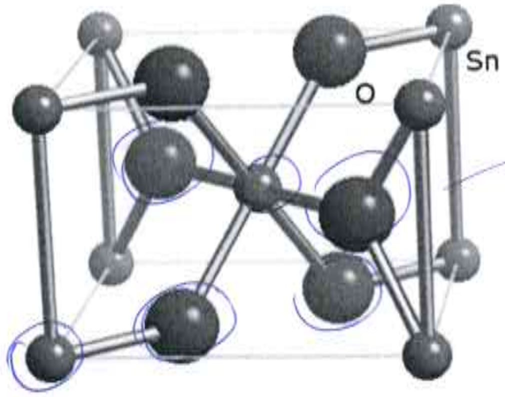
$$\underset{[E]}{1\ \text{erg}} = \underset{[F][L]}{\frac{g\, \text{cm}^2}{s^2}} = \frac{[M][L]}{[T]^2}$$

$$= \left(\frac{3}{\pi}\right)^2 \frac{1.05^6 \cdot 1879^3 \left(\frac{3}{\pi}\right)^2 \cdot 10^{\overbrace{-27\cdot 6}^{=162}}}{9.11^3 \cdot 1.38^6 \cdot 27 \cdot \underbrace{10^{-28\cdot 3} \cdot 10^{-16\cdot 6}}_{=10^{-180}}} \text{cm}^{-3} \quad = 10^{18}$$

$$= \frac{9 \cdot 8.89 \cdot 10^9 \cdot 10^{18}}{\pi^2 \cdot 1.41 \cdot 10^5} \text{cm}^{-3} = \boxed{5.75 \cdot 10^{22}\, \text{cm}^{-3}}$$

$(\approx Ag)$

Esercizio 2: *Reticoli cristallini*



faccia quadrata

È qui raffigurata una cella unitaria della struttura *rutile*, ad es. per il composto con Sn e O.

1. Qual è la composizione del solido? (Sn_mO_n con m=1 , n=2 qui si chiede la formula chimica, NON il numero di atomi della cella unitaria)
2. A che tipo di reticolo di Bravais corrisponde la cella convenzionale raffigurata ? Tetrag
3. Quanti atomi di base contiene? Indicarli in figura. 6
4. Qual è il numero di coordinazione degli atomi di Sn? 6 (v. ad es quello centrale)
5. La cella raffigurata è la cella primitiva o no?

(Sì.) Potrebbe venire il dubbio che sia doppia, però facendo la traslazione da 1 Sn all'altro si vede che gli atomi intorno cambiano orientaz., quindi una cella con 1 solo Sn non può essere ~~(unitaria)~~ primitiva.

Esercizio 3: *Funzioni di Bloch*

1. Considerare una funzione di singolo elettrone così scritta:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}\psi(\mathbf{r}-\mathbf{R}),$$

   dove $\{\mathbf{R}\}$ corre sui siti del reticolo di Bravais, e $\psi(\mathbf{r})$ è un singolo orbitale atomico. Verificare se questa funzione è una funzione di Bloch o meno, giustificando la risposta.

2. Analogamente, stessa domanda nel caso in cui $\psi(\mathbf{r})$ sia invece una sovrapposizione di orbitali atomici: $\psi(\mathbf{r}) = \sum_n c_n\phi_n(\mathbf{r})$

1) $$\Psi_{\bar{k}}(\bar{r}+\bar{R}) = \sum_{\bar{R}'} e^{i\bar{k}\bar{R}'}\psi(\bar{r}+\bar{R}-\bar{R}') \quad ; \quad \bar{R}'' \equiv \bar{R}'-\bar{R}$$
$$= \sum_{\bar{R}''} e^{i\bar{k}(\bar{R}''+\bar{R})}\psi(\bar{r}-\bar{R}'')$$
$$= e^{i\bar{k}\bar{R}}\sum_{R''} e^{i\bar{k}\bar{R}''}\psi(\bar{r}-\bar{R}'') \quad \text{c.v.d.}$$

è fz di Bloch

2) $$\Psi_{\bar{k}}(\bar{r}+\bar{R}) = \sum_{R}\sum_{n} e^{i\bar{k}\bar{R}'} c_n\phi_n(\bar{r}+\bar{R}-\bar{R}')$$
$$= \sum_{R''}\sum_{n} e^{i\bar{k}(\bar{R}''+\bar{R})} c_n\phi_n(\vec{r}-\vec{R}'')$$
$$= e^{i\bar{k}\bar{R}}\sum_{R''}\sum_{n} e^{i\vec{k}\vec{R}''} c_n\phi_n(\vec{r}-\vec{R}'')$$

è fz di Bloch