

Fisica della Materia Condensata I
prova finale a.a. 2020/21
15 giugno 2021

NOTA:

Dare tutti i passaggi necessari per comprendere il procedimento con cui si è arrivati alla soluzione. Se si usano formule note, indicare da dove si parte. Risposte con il risultato finale solo o con dettagli insufficienti non saranno considerate valide.

Esercizio 1: Reticoli cristallini

Considerare un cristallo 3D formato da atomi di Zn e di Cu. Gli atomi di Cu formano un reticolo cubico semplice con passo reticolare a . Gli atomi di Zn sono al centro del cubo descritto dagli atomi Cu ai vertici.

1. Qual è il reticolo di Bravais e quali sono i possibili vettori primitivi $\{\mathbf{a}_i\}$?
2. Quali sono i vettori primitivi $\{\mathbf{b}_j\}$ del reticolo reciproco?
3. Scrivere il fattore di struttura $S_{\mathbf{G}}$ associato al vettore di reticolo reciproco $\mathbf{G} = \nu_1 \mathbf{b}_1 + \nu_2 \mathbf{b}_2 + \nu_3 \mathbf{b}_3$ in termini dei fattori di forma atomici f_{Zn} e f_{Cu} .
4. Se gli atomi Cu e Zn occupassero a caso tutti i siti del reticolo, allora il fattore di forma associato ad ogni sito potrebbe essere assunto essere lo stesso, e in particolare pari al valor medio dei due fattori di forma atomici f_{Zn} e f_{Cu} . In tal caso, rispetto alla situazione ordinata di prima, si annullerebbero alcuni dei picchi di Bragg (cioè: corrispondenti a quali vettori di reticolo reciproco \mathbf{G}) ? Se sì, quali?
5. Quale reticolo formerebbero i vettori \mathbf{G} corrispondenti a picchi di Bragg non nulli? Commentare il risultato ottenuto.

Esercizio 2: *Gas di Fermi*

Considerare un gas di Fermi in due dimensioni con N fermioni, confinato in un quadrato di area $A = L^2$

1. Trovare l'energia di Fermi E_F (in termini di N e di A) e mostrare che l'energia media per fermione è $E_F/2$.
2. Considerare un gas di elettroni 2D con la densità di $1.5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$. Esprimere questa densità in unità atomiche (energia in Hartree, lunghezza in raggi di Bohr).
3. Qual è l'energia di Fermi per questo gas di elettroni 2D in unità atomiche e in eV ?

Esercizio 3: *Bande elettroniche - I - modello di "reticolo vuoto"*

1. Determinare l'espressione generale delle bande energetiche di elettrone libero relative a un reticolo quadrato di lato a . Rappresentare nello schema di zona ridotta ($\pi/a < k < \pi/a$) le prime 5 bande lungo la direzione $[1,0]$.

Esercizio 4: *Bande elettroniche - II - metodo "tight binding"*

Si consideri un reticolo FCC e le relative bande che hanno origine da orbitali atomici di tipo s .

1. Calcolare l'espressione dell'energia $\epsilon(\mathbf{k})$ nello schema "tight-binding" considerando solo il contributo degli atomi primi vicini. Si trascuri la dipendenza di $\epsilon(\mathbf{k})$ dall'integrale di overlap. Tracciare, al variare di \mathbf{k} , l'andamento della banda energetica in direzione $(k_x, k_y, k_z) = (1, 1, 1)$, cioè nella direzione $\Gamma - L$.