

## Elettroni nei Cristalli – esame finale

A.A. 2007/2008, 10 dicembre 2007

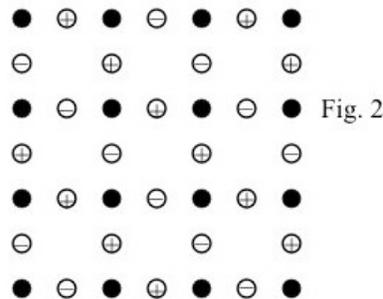
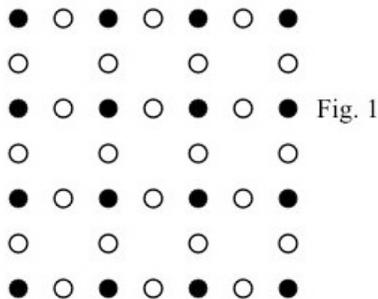
(tempo 3 ore)

- 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;

### Esercizio 1: Reticoli di Bravais con base

Sono interessanti per le proprietà di superconduttività alcuni materiali fatti da layers di  $\text{CuO}_2$ , 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  $f_{\text{Cu}} = 2f_{\text{O}}$ , 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, bande

Considerare un reticolo di Bravais bidimensionale quadrato con passo reticolare  $a$ .

1. Considerare il caso di **elettroni liberi**, dare l'espressione del raggio  $k_F$  della "sfera" (o meglio, "cerchio" nel caso 2D) di Fermi in funzione della densità degli elettroni e poi calcolarne esplicitamente il valore nei casi in cui ci siano uno o due elettroni per cella base rispettivamente.
2. Disegnare la superficie di Fermi nel piano  $(k_x, k_y)$  nei due casi.
3. Detto  $\mathbf{X} = \frac{\pi}{a}(1, 0)$ , dare l'espressione esplicita e disegnare le prime 5 bande  $E(\mathbf{k})$  (con energia fino a  $E = 9 E(X)$ ) lungo la linea  $\Gamma \rightarrow \mathbf{X}$ .
4. Considerare ora l'effetto di un **debole potenziale periodico** (periodicità quella del reticolo). Dire se nei due casi, cioè con uno o due elettroni per cella, il sistema è metallico o meno, giustificando la risposta.
5. Considerare ora invece un modello **tight-binding** sullo stesso reticolo, con orbitali  $s$ . Scrivere l'espressione di  $E(\mathbf{k})$  considerando solo interazione a primi vicini e trascurando l'overlap.
6. Dire se nei due casi, cioè con uno o due elettroni per cella, il sistema è metallico o meno, giustificando la risposta.

### Esercizio 3: Modello semiclassico per la dinamica dell'elettrone

Considerare un solido 3D con relazione di dispersione  $E(\mathbf{K}) = -2t[\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)]$ , con  $t > 0$ ,  $a$  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  $E(\mathbf{k}) = E^* = -2t$  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.