

**Fisica della Materia Condensata I**  
**I appello sessione estiva a.a. 2021/22**  
**13 giugno 2022**  
(Tempo: 2h30')

**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: Gas di elettroni - modello di Sommerfeld**

- Al centro del sole, la temperatura è dell'ordine di  $10^7$  K e la concentrazione di elettroni è circa  $10^{32} \text{ m}^{-3}$ . Questi elettroni si possono descrivere:
  - come un gas "classico" (Boltzmann),
  - come un gas di Fermi degenerare (con  $T \ll T_F$ ),o nessuno dei casi precedenti è adeguato?  
Giustificare le risposte alle domande i) e ii) *in modo quantitativo*, servendosi di stime di quantità rilevanti.
  - si esclude perchè: dovrebbe essere  $r_s \gg \left(\frac{\hbar^2}{8mk_B T}\right)^{1/2}$  (v. (2.106) in A.&M.) ma risulta  $r_s \approx 2.4 \cdot 10^{-33} \text{ m}$  mentre  $\left(\frac{\hbar^2}{8mk_B T}\right)^{1/2} \approx 6.6 \cdot 10^{-12} \text{ m}$
  - si esclude perchè:  $T_F = \frac{E_F}{k_B} = \frac{\hbar^2}{8mk_B} \left(\frac{3n}{\pi}\right)^{2/3} \approx 9.12 \cdot 10^6 \text{ K}$  che quindi è simile a  $T_F$   
Nessuna delle due trattazioni è adeguata; il motivo sostanziale è l'altissima densità elettronica a fronte di una temperatura comparativamente non sufficientemente alta.

**Esercizio 2: Elettroni di Bloch**

- Se la relazione di dispersione dell'energia in funzione del vettore d'onda  $k$  per un elettrone in un materiale è  $\mathcal{E}(k) = \mathcal{E}_0 + 2A \cos(ka)$ , determinare la posizione dell'elettrone in funzione del tempo nel caso di un campo elettrico esterno applicato  $E$  uniforme e costante, senza considerare fenomeni di scattering. Si può porre  $k(t=0) = 0$  senza perdita di generalità.  
 $x(t) = \frac{2A}{eE} \left( \cos\left(-\frac{eEa}{\hbar}t\right) - 1 \right)$
- Qual è il periodo delle oscillazioni di Bloch per gli elettroni di cui al punto precedente?  
 $\tau = \frac{\hbar}{aeE}$

**Esercizio 3: Strutture cristalline**

Considerare un cristallo 3D formato da una lega Cu e Zn. Gli atomi di Cu formano un reticolo SC con passo reticolare  $a$ . Gli atomi di Zn sono al centro dei cubi.

1. Descrivere il reticolo cristallino (reticolo di Bravais che ad esso sottende e suoi vettori primitivi; cella unitaria elementare; numero di atomi che costituiscono la base interna alla cella unitaria e loro coordinate).  
 SC descritto da:  $\mathbf{a}_1 = a(100)$ ,  $\mathbf{a}_2 = a(010)$ ,  $\mathbf{a}_3 = a(001)$ ;  
 cella unitaria elementare: cubo di lato  $a$  con 2 atomi:  $\mathbf{d}_1 = a(000)$ ,  $\mathbf{d}_2 = a/2(111)$
2. Quali sono i vettori di reticolo reciproco?  $\mathbf{b}_1 = 2\pi/a(100)$ ,  $\mathbf{b}_2 = 2\pi/a(010)$ ,  $\mathbf{b}_3 = 2\pi/a(001)$
3. Scrivere il fattore di struttura associato ai vettori  $\mathbf{G}$  di reticolo reciproco in termini dei fattori di forma atomici  $f_{Cu}$  e  $f_{Zn}$ .  
 $S(\mathbf{G}) = f_1 + f_2 e^{i\pi(\nu_1+\nu_2+\nu_3)}$  avendo indicato con  $\nu_1, \nu_2, \nu_3$  i coefficienti della combinazione lineare con cui si scrive  $\mathbf{G}$  sulla base del reticolo reciproco del SC:  $\mathbf{G} = 2\pi/a(\nu_1, \nu_2, \nu_3)$
4. Se gli atomi di Zn e Cu occupano casualmente i siti del reticolo, si può approssimativamente considerare di avere diffrazione dal reticolo con un unico tipo di atomi con fattore di forma atomica medio tra i due. In quel caso, scompaiono alcuni spot di Bragg? se sì, quali? Si ha:  $S(\mathbf{G}) = \bar{f} (1 + e^{i\pi(\nu_1+\nu_2+\nu_3)})$  con  $\bar{f} = (f_1 + f_2)/2$ .  
 Scompaiono gli spot corrispondenti a  $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3 = \text{dispari}$  e ciò corrisponde alla diffrazione da un reticolo BCC.

#### Esercizio 4: Tight binding

Per un reticolo SC (passo reticolare  $a$ ) L'espressione dell'energia nell'approssimazione tight-binding è  $\epsilon(\mathbf{k}) = \epsilon_0 - \alpha - 2\gamma(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$   $\alpha, \gamma$  integrali di hopping.

1. Espandere l'energia  $\epsilon(\mathbf{k})$  attorno al minimo della banda (cioè vicino al punto  $\Gamma$ ,  $\mathbf{k}=0$ ) dove  $ka \ll 1$  al second'ordine in  $k$  ( $k=|\mathbf{k}|$ ). Per semplicità si può esprimere  $\epsilon_\Gamma = \epsilon_0 - \alpha - 6\gamma$  e  $m_e^* = \hbar^2 \left( \frac{\partial^2 \epsilon}{\partial k^2} \right)^{-1}$  (massa efficace) e usare  $\epsilon_\Gamma$  e  $m_e^*$  nell'espressione dell'energia.  
 $\epsilon(\mathbf{k} \approx \Gamma) \approx \epsilon_\Gamma + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e^*}$  (eq. 1) con  $\gamma = \frac{\hbar^2}{2m_e^* a^2}$
2. Espandere l'energia  $\epsilon(\mathbf{k})$  attorno al punto W ( $k_x = k_y = k_z = \pi/a$ ) in termini di  $\delta k = |\delta \mathbf{k}|$ ,  $\delta k \ll 1$ , dove  $k_i = \pi/a - \delta k_i$ ,  $i = x, y, z$ . Anche in questo caso dare il risultato utilizzando  $\epsilon_\Gamma$  e  $m_e^*$  sopra definiti.  
 $\epsilon(\mathbf{k} \approx W) \approx \epsilon_\Gamma + 12\gamma - \frac{\hbar^2 \delta k^2}{2m_e^*} = \epsilon_\Gamma + \frac{\hbar^2}{2m_e^*} \left( \frac{12}{a^2} - \delta k^2 \right)$
3. Fare un grafico di  $\epsilon(\mathbf{k})$  lungo la linea di alta simmetria  $\Gamma W$  assieme a quello per elettroni liberi, considerando per questi ultimi:  $\epsilon_{free}(\mathbf{k}) = \epsilon_\Gamma + E_0(k)$  e  $E_0(k) = \hbar^2 k^2 / (2m_e)$ . Porre  $\gamma = (1/6)$  eV e  $m_e^* = 1.1m_e$ . Come si comparano le due curve?  
 Definiamo:  $\mathbf{k} \in \Gamma W = \frac{\pi}{a}\xi(111)$  con:  $0 \leq \xi \leq 1$ ;  
 $\epsilon(\mathbf{k} \in \Gamma W) = \epsilon_0 - \alpha - 6\gamma \cos \pi\xi = \epsilon_\Gamma + 6\gamma(1 - \cos \pi\xi) = \epsilon_\Gamma + \frac{6}{a^2} \frac{\hbar^2}{2m_e^*} (1 - \cos \pi\xi)$ ;  
 $\epsilon_{free}(\mathbf{k} \in \Gamma W) = \epsilon_\Gamma + \frac{3\pi^2}{a^2} \frac{\hbar^2}{2m} \xi^2$   
 Per fare il grafico è utile osservare che:  $\epsilon_{free}(\mathbf{k} \in \Gamma W) > \epsilon(\mathbf{k} \in \Gamma W)$  (eq. 2) cioè  $\frac{3\pi^2}{a^2} \frac{\hbar^2}{2m} \xi^2 > \frac{6}{a^2} \frac{\hbar^2}{2m_e^*} (1 - \cos \pi\xi)$  o  $\frac{\pi^2}{2} \frac{m_e^*}{m} \xi^2 > 1 - \cos \pi\xi$  da cui si evince che per verificare questa condizione non serve conoscere il valore di  $\gamma$ . Pur essendo (\*) una disequazione trascendente, la si può controllare per punti per  $\xi = 0, 1/2$  e confrontando l'espressione di  $\epsilon_{free}(\mathbf{k})$  con lo sviluppo di  $\epsilon(\mathbf{k})$  attorno a  $\Gamma$ .

