

Elettroni nei Cristalli – esame finale

A.A. 2007/2008, 3 aprile 2008

(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: Elettroni liberi

Considerare nel modello di elettroni liberi l'espressione del vettore d'onda di Fermi in funzione della densità elettronica n .

1. Mostrare che la sfera di Fermi tocca le facce della prima zona di Brillouin (IBz) in un reticolo fcc quando il numero medio di elettroni di valenza per atomo è $\langle Z \rangle = n/n_a = 1.36$, con n_a la densità atomica.
2. Il rame ha struttura fcc. Supponiamo che alcuni atomi di Cu (monovalenti) vengano sostituiti da atomi di Zn (bivalente): per concentrazioni di Zn fino a 36% la lega che si forma (ottone) mantiene la struttura fcc. A quale concentrazione di Zn la superficie di Fermi tocca le facce della IBz ?
- 3.

Esercizio 2: Modello tight binding

1. Usando l'espressione per la velocità elettronica in un cristallo 1D nel modello *tight binding*, mostrare che la velocità è nulla al centro e ai bordi della zona di Brillouin (Bz).
2. Considerare ora un reticolo 3D cubico semplice, e mostrare che la velocità elettronica ad una faccia della Bz è parallela a quella faccia.

$$E(k) = E_0 + 4\gamma \left[\sin^2 \left(\frac{k_x a}{2} \right) + \sin^2 \left(\frac{k_y a}{2} \right) + \sin^2 \left(\frac{k_z a}{2} \right) \right]$$

3. Tornando al caso 1D, mostrare che ha senso calcolare la massa efficace m^* al centro e nei bordi della BZ, e darne il valore.

Esercizio 2: *Diffrazione*

1. Sia $a_0=2.62 \text{ \AA}$ la costante reticolare di un cristallo cubico. Determinare l'angolo di Bragg corrispondente alla riflessione dai piani (100), (110), (111), (200) e (211), per una lunghezza d'onda del fascio incidente $\lambda=1.54 \text{ \AA}$.
2. Sapendo che con per la medesima lunghezza d'onda l'angolo di riflessione di Bragg dai piani (110) nel Fe con struttura bcc è di 22° , calcolare il passo reticolare del Fe.
3. Calcolare il fattore di forma atomico per un atomo con Z elettroni di valenza supponendo che questi siano uniformemente distribuiti all'interno di una sfera di raggio R .

Esercizio 5: *Diffrazione da catena lineare biatomica*

Si consideri una catena di atomi ABABA...AB, con una lunghezza di legame AB pari a $a/2$. I fattori di forma sono f_A e f_B rispettivamente per gli atomi A e B. Il fascio di raggi X incidente è perpendicolare alla catena di atomi.

1. Dimostrare che la condizione di interferenza costruttiva è $n\lambda = a \cos \theta$, dove θ è l'angolo tra il fascio diffratto e la catena di atomi.
2. Dimostrare che l'intensità del fascio diffratto è proporzionale a $|f_A - f_B|^2$ per n dispari e $|f_A + f_B|^2$ per n pari.
3. Spiegare cosa avviene per $f_A = f_B$

Esercizio 6: *Elettroni quasi liberi*

Si consideri un reticolo quadrato 2D con un debole potenziale cristallino:

$$U(x, y) = -4U \cos(2\pi x/a) \cos(2\pi y/a)$$

1. Nell'approssimazione di elettroni quasi liberi e in uno schema a due livelli (livelli vicini a un singolo piano di Bragg), trovare il gap di energia che separa i primi due livelli altrimenti degeneri nello spigolo $(\pi/a, \pi/a)$ della zona di Brillouin. (*Fare uso, spiegando, della opportuna formula; non si chiede di ricavarla, essendo già questo fatto sul testo AEM*)

Esercizio 3: *Strutture cristalline*

1. Determinare quali piani cristallini hanno la più alta densità atomica nelle strutture fcc e bcc, motivando la risposta.
2. Sapendo che Cu ha struttura fcc con passo reticolare (lato della cella cubica) $a_0=3.61$ Å, e Fe ha struttura bcc con $a_0=2.86$ Å, calcolare tali densità atomiche nei due casi specifici.
- 3.