

Fisica della Materia Condensata I - esame finale

A.A. 2016/17, 12 giugno 2017

(tempo 3 ore)

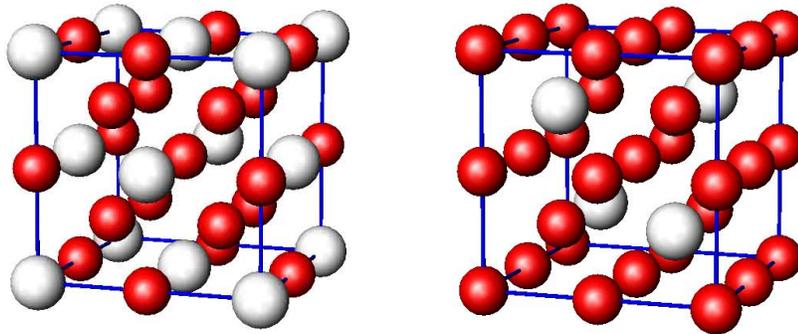
- Si diano tutti i passaggi necessari a capire in dettaglio il procedimento di soluzione. Risposte con il solo risultato o dettagli insufficienti non saranno considerate;
- se richieste, si diano le valutazioni (numeriche) con 3 cifre significative.

Esercizio 1: Leghe metalliche e modello a elettroni liberi

In condizioni normali di temperatura e pressione il Ferro ha struttura cristallina BCC, mentre l'Alluminio ha struttura FCC. Considerare il modello di elettroni liberi.

1. Quanti sono gli elettroni di valenza per il Fe e per l'Al? Sapendo che i passi reticolari di Fe e Al nelle loro rispettive strutture cristalline sono 287 e 405 pm, calcolare le energie di Fermi.

La lega Fe_3Al ha struttura descritta nelle figure.



- 2 (i) come sono indicati gli atomi di Fe e di Al rispettivamente?
(ii) Quale reticolo formano gli atomi di Al?
(iii) qual è il reticolo di Bravais della lega nel suo insieme?
(iv) le due strutture sono equivalenti o no? se sì, che relazione c'è fra di esse? (se sono legate da un'operazione di traslazione, indicare i vettori che la descrivono, con riferimento ad un sistema di assi cartesiani lungo gli spigoli dei cubi e indicando con $2a$ il lato dei cubi).
(v) le due figure rappresentano una cella primitiva elementare per la lega o no? quanti atomi sono contenuti? Scrivere i vettori di reticolo diretto e i vettori degli atomi di base (nel caso si sia risposto positivamente al punto 2.iv, basta considerare una delle due figure)
(vi) Qual è il reticolo reciproco di questa lega BCC? Scrivere i suoi vettori di base.
- 3 Considerare il modello di elettroni liberi anche nel caso della lega.
(i) Esprimere il raggio della sfera di Fermi in funzione della densità elettronica media n della lega, espressa in funzione di a .
(ii) la sfera di Fermi è contenuta tutta dentro la prima zona di Brillouin o no?
(iii) Cosa si può concludere dall'ultima risposta?

Esercizio 2: *Modello tight binding*

1. Scrivere l'espressione per la dispersione delle bande di energia in un cristallo 1D nel modello *tight binding*, nell'approssimazione di interazione con i primi vicini e trascurando gli integrali di overlap. Si indichi con a il passo reticolare.
2. Mostrare che la velocità è nulla al centro e ai bordi della zona di Brillouin (Bz).
3. Calcolare negli stessi punti la massa efficace m^* .
4. Considerare ora un reticolo 3D cubico semplice, e scrivere l'espressione per la dispersione delle bande di energia nelle stesse approssimazioni del caso 1D.
5. Mostrare che la velocità elettronica ad una faccia della Bz è parallela a quella faccia.
6. Tornando al caso 1D, mostrare che ha senso calcolare la massa efficace m^* al centro e nei bordi della BZ, e darne il valore.