

Fisica della Materia Condensata I – esame finale

A.A. 2017-18, 3 Settembre 2018

(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: Elettroni liberi

Considerare un solido cristallino con struttura cubica a facce centrate (fcc), e, pur in presenza del reticolo di ioni, trattare gli elettroni con il modello di Sommerfeld. E' utile ricordare in particolare la relazione tra vettore d'onda di Fermi e densità elettronica.

1. Mostrare che la sfera di Fermi è completamente contenuta nella prima zona di Brillouin (I Bz) quando il numero medio di elettroni di valenza per atomo è $\langle Z \rangle = 1.36$.
2. La lega (ottone) fatta da Cu (monovalente) e Zn (bivalente), ha struttura fcc per concentrazioni di Zn fino a 36%. A quale concentrazione di Zn la superficie di Fermi tocca le facce della I Bz?

Esercizio 2: Modello tight binding

1. Considerare un cristallo 1D nel modello *tight binding*, con interazioni solo tra primi vicini e trascurando l'overlap. Scrivere l'espressione dell'energia in funzione del vettore d'onda.
2. Calcolare la velocità elettronica e mostrare che è nulla al centro e ai bordi della zona di Brillouin (Bz).
3. Calcolare la massa efficace m^* al centro e nei bordi della BZ, e darne il valore.
4. Considerare ora un reticolo 3D cubico semplice, e mostrare che l'energia in funzione del vettore d'onda può essere scritta come:

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

5. Mostrare che la velocità elettronica in corrispondenza di un vettore d'onda giacente su una faccia della Bz è parallela a quella faccia.

Esercizio 3: *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 4: *Reticoli cristallini con base*

Osservare le seguenti figure di reticoli cristallini, dove colori diversi indicano atomi diversi. Per ciascuna figura, dire

1. di che tipo di reticolo di Bravais si tratta, di quanti atomi è costituita la base, e scrivere i vettori primitivi e i vettori degli atomi costituenti la base.

