

Fisica della Materia Condensata I – esame finale

A.A. 2017-18, 20 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: Reticoli 2D e 3D

1. Un'ipotetica sostanza monoatomica cristallizza in una struttura tetragonale centrata. La cella unitaria convenzionale può essere descritta dai vettori primitivi $(a, 0, 0)$, $(0, a, 0)$, $(0, 0, c)$ con $c = 3a / 2$ e una base costituita da due atomi in posizioni $(0, 0, 0)$ e $(a / 2, a / 2, c / 2)$. Scrivere i vettori primitivi del reticolo reciproco in funzione di a .
2. Calcolare la frazione di impacchettamento.
3. Passando ora a casi 2D, trovare la frazione di impacchettamento per i reticoli quadrato ed esagonale.

Esercizio 2: Elettroni liberi

1. Il rame ha una densità di massa $\rho_m = 8.95 \text{ g / cm}^3$ e resistività elettrica $\rho = 1.55 \times 10^{-8} \text{ ohm} \cdot \text{m}$ a temperatura ambiente. Supponendo che la massa effettiva degli elettroni nel rame sia pari a quella degli elettroni liberi, m_0 , calcolare:
 - La densità degli elettroni di conduzione
 - L'energia di Fermi E_F e la velocità di Fermi v_F
2. Stimare la frazione di elettroni eccitati al di sopra del livello di Fermi a temperatura ambiente per Cu e Na, tenendo conto che la massa effettiva degli elettroni nel Na è $1.2 m_0$.

Esercizio 3: *Elettroni in un potenziale periodico debole*

Supponiamo che il potenziale cristallino nel reticolo unidimensionale con passo reticolare a sia composto da una serie di pozzi rettangolari centrati sugli atomi. Sia V_0 la profondità di ciascun pozzo e $a/5$ la sua larghezza.

1. Utilizzando il modello di potenziale periodico debole, calcolare i valori dei primi tre gap di energia e confrontare la loro grandezza.
2. Calcolarne i valori nel caso specifico $V_0 = 5$ eV e passo reticolare $a = 4$ Å.
3. Si consideri ora un caso 2D con una cella unitaria quadrata (costante reticolare a). Determinare le superfici di Fermi per i casi di 1, 2, 3 e 5 elettroni per cella unitaria. Tracciare le superfici di Fermi nella zona di Brillouin, indicando l'effetto del potenziale debole. Potrebbe essere utile creare grafici separati nelle diverse zone di Brillouin. (*Nota: si suggerisce di determinare la superficie di Fermi rispetto alla prima zona di Brillouin e poi considerare le diverse zone; si richiedono grafici semiquantitativi*)

Esercizio 4: *Approccio "tight-binding"*

Si consideri un sistema di elettroni unidimensionale con passo reticolare a nel modello "tight-binding". Sia: $E(k) = -2t \cos(ka)$, con $t > 0$.

1. Calcolare la densità elettronica degli stati $D(E)$.
2. Discutere se ci sono singolarità van-Hove e le loro caratteristiche in termini di divergenze di $D(E)$ e della derivata.