

**Fisica della Materia Condensata I**  
**prova finale a.a. 2023/24**  
**5 febbraio 2024**

(Tempo: 2h 30')

**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: Elettroni nel modello di Sommerfeld**

1. Dimostrare che nel modello di Sommerfeld in un campione  $d$ -dimensionale di volume  $L^d$  contenente  $N$  elettroni la densità di stati all'energia di Fermi è  $g(E_F) = \frac{d N}{2 L^d E_F}$

$$n = C k_F^d \Rightarrow k_F = \left(\frac{n}{C}\right)^{1/d}; E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{n}{C}\right)^{2/d} \Rightarrow n = C \left(\frac{2mE_F}{\hbar^2}\right)^{d/2};$$

$$g(E) = \frac{dn}{dE} = C \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{d/2} \frac{d}{2} E_F^{d/2-1} = \frac{d}{2} n \frac{1}{E_F}$$

Soluzione alternativa: partire dalla definizione di  $g(E)$  attraverso l'integrale con la funzione  $\delta(E - E(\mathbf{k}))$ ; usare il volume  $V_n(k)$  dell'ipersfera in  $k$  e la superficie dell'ipersfera  $S_n(k)$  nel cambio di variabili tra  $\mathbf{k}$  e  $E$  nell'integrale che definisce  $g(E)$ ; si ha che, essendo  $S_n(k) = \frac{dV_n(k)}{dk}$  per la formula di Minkowski-Steiner, poiché  $V_n(k) \propto k^d$ , allora  $S_n(k) = \frac{dV_n(k)}{dk} = \frac{1}{d} \frac{V_n(k)}{k}$  e se si considerano raggi unitari rimane  $S_n(k)/V_n(k) = 1/d$

2. Considerare ora il caso 2D, con  $N$  elettroni confinati in un quadrato di area  $A = L^2$ . Trovare l'energia di Fermi  $E_F$  (in termini di  $N$  e di  $A$ ) e mostrare che l'energia media per elettrone è  $E_F/2$ .  $k_F^2 = 2\pi n \Rightarrow E_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi N}{m A}$ ,  $\frac{E_{tot}}{A} = 2 \int_0^{k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} = \frac{n}{2} E_F \Rightarrow \frac{E_{tot}}{N} = \frac{E_F}{2}$
3. Considerare un gas di elettroni 2D con la densità di  $1.5 \times 10^{11} cm^{-2}$ . Esprimere questa densità in unità atomiche (energia in Hartree, lunghezza in raggi di Bohr).  $a_0 = 0.53 \cdot 10^{-8} cm \Rightarrow n = 4.2 \cdot 10^{-6} a_0^{-2}$
4. Qual è l'energia di Fermi per questo gas di elettroni 2D in unità atomiche e in eV?  $E_F = \frac{\hbar^2}{2m} k_F^2 = \frac{\hbar^2}{2m} (2\pi n) = 4.2\pi \cdot 10^{-6} Hartree = 1.32 \cdot 10^{-5} Hartree = 1.32 \cdot 10^{-5} \cdot 27.2 eV = 3.6 \cdot 10^{-4} eV$  essendo  $\hbar = m = a_0 = 1$  in u.a.

**Esercizio 2: Modello "di reticolo vuoto"**

Considerare atomi monovalenti disposti in un reticolo SC con un parametro reticolare  $a$ .

1. Calcolare l'ampiezza del vettore d'onda di Fermi ( $k_F$ ) e confrontarlo con la distanza più corta di un piano di Bragg dall'origine (la si denoti con  $k_{BZ}$ ).  
 $n = \frac{1}{a^3}; k_F^3 = 3\pi^2 n = 3\pi^2/a^3; \quad k_{BZ} = \pi/a \Rightarrow k_{BZ}^3 = \pi^3/a^3; \quad 3\pi^2 < \pi^3 \Rightarrow k_F < k_{BZ}$

2. Se  $k_F < k_{BZ}$  significa che, in termini di stati elettronici disponibili nella banda, ci sono stati vuoti disponibili fino a  $k = k_{BZ}$ . Calcolare la frazione di atomi bivalenti sostituzionali di quelli monovalenti in tale reticolo SC per ottenere  $k_F = k_{BZ}$ .

$x :=$  frazione di atomi con  $Z=2$ ;  $n = \frac{(1-x)+2x}{a^3}$ ;  $k_F = k_{BZ} \Rightarrow 3(1+x) = \pi \Rightarrow x = \frac{\pi}{3} - 1 = 0.047 \Rightarrow N(Z=2)/N(Z=1) = x/(1-x) = 0.05$

### Esercizio 3: Elettroni "relativistici" in 2D

Un materiale bidimensionale ha una relazione di dispersione "relativistica"  $E(\mathbf{k}) = \alpha|\mathbf{k}|$ . Un esempio di tale sistema è il grafene.

1. Calcolare la velocità nel modello semiclassico.  $\mathbf{v} = 1/\hbar \nabla_{\mathbf{k}} E = (\alpha/\hbar) \hat{\mathbf{k}}$
2. Calcolare la densità di stati elettronici.  $g(E) = \frac{1}{\pi} E/\alpha^2$

Si include anche la soluzione 3D perché si considera valida anche l'interpretazione di avere un problema 3D ma con gli atomi a formare un reticolo 2D

**Es. 3**  $\mathcal{E}(\mathbf{k}) = \alpha |\mathbf{k}|$  ①  $\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \mathcal{E} = \frac{\alpha}{\hbar} \hat{\mathbf{k}}$   
 $= k^2 dk \sin\theta d\varphi$

②  $g^{3D}(\mathcal{E}) = ?$   $g(\mathcal{E}) = \int d\vec{k} \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}(\mathbf{k})) = \int_{\mathcal{E}} = 4\pi$   
 $\mathcal{E} - \alpha k = 0$   
 per  $k = \mathcal{E}/\alpha$   
 ( $> 0$ )  
 $= 4\pi \int_0^{\infty} k^2 \delta(\mathcal{E} - \alpha k) dk =$   
 $= 4\pi \frac{k^2|_{k=\mathcal{E}/\alpha}}{\alpha} = \frac{4\pi}{\alpha} \frac{\mathcal{E}^2}{\alpha^2} = \frac{4\pi}{\alpha^3} \mathcal{E}^2$

$\frac{d}{dk}(\mathcal{E} - \alpha k) = -\alpha$  Check:  
 $[g(\mathcal{E})] = \left[ \frac{\mathcal{E}^2}{\alpha^3} \right] = \left[ \frac{\mathcal{E}}{\alpha} \right]^3 \frac{1}{[\mathcal{E}]} = \frac{[k]^3}{[\mathcal{E}]} = \frac{1}{[v][\mathcal{E}]}$

2bis  $g^{2D}(\mathcal{E}) = ?$   
 $g(\mathcal{E}) = 2 \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^2} \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}(\mathbf{k}))$  con  $d\vec{k} = k dk d\varphi \int = 2\pi$   
 $= \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} k \delta(\mathcal{E} - \alpha k) dk$   
 $= \frac{1}{\pi} \frac{\mathcal{E}/\alpha}{\alpha} = \frac{1}{\pi} \frac{\mathcal{E}}{\alpha^2}$  Check dimensioni:  
 $[g(\mathcal{E})] = \left[ \frac{\mathcal{E}}{\alpha^2} \right] = \left[ \frac{\mathcal{E}}{\alpha} \right]^2 \frac{1}{[\mathcal{E}]} = \frac{1}{[A][\mathcal{E}]}$

#### Esercizio 4: Reticoli cristallini

Considerare un cristallo 3D formato da atomi di Zn e di Cu. Gli atomi di Cu formano un reticolo cubico semplice con passo reticolare  $a$ . Gli atomi di Zn sono al centro del cubo descritto dagli atomi Cu ai vertici.

1. Qual è il reticolo cristallino formato? Scrivere una terna di vettori primitivi  $\{\mathbf{a}_i\}$  e quelli della base. **SC con base di 2 atomi, di cui  $d_{Cu}=(000)$  e  $d_{Zn}=a/2(111)$**
2. Quali sono i vettori primitivi  $\{\mathbf{b}_j\}$  del reticolo reciproco?  **$\mathbf{b}_1 = 2\pi/a(100)$  etc.**
3. Scrivere il fattore di struttura  $S_{\mathbf{G}}$  associato al vettore di reticolo reciproco  $\mathbf{G} = \nu_1\mathbf{b}_1 + \nu_2\mathbf{b}_2 + \nu_3\mathbf{b}_3$  in termini dei fattori di forma atomici  $f_{Zn}$  e  $f_{Cu}$ .  **$S(\mathbf{G}) = f_{Cu} + f_{Zn}(-1)^{\nu_1 + \nu_2 + \nu_3}$**
4. Se gli atomi Cu e Zn occupassero a caso tutti i siti del reticolo, allora il fattore di forma associato ad ogni sito potrebbe essere assunto essere lo stesso, e in particolare pari al valor medio dei due fattori di forma atomici  $f_{Zn}$  e  $f_{Cu}$ . In tal caso, rispetto alla situazione ordinata di prima, si annullerebbero alcuni dei picchi di Bragg (cioè: corrispondenti a quali vettori di reticolo reciproco  $\mathbf{G}$ ) ? Se sì, quali?  **$S(\mathbf{G}) = 0$  per  $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3 = 2m + 1$**
5. Quale reticolo formerebbero i vettori  $\mathbf{G}$  corrispondenti a picchi di Bragg non nulli? Commentare il risultato ottenuto.

**$S(\mathbf{G}) \neq 0$  per  $\mathbf{G} = 2\pi/a(\nu_1, \nu_2, \nu_3)$  con  $\nu_1 + \nu_2 + \nu_3 = 2m \Rightarrow$  costituiscono il reticolo reciproco di un BCC:**

$$\mathbf{G}_{BCC} = 2\pi/a(\nu'_1 + \nu'_2, \nu'_1 + \nu'_3, \nu'_2 + \nu'_3) = 2\pi/a(\nu_1, \nu_2, \nu_3) \Rightarrow 2(\nu'_1 + \nu'_2 + \nu'_3) = \nu_1 + \nu_2 + \nu_3$$