

Elettroni nei Cristalli – esame finale

A.A. 2008/2009, 21 luglio 2009

(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

1. Facendo riferimento all'espressione del vettore d'onda di Fermi k_F in funzione della densità elettronica n nel modello di elettroni liberi, 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 Al (trivalente): per concentrazioni di Al fino all'8% la lega che si forma (cuproalluminio, usata ad esempio per fare le vecchie lire) mantiene la struttura fcc. Alla concentrazione massima di Al, come è la superficie di Fermi rispetto alla IBz?

Esercizio 2: Elettroni in solidi periodici

Considerare un cristallo cubico di lato a con la seguente relazione di dispersione per le bande di energia:

$$E(k) = E_0 - \beta k^2 + \alpha k^4 + 3\alpha(k_x^2 k_y^2 + k_x^2 k_z^2 + k_y^2 k_z^2)$$

dove $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$ e i parametri α e β sono positivi.

1. Fare un disegno di $E(\mathbf{k})$ tra $\mathbf{R} \rightarrow \Gamma \rightarrow \mathbf{X}$, con $\mathbf{R} = (\pi/a)(111)$ e $\mathbf{X} = (\pi/a)(100)$.
2. Mostrare che lungo ogni asse cartesiano in \mathbf{k} ci sono 2 minimi di energia degeneri e darne le posizioni.
3. Trovare il tensore di massa efficace $(1/m)_{ij}$ in questi punti.
4. Che cosa rappresenta l'origine? è un punto dove ha senso calcolare la massa efficace? Se sì, quanto vale?

Esercizio 3: *Struttura zincoblenda*

Si consideri una zincoblenda, ad es. GaAs. Evidentemente la struttura in questione è un Bravais con base.

1. Si specifichi qual è il reticolo di Bravais e quale la base, dandone i vettori \mathbf{d}_j .
2. Fare un disegno di un piano cristallino (110) specificando qual è la cella base (bidimensionale, ovviamente) su quel piano, e dandone i vettori di base.
3. Qual è la distanza caratteristica della famiglia di piani (110)?
4. Si denoti con f_{Ga} e f_{As} il fattore di forma atomico del gallio e dell'arsenico rispettivamente. Nel seguito si trascurerà la loro dipendenza dal vettore d'onda trasferito. Si scriva l'espressione esplicita del fattore di struttura geometrico sui vettori di reticolo reciproco \mathbf{K} : $S(\mathbf{K}) = \sum_j f_j e^{i\mathbf{d}_j \cdot \mathbf{K}}$
5. Considerando poi il caso specifico $f_{Ga} = f_{As}$, si dia la condizione che deve essere soddisfatta da \mathbf{K} perchè $S(\mathbf{K})$ sia non nullo e si dica quale reticolo formano tali \mathbf{K} .
6. Per quali \mathbf{K} invece $S(\mathbf{K})$ è nullo?