

Fisica dello Stato Solido, 1° Modulo.

1. Modello di Drude. Conducibilità termica.

Seguendo la traccia delineata da Ashcroft e Mermin (Cap.1) mostrare che la conducibilità termica k di un metallo calcolata con il modello di Drude è:

$$k = \frac{1}{3} v^2 \tau c_v$$

dove v^2 è la velocità quadratica media, τ il tempo di rilassamento e c_v il calore specifico a volume costante. Nello svolgimento mettere in evidenza quali sono le ipotesi del modello utilizzate per derivare k .

2. Modello di Sommerfeld. Densità degli stati 1D, 2D, 3D

Calcolare l'espressione della densità degli stati di un gas di elettroni secondo il modello di Sommerfeld nel caso 1D, 2D e 3D.

3. Strutture cristalline

Alla temperatura di circa 13 °C, lo stagno grigio (α -Sn) è soggetto ad una transizione di fase cristallina nella struttura dello stagno bianco (β -Sn). L' α -Sn ha la struttura del diamante con una cella unitaria cubica il cui lato misura 6.49 Å. Invece la fase β -Sn presenta una struttura tetragonale a corpo centrato (bct) con 4 atomi per cella unitaria e parametri di cella $a = 5.83$ Å e $c = 3.18$ Å). Si calcoli la densità (g/cm^3) di ciascuna delle due fasi.

4. Scattering elastico. Trattazione di Laue.

Spiegare l'origine del fattore di struttura geometrica $S(\underline{G})$ e del fattore di forma $f_\alpha(\underline{G})$ in caso di diffusione elastica di raggi X da parte di un reticolo.

$$S(\underline{G}) = \sum_{\alpha} f_{\alpha} e^{-i\underline{G} \cdot \underline{r}_{\alpha}}, \quad f_{\alpha}(\underline{G}) = \frac{1}{e} \int \rho_{\alpha}(\underline{r}) e^{-i\underline{G} \cdot \underline{r}} d^3 \underline{r}$$

dove e è la carica dell'elettrone, la sommatoria è estesa agli atomi della cella unitaria e l'integrazione è fatta sul "volume" di un atomo.

5. Diffrazione

A&M, cap. 6 es.1.

Suggerimento: si tenga conto della relazione tra la distanza d_{hkl} tra i piani della famiglia hkl e la costante reticolare a :

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{h^2 + k^2 + l^2}{a^2}$$

6. Rappresentazione delle bande elettroniche di elettrone libero nello schema di zona ridotta.

Determinare l'espressione delle bande energetiche di elettrone libero relative a un reticolo quadrato di lato a . Rappresentare nello schema di zona ridotta ($-\pi/a < k < \pi/a$) le prime 5 bande lungo la direzione $[1,0]$.

7. Metodo *tight binding* per un reticolo FCC. Bande che hanno origine da orbitali atomici di tipo s.

Si consideri un reticolo cubico a facce centrate. Risolvere, nello schema di tight-binding, l'equazione di Schroedinger per orbitali di tipo s considerando il contributo dei 12 atomi primi vicini. Discutere il significato degli integrali α , β e γ che compaiono nella espressione degli autovalori dell'energia $\varepsilon(k)$. Tracciare, al variare di k , l'andamento della banda energetica in direzione $(k_x, k_y, k_z)=(1,1,1)$, cioè nella direzione ΓL . Si trascuri la dipendenza di $\varepsilon(k)$ da α . Suggerimento: si veda la trattazione proposta da A.& M. Cap.10

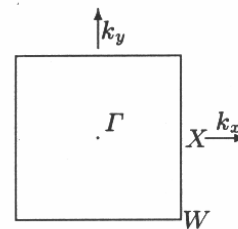
8. *Tight-binding* su un reticolo quadrato.

Si considerino gli elettroni in un reticolo quadrato bidimensionale le cui bande energetiche, trattate con l'approssimazione di tight-binding hanno la seguente dipendenza da k

$$E(\vec{k}) = E_0 [2 - \cos(ak_x) - \cos(ak_y)]$$

dove a è la costante reticolare.

- Si traccino alcune curve di energia costante nel piano k_x, k_y .
- Si mostri che la maggior parte delle curve di energia costante attraversano i bordi della zona di Brillouin perpendicolarmente ai piani di Bragg.
- Tracciare la curva di dispersione $E(\underline{k})$ nella direzione W-X (vedi Figura a lato).
- Disegnare la superficie di Fermi nel caso in cui ogni atomo del reticolo contribuisca con 1 elettrone (*half-filling condition*). Abbiamo a che fare con un metallo o con un isolante?
- Disegnare la superficie di Fermi nel caso in cui ogni atomo del reticolo contribuisca con 2 elettroni. Abbiamo a che fare con un metallo o con un isolante? Discutere le differenze con il caso in cui la superficie di Fermi sia quella calcolata per un gas di elettroni in presenza di un potenziale debole.
- Calcolare il tensore M_{ij} (matrice 2x2, in questo caso) della massa efficace a centro zona ($\Gamma=(0,0)$), e nei punti a bordo zona X=(1,0) e W=(1,1).



9. Relazione di dispersione per una catena unidimensionale bi-atomica.

Si consideri un reticolo di Bravais unidimensionale con due ioni per cella primitiva, posti nelle posizioni di equilibrio na e $na+d$. Calcolare le relazioni di dispersione per le bande fononiche $\omega=\omega(k)$ relative a tale reticolo nel caso in cui i due atomi 1 e 2 della base abbiano la stessa massa $M_1=M_2=M$, ma le costanti di forza G e K tra gli atomi primi vicini dipendano dal fatto che la loro separazione sia $+d$ o $-d$. Discutere i casi limite dei fononi di centro zona ($k=0$) e bordo-zona ($k=\pi/a$).

10. Calore specifico elettronico e di reticolo.

Si consideri l'espressione del calore specifico elettronico ricavata dal modello di Sommerfeld e quella del calore specifico di reticolo ricavata dal modello di Debye. Si calcoli a quale temperatura T_0 il contributo del calore specifico di reticolo diventa maggiore del calore specifico elettronico.

11. Modello di Debye.

Si consideri la formula che esprime nel caso più generale la densità di modi vibrazionali in un reticolo in dipendenza dalla frequenza ω :

$$g(\omega) = \sum_s \int \frac{d\vec{k}}{(2\pi)^3} \delta(\omega - \omega_s(\vec{k}))$$

Si dimostri che, nel modello di Debye in cui si considera una relazione di dispersione lineare $\omega = ck$ per tutti i rami fononici, la densità degli stati $g(\omega)$ dipende da ω^2 . Identificare le analogie tra questa relazione di dispersione e quella per i modi del campo elettromagnetico in una cavità.