

STRUTTURA DELLA MATERIA 1
Corso di Laurea Specialistica in Fisica Computazionale
Facolta' di Scienze, Universita' di Udine
Anno Accademico 2002/03

III homework (entro il 25 marzo 2003)

1. Fattore di struttura geometrica

- 1) Considerare il reticolo cubico a facce centrate (FCC), e scrivere i vettori di base del reticolo diretto \mathbf{a} , \mathbf{b} , \mathbf{c} .
- 2) Scrivere anche i vettori fondamentali del reticolo reciproco \mathbf{A} , \mathbf{B} , \mathbf{C} , e dire qual è.
- 3) Calcolare il fattore di struttura:

$$S(\mathbf{G}_{hkl}) = \sum_j f_j(\mathbf{G}_{hkl}) \exp(-i\mathbf{r}_j \cdot \mathbf{G}_{hkl}),$$

considerato $\mathbf{G}_{hkl} = h\mathbf{A} + k\mathbf{B} + l\mathbf{C}$.

- 4) Per quali indici hkl il fascio diffratto si estingue?

2. Calore specifico a basse temperature

Il calore specifico di un materiale a bassa temperatura va come $\alpha T + \beta T^3$. Lo si può interpretare come:

- 1) contributo di fononi acustici e ottici
- 2) contributo di elettroni e di fononi
- 3) contributo di fotoni e di fononi
- 4) contributo di fotoni e di elettroni

3. Frazione di impacchettamento

Supponendo che gli atomi siano sfere rigide che in un cristallo si toccano (ma non sono interpenetranti), quale frazione di spazio occupano se sono disposti in un reticolo SC, FCC o BCC?

4. Funzioni di Bloch

Per un elettrone in un cristallo, quale affermazione è vera delle seguenti:

- 1) le funzioni di Bloch $\psi_{\mathbf{k}}$ calcolate a due diversi punti \mathbf{k} nella zona di Brillouin sono ortogonali
- 2) la parte periodica delle funzioni di Bloch $u_{\mathbf{k}}$ calcolate a due diversi punti \mathbf{k} nella zona di Brillouin sono ortogonali
- 3) le funzioni di Bloch $\psi_{\mathbf{k}}$ e $\psi_{\mathbf{k}'}$ calcolate a due diversi punti della zona di Brillouin differiscono solo nel fattore di fase $\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$
- 4) tutte le funzioni di Bloch possono essere prese periodiche per una appropriata scelta della fase.

5. Resistività

La resistività di un metallo non va esattamente a zero (cioè la conducibilità elettrica non va a ∞) quando la temperatura va a zero. Questo a causa di:

- 1) le oscillazioni quantistiche di punto zero del reticolo su cui urtano gli elettroni
- 2) presenza di impurezze

- 3) scattering dovuto ai fononi
- 4) sia 1. che 3.

6. **Energia di Fermi**

L'energia di Fermi di un metallo cresce, diminuendo il volume, come:

- 1) V^{-1}
- 2) $V^{-1/2}$
- 3) $V^{-2/3}$
- 4) in altro modo

7. **Resistività**

Nei metalli la resistività:

- 1) diminuisce con la temperatura
- 2) cresce con la temperatura

Nei semiconduttori:

- 3) diminuisce con la temperatura
- 4) cresce con la temperatura

8. **Strutture cristalline**

Rame e oro formano una lega, con gli atomi di Cu e Au statisticamente distribuiti sui siti di un reticolo FCC. Per quale concentrazione relativa vi aspettate leghe ordinate e che struttura microscopica potrebbero avere? Disegnare la(e) cella(e) unitaria(e) di queste leghe e dire di quale reticolo di Bravais si tratta.