

STRUTTURA DELLA MATERIA
Corso di Laurea Specialistica in Fisica Computazionale
Facolta' di Scienze, Universita' di Udine
Anno Accademico 2003/04

III homework (entro venerdì 19 marzo 2004)

1. Struttura dei cristalli

Determinare la densità del ferro nella struttura BCC a temperatura ambiente sapendo che il parametro reticolare è $a = 2.86 \text{ \AA}$. A 910°C il ferro transisce ad una struttura FCC. Si calcoli di quanto è variata in percentuale la distanza minima fra gli atomi, nell'approssimazione di trascurare la variazione di volume.

2. 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.

3. Elettroni liberi, en. di Fermi e en. medie

Sapendo che la densità del Potassio allo stato metallico è 0.86 g cm^{-3} , valutare l'energia cinetica media per elettrone a 0°K , nell'approssimazione di elettroni liberi, commentandone il valore.

4. Cristallo ionico unidimensionale

Si consideri un cristallo ionico unidimensionale ideale con un potenziale repulsivo di coppia: $\phi_{ij} = \lambda/r_{ij}^{12}$, oltre all'ovvio termine coulombiano. (i) Scrivere l'energia media per ione. (ii) Sapendo che $a = 2 \text{ \AA}$ è la costante reticolare di equilibrio, quanto vale λ ?

5. Elettroni in 2 dimensioni

Si considerino elettroni nel piano (x, y) , soggetti al potenziale periodico:

$$U(\mathbf{r}) = -2U \left\{ \cos(gx) + 2\cos\left(\frac{gx}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}gy\right) \right\}$$

Qual è il reticolo diretto a cui si riferisce questo potenziale? (i) Darne uno schizzo e una scelta di vettori di base sia per il reticolo diretto (ii) che per quello reciproco. Quanto vale il potenziale (iii) a metà della congiungente tra due siti primi vicini e (iv) ad uno qualsiasi dei 6 punti più lontani dall'origine entro la cella di Wigner-Seitz?