

Modello a elettroni liberi

Molte proprietà fisiche dei metalli possono essere comprese attraverso il modello a elettroni liberi, secondo il quale **gli elettroni di valenza** degli atomi costituenti il metallo possono diventare **elettroni di conduzione e muoversi quasi liberamente** nel volume del solido. Il modello a elettroni liberi ha una **grande utilità** per descrivere quelle proprietà fisiche che dipendono sostanzialmente dalle **proprietà cinetiche e di conduzione degli elettroni**.

I metalli più semplici sono i metalli alcalini – litio, sodio, potassio, cesio e rubidio. In un atomo libero di sodio l'elettrone di valenza è nello stato $3s$; nel metallo questo elettrone diventa elettrone di conduzione nella banda di conduzione $3s$.

Un cristallo monovalente contenente N atomi avrà N elettroni di conduzione e N ioni positivi. Lo ione Na^+ contiene 10 elettroni che **occupano le shell $1s$, $2s$ e $2p$ con una distribuzione spaziale che è essenzialmente la stessa** nel caso del metallo e dello ione libero. Gli ioni occupano solo il 15% circa del volume di un cristallo di sodio (vedi figura). Il raggio di uno ione Na^+ libero è di $0,98 \text{ \AA}$ mentre nel metallo la metà della distanza che lo separa dal suo primo vicino è $1,83 \text{ \AA}$.

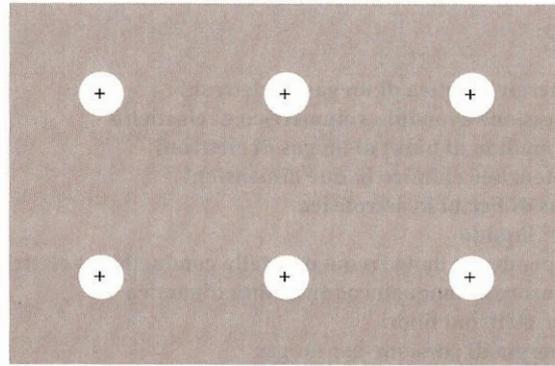


Figura 1 Modello schematico di un cristallo di sodio metallico. I nuclei atomici sono ioni di Na^+ immersi in un mare di elettroni di conduzione. Questi provengono dagli elettroni di valenza $3s$ degli atomi liberi. Gli ioni atomici contengono 10 elettroni nella configurazione $1s^2 2s^2 2p^6$. In un metallo alcalino gli ioni atomici occupano una parte relativamente piccola (~15%) del volume totale del cristallo, mentre nei metalli nobili (Cu, Ag, Au) gli ioni atomici sono relativamente grandi e possono essere in contatto uno con l'altro. La struttura dei cristalli comuni a temperatura ambiente è bcc per i metalli alcalini e fcc per i metalli nobili.

Il modello a elettroni liberi è nato molto prima della meccanica quantistica.

Successi principali della teoria classica:

- Derivazione della **legge di Ohm**
- Determinazione della relazione fra **conducibilità elettrica e termica**

Fallimenti della teoria classica (legati all'utilizzo della distribuzione di M-B):

- Derivazione della **capacità termica elettronica**
- Determinazione della **suscettività magnetica** degli elettroni di conduzione
- Spiegazione del **cammino libero medio elevato** degli elettroni di conduzione

Un elettrone di conduzione può muoversi liberamente in un metallo per molte distanze atomiche senza essere deflesso dalla collisione con altri elettroni di conduzione o con nuclei atomici. Per esempio, in un campione molto puro a basse temperature il libero cammino medio può essere pari a 10^8 spazi interatomici (più di 1 cm).

I motivi principali sono due e possono essere compresi in corsi di livello superiore (Fisica dello Stato Solido):

- 1) Le onde di materia possono propagarsi liberamente in una struttura periodica;
- 2) Un elettrone di conduzione è diffuso solo occasionalmente da altri elettroni di conduzione, a causa del principio di esclusione di Pauli.

Con **gas di elettroni liberi o di Fermi** intendiamo un gas di elettroni liberi soggetti al principio di esclusione di Pauli