



### Esercizio 2: *Dinamica degli elettroni in un metallo unidimensionale*

Applicare il metodo *tight-binding* a un cristallo unidimensionale di costante reticolare  $a$ , con elettroni in orbitali  $s$ .

1. Derivare la relazione di dispersione della prima banda di energia  $\mathcal{E}(k)$  con interazioni con i primi e i secondi vicini (indicare con  $\gamma$  e  $\gamma'$  i due integrali di *hopping*), considerando solo l'*overlap* a primi vicini (indicare con  $\alpha$  tale integrale). Nella definizione di tali integrali, usare per i segni la stessa convenzione del libro di testo.
2. Fare un grafico di  $\mathcal{E}(k)$  nella prima zona di Brillouin, considerando pari a zero la somma dell'energia del livello atomico e del termine *on-site*, e  $\gamma=-1.2$  eV,  $\gamma'=0.4$  eV,  $\alpha=0.15$ . Per confronto, indicare nello stesso grafico anche il risultato che si otterrebbe considerando solo l'interazione con i primi vicini e trascurando l'*overlap*.
3. Proseguire ora in quest'ultimo schema (solo primi vicini e no *overlap*). Assumere che la banda sia parzialmente riempita e indicare con  $n$  la densità lineare di elettroni. Considerare ora un campo elettrico applicato  $E$  statico e uniforme. Trovare l'espressione della velocità  $v(t)$  di un singolo elettrone in funzione di  $E$  e degli altri parametri caratteristici del sistema.
4. Considerando  $T=0K$ , derivare l'espressione della densità di corrente  $j(t)$  in funzione del tempo e del parametro  $n$ .
5. Qual è il valore massimo che può assumere  $n$ ? (ipotizziamo eventualmente di mediare su una lega, e che quindi anche valori intermedi fino al massimo siano possibili) Fare un grafico dell'ampiezza della densità di corrente in funzione di  $n$ . Per quali valori di  $n$  si ha il massimo della corrente? Commentare il risultato.
6. Considerare  $a=5 \text{ \AA}$  e  $E=10^2 \text{ V/cm}$ . Calcolare la frequenza delle oscillazioni degli elettroni.