

Fisica della Materia Condensata I

scritto finale

a.a. 2015/16

13 giugno 2016

(tempo 3h)

- Si diano tutti i passaggi necessari a capire in dettaglio il procedimento di soluzione. Risposte con il solo risultato o dettagli insufficienti non saranno considerate;
- Si diano le valutazioni numeriche con 3 cifre significative.

Esercizio 1: Modello di elettroni liberi

1. Sapendo che la densità del Potassio (numero di massa $A=39$) allo stato metallico è di $0.86 \text{ g} \cdot \text{cm}^{-3}$, qual è la sua frequenza di plasma in Hz?
2. Valutare l'energia cinetica media per elettrone a 0K in eV, nel modello di elettroni liberi in 3D.
3. Si calcoli il valore del contributo elettronico al calore specifico a $T = 300 \text{ K}$ secondo la teoria di Sommerfeld.
4. Si consideri il modello di elettroni liberi in 3D. Giustificando la risposta, discutere come varia l'energia di Fermi di un metallo con il volume V , tenendo costante il numero di elettroni di valenza.
5. Si derivi l'espressione della densità di stati elettronici nel caso di elettroni liberi in 1D.
6. Dire se in tal caso è valida l'espansione di Sommerfeld, e dare l'espressione esplicita del potenziale chimico μ in funzione della temperatura T fino al II ordine in T .

Esercizio 2: *Tight-binding e reticolo esagonale del grafene*

Il grafene è fatto da un unico strato di atomi di carbonio in un reticolo esagonale come in figura. In un approccio tight-binding a primi vicini, la relazione di dispersione per le prime due bande è data da:

$$E(\mathbf{k}) = \pm\gamma\sqrt{1 + 4\cos\left(\frac{\sqrt{3}k_x a}{2}\right)\cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + 4\cos^2\left(\frac{k_y a}{2}\right)}$$

1. Descrivere il reticolo diretto, indicando in figura e scrivendo i vettori primitivi e la base.
2. Descrivere il reticolo reciproco, sempre indicandoli in una figura e scrivendo l'espressione dei vettori primitivi. Mostrare che la prima zona di Brillouin è un esagono e disegnarla indicando le coordinate dei punti di alta simmetria corrispondenti agli spigoli (indichiamoli con \mathbf{K}_i) e a metà dei lati (indichiamoli con \mathbf{M}).

Nota: L'espressione data di $E(\mathbf{k})$ è compatibile con una scelta dei vettori primitivi di reticolo tale per cui la base del reticolo reciproco sia ad esempio:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{2}{\sqrt{3}}, 0 \right), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \left(-\frac{1}{\sqrt{3}}, 1 \right)$$

oppure, come indicato in figura a pagina seguente:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, 1 \right), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, -1 \right)$$

e quindi alcuni dei punti di alta simmetria sono:

$$\mathbf{K}_{1,2,3,4} = \frac{2\pi}{a} \left(\pm\frac{1}{\sqrt{3}}, \pm\frac{1}{3} \right); \quad \mathbf{M}_{1,2} = \frac{2\pi}{a} \left(\pm\frac{1}{\sqrt{3}}, 0 \right)$$

con tutte le permutazioni dei segni \pm .

3. Mostrare che $E_F = 0$ è compatibile con l'espressione data di $E(\mathbf{k})$.
4. Mostrare che nei punti \mathbf{k} corrispondenti agli spigoli della prima zona di Brillouin è $E(\mathbf{k}) = E_F = 0$.
5. Fare un grafico di $E(\mathbf{k})$ lungo un percorso di tipo $\Gamma - \mathbf{K} - \mathbf{M} - \Gamma$, e mostrare che il grafene è semimetallico.
6. Descrivere l'andamento delle bande attorno ai punti \mathbf{K} , con il termine dominante. Di che tipo è?

