

Fisica della Materia Condensata I

II prova

a.a. 2019/20

20 Dicembre 2019

(Tempo: 2 ore)

NOTA:

Dare tutti i passaggi necessari per comprendere il procedimento con cui si è arrivati alla soluzione. Risposte con il risultato finale solo o con dettagli insufficienti non saranno considerate valide.

Esercizio 1: *Isolanti e conduttori*

1. Considerare cristalli 1D con passo reticolare a composti da atomi mono- o divalenti. Classificare questi cristalli in termini di comportamento isolante o conduttore.
2. Considerare cristalli 3D. La classificazione fatta al punto precedente si può estendere al caso 3D? (*Motivare la risposta*)

Esercizio 2: *Densità di stati elettronici in 2D.*

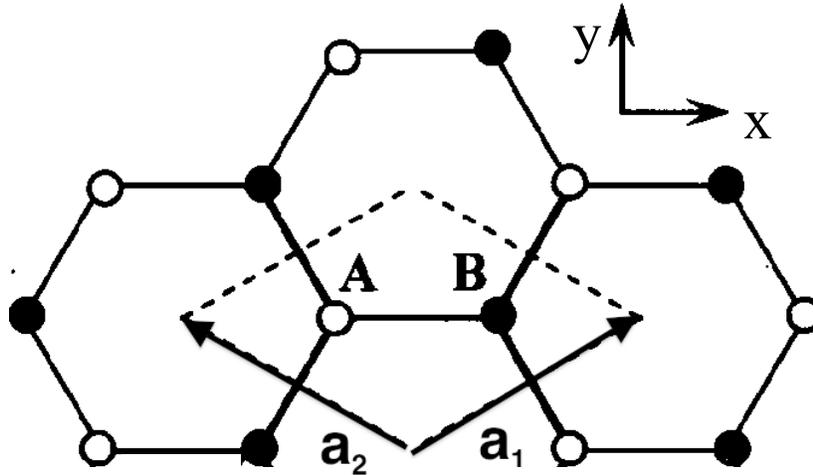
Considerare un reticolo 2D. Assumere una banda non parabolica descritta dalla cosiddetta dispersione di Kane:

$$E(\mathbf{k})[1 + \alpha E(\mathbf{k})] = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

con α un parametro noto.

1. Usando l'equazione semiclassica del moto, calcolare la velocità di un elettrone in questa banda. Identificare la soluzione che si riduce al caso della banda parabolica quando $\alpha = 0$.
2. Mostrare che la densità di stati elettronici è $g(E) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} (1 + 2\alpha E)$ (*). Dimostra che si riduce all'espressione di elettroni liberi quando $\alpha = 0$. (*) *Suggerimento: nella derivazione di $g(E)$, è conveniente calcolare $d(E(\mathbf{k})[1 + \alpha E(\mathbf{k})])/d\mathbf{k}$ anzichè $dE(\mathbf{k})/d\mathbf{k}$.*
3. Fare un grafico di $E(\mathbf{k})$ per spiegare come e perchè $g(E)$ devia rispetto al caso parabolico.

Esercizio 3: *Tight-binding del grafene.*



Si consideri la struttura a nido d'ape del grafene. Sia a il modulo dei vettori primitivi \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 . Si consideri il sistema di riferimento indicato in figura.

1. Scrivere i vettori primitivi del reticolo diretto, \mathbf{a}_1 e \mathbf{a}_2 , e di quello reciproco, \mathbf{b}_1 e \mathbf{b}_2 .
2. Fare un grafico della prima zona di Brillouin, mostrare che è un esagono, e scrivere le coordinate dei 6 vertici, chiamandoli $\{\mathbf{K}_i\}$. (*Notazione: per non fare confusione, indicare con \mathbf{G}_i i vettori del reticolo reciproco, se si usano*)
3. In un approccio *tight-binding*, supponendo di considerare solo un orbitale atomico per atomo e interazioni a primi vicini, le prime due bande elettroniche hanno questa espressione:

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

Discuterne il comportamento ai punti $\{\mathbf{K}_i\}$ e nei loro dintorni, riferendosi in particolare all'andamento di $\nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k})$.

4. Quanto varrebbe E_F se ci fosse un elettrone per atomo? (*la risposta non richiede necessariamente calcoli, ma va comunque giustificata*)
5. Scrivere l'espressione delle prime due bande lungo la direzione $k_x = 0$ (cioè $E(0, k_y)$) e farne un grafico per $-4\pi/3a \leq k_y \leq 4\pi/3a$.

(Può essere utile: $\cos(\alpha + \beta) = \cos\alpha \cos\beta - \sin\alpha \sin\beta$)