Elettroni nei Cristalli – II compito
A.A. 2007/2008, 10/12/07
(*tempo: ore 2:30)*

- Si risolvano tutti gli esercizi che hanno complessivamente una valutazione massima di 36 punti. Il voto tra 33 e 36 viene considerato 30 e lode, tra 30 e 32 viene considerato 30.
- 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.

Esercizio 1: *Elettroni in un potenziale periodico debole*

Considerare un cristallo unidimensionale con parametro reticolare a con un debole potenziale periodico puramente cosinusoidale:

$$U(x) = U_0 \; cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right).$$

1. Dire per quali vettori di reticolo reciproco G, i coefficienti di Fourier U_G non sono nulli e quanto valgono.
2. Detta $\Delta E(q) = E^-(q) - E^0(q)$ la differenza rispetto al caso $U_0 = 0$ (che da' $E^0(q)$) della banda di energia piú bassa, scriverne esplicitamente l'espressione nell'ambito del modello a potenziale debole, accoppiamento a due livelli, vicino al bordo zona $(G/2)$ considerando la parte con $q > 0$ (per simmetria).
3. In via preliminare, scrivere l'espressione (senza farne il calcolo) del contributo all'energia totale E_{tot} del sistema dato dalla banda $E^-(q)$.
4. Semplificando l'integrando usando il fatto che U_0 é molto piccolo, dimostrare che la variazione dell'energia totale E_{tot} del sistema nel caso di banda piena è:

$$\Delta E_{tot} \approx \frac{1}{\pi}\frac{U_0^2 ma^2}{\pi^2\hbar^2}\log\left(\frac{2U_0 ma^2}{\pi^2\hbar^2}\right).$$

Esercizio 2: *Modello* tight binding *per banda s*

Considerare la dispersione $E(\mathbf{k})$ della banda s nel modello *tight binding* per un reticolo cubico semplice di passo reticolare a, nell'approssimazione a primi vicini e trascurando gli integrali di overlap: $E(\mathbf{k}) = E_s - 2\gamma[\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a]$, con $\gamma = -\int d\mathbf{r}\phi_s^2(\mathbf{r})\Delta U(\mathbf{r}) > 0$.

1. Calcolare massimi e minimi della banda e ampiezza totale.
2. Fare un grafico di $E(\mathbf{k})$ lungo il cammino $\mathbf{R} \longrightarrow \mathbf{\Gamma} \longrightarrow \mathbf{X}$ dove $\mathbf{R} = (\pi/a)(111)$ e $\mathbf{X} = (\pi/a)(100)$.
3. Calcolare la massa efficace nei punti di massimo e di minimo della banda prima calcolati, specificando che carattere hanno.
4. Discutere se ha senso o meno il concetto di massa efficace al punto $\mathbf{X}$.

Esercizio 3: *Equazione di Boltzmann: conducibilitá in un modello* tight binding *2D*

Considerare le bande di energia per elettroni nel modello *tight binding* su reticolo quadrato bidimensionale con solo *hopping a primi vicini*:

$$E(\mathbf{k}) = E_s - 2\gamma[\cos k_x a + \cos k_y a].$$

1. Giustificare il fatto che nel caso di banda riempita per metà (quindi 1 elettrone per cella unitaria) l'energia di Fermi è E_s. E' il caso di un metallo o di un isolante?

2. Disegnare la curva (siamo in 2D) di Fermi nel piano (k_x, k_y) in questo caso.

3. Calcolare il tensore di conduttivitá risolvendo l'eq. di Boltzmann.
Suggerimento:
Ricordare l'espressione per il tensore di conducibilitá in **3D** *nel caso di campo elettrico statico e uniforme, ottenuto dalla soluzione dell'equazione di Boltzmann (eq. 13.25 di Ashcroft-Mermin, dove f è la funzione di distribuzione all'equilibrio, altrimenti indicata con g_0, e $n = 1$, una banda). Con l'approssimazione $-\partial g_0/\partial E \approx \delta(E - E_F)$ l'espressione per il tensore di conducibilità si riduce a:*

$$\sigma_{ij} = 2e^2 \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \tau(E(\mathbf{k})) v_i(\mathbf{k}) v_j(\mathbf{k}) \delta(E(\mathbf{k}) - E_F) \delta_{ij} \tag{1}$$

$$\sigma = 2e^2 \int_{sulla\ sup.\ Fermi} \frac{1}{(2\pi)^3} \tau(E(\mathbf{k})) \frac{1}{3} v^2(\mathbf{k}) \frac{dS}{|\nabla E(\mathbf{k})|} \tag{2}$$

$$= 2e^2 \frac{1}{\hbar(2\pi)^3} \int_{sulla\ sup.\ Fermi} \tau(E(\mathbf{k})) \frac{1}{3} |v(\mathbf{k})| dS, \tag{3}$$

da cui si ritrova il valore della conducibilitá di Drude nel caso di elettroni quasi liberi:

$$\sigma = \frac{ne^2 \tau_F}{m^*}.$$

In modo analogo ricavare l'espressione per il presente caso 2D, esplicitando m^*; qui l'integrale di superficie si riduce ad un integrale di linea (vedi punto 2)...

4. Confrontare con l'espressione della conducibilità nel caso di un sistema 2D di elettroni liberi con la stessa densitá elettronica ed evidenziarne le differenze.