

$$1) \varphi_{TB}^{(0)}(k) = \varphi_0 - \beta - 2\gamma \cos ka \quad (\gamma > 0)$$

$$\varphi_{TB}^{(0)}(k \rightarrow 0) \approx \varphi_0 - \beta - 2\gamma + \gamma a^2 k^2$$

$$2) \varphi_{FE}^{(0)}(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

↳ "free electrons"

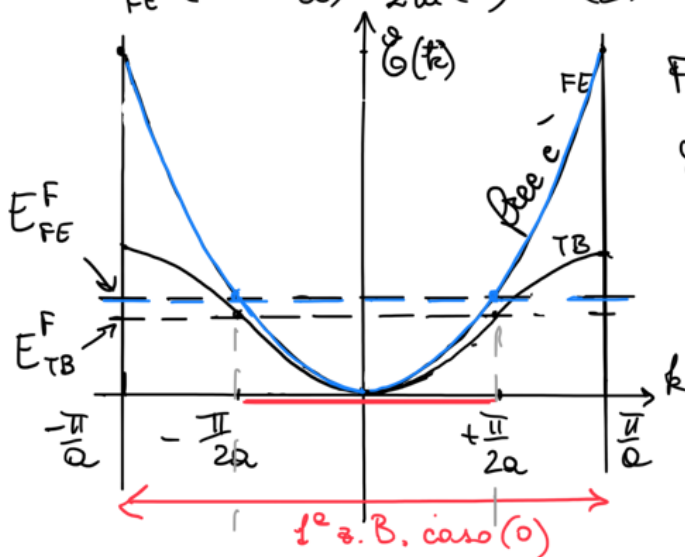
$$\varphi_{TB}^{(0)}(k) = \varphi_{FE}^{(0)}(k) \text{ per } k \rightarrow 0 \Rightarrow$$

$$\begin{cases} \varphi_0 - \beta - 2\gamma = 0 \\ \gamma = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \end{cases}$$

3) Sempre caso (0), la Bz. va da $-\frac{\pi}{a}$ a $\frac{\pi}{a}$:

$$\begin{aligned} \varphi_{TB}^{(0)}(k = \pm \frac{\pi}{a}) &= \varphi_0 - \beta - 2\gamma \cos(\frac{\pi}{a} \cdot a) = \varphi_0 - \beta + 2\gamma \\ &= 4\gamma = \frac{2\hbar^2}{ma^2} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2}{a}\right)^2 \end{aligned}$$

$$\varphi_{FE}^{(0)}(k = \pm \frac{\pi}{a}) = \frac{\hbar^2 (\frac{\pi}{a})^2}{2m} = \left(\frac{\pi}{2}\right)^2 \varphi_{TB}^{(0)} \approx 2.5 \varphi_{TB}^{(0)}$$



Fermi energy:

$$\varphi_{FE}^{(0)}\left(\frac{\pi}{2a}\right) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{2a}\right)^2$$

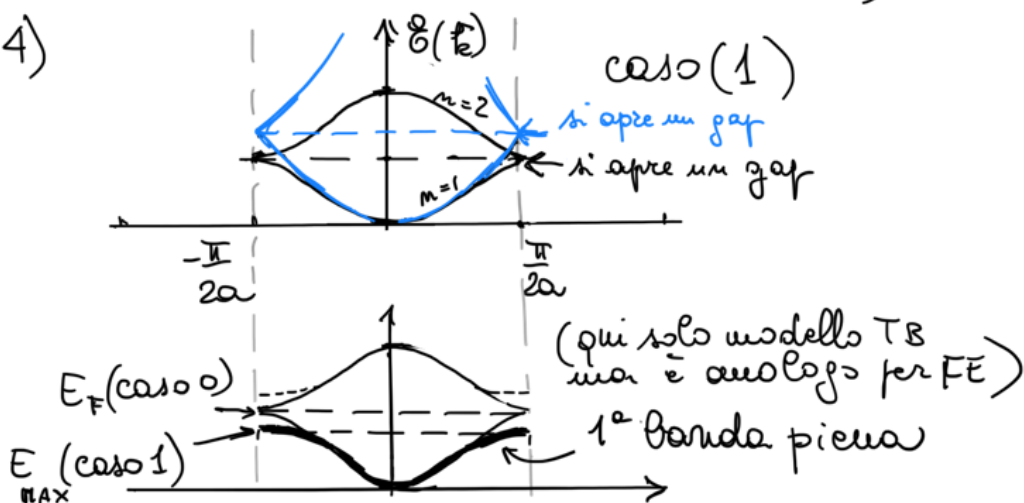
$$\begin{aligned} \varphi_{TB}^{(0)}\left(\frac{\pi}{2a}\right) &= \varphi_0 - \beta \\ &= 2\gamma = \frac{\hbar^2}{ma^2} \end{aligned}$$

$$= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\sqrt{2}}{a}\right)^2$$

$$\begin{aligned} \varphi_{FE}^{(0)}\left(\frac{\pi}{a}\right) &= \left(\frac{\pi \cdot \frac{1}{\sqrt{2}}}{2}\right)^2 \varphi_{TB}^{(0)}\left(\frac{\pi}{a}\right) \\ &= \pi^2/8 \approx 1.23 \end{aligned}$$

→ situazione **metallica** per $1 e^-/\text{atomo}$
con entrambi i modelli (FE e TB).

4)

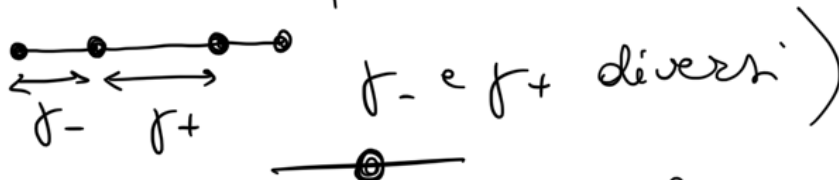


$$\Rightarrow \mathcal{E}_{\text{TB}}^{\text{MAX}}(\text{caso } 1) < \mathcal{E}_{\text{TB}}^{\text{F}}(\text{caso } 0)$$

quindi poiché \mathcal{E}_{TOT} è data: $\int_{\text{EB}} \mathcal{E}' d\mathcal{E}'$
sarà $\mathcal{E}_{\text{tot}}(\text{caso } 1) < \mathcal{E}_{\text{tot}}(\text{caso } 0)$

⇒ il sistema (1) ("dimerizzazione")
è energeticamente favorito rispetto al sistema (0)
(equispaziato) che diventa quindi
instabile. Però l'effetto dipende
dall'ampiezza del gap (cioè dal
potenziale perturbativo) rispetto ad
eventuali eccitazioni termiche che
promuovano gli e^- dalla 1^a alla 2^a banda.

(NB: un conto preciso deve trattare



L'esercizio suggerisce anche un confronto
tra i modelli FE e TB.

$$\text{Ese: } \mathcal{E}_{\text{FE}}^{\text{F}}(\text{caso } 0) > \mathcal{E}_{\text{TB}}^{\text{F}}(\text{caso } 0)$$

ma nel caso di distorsione si potrebbero
invertire le cose se il gap TB fosse

trascurabile e fosse invece grande il
gap E_{FE} :



$$\text{Se } E_{gap} / 2 > \mathcal{E}_{FE}^F(\text{caso 0}) - \mathcal{E}_{TB}^F(\text{caso 0})$$

$$\Rightarrow \mathcal{E}_{FE}^{MAX}(\text{caso 1}) < \mathcal{E}_{TB}^F(\text{caso 0})$$