Lista 6 - Física Estatística FCI0319

1. Reif: 10.2, 10.3

2. Grafeno

Considere um modelo simples do grafeno onde os elétrons formam um gás de Fermi bidimensional cuja relação de dispersão é ilustrada na Fig. 1(a) e cuja energia de Fermi E_F é exatamente igual a energia em que essas duas superfícies (bandas) se tocam. Perto desses pontos, a dispersão é relativística igual a

$$\epsilon_{\mathbf{k},\sigma,\pm} = E_F \pm \hbar v_F \sqrt{k_x^2 + k_y^2}, \qquad (1)$$

onde $v_F \approx 10^6\,\mathrm{m/s}$ é a velocidade de Fermi, o vetor de onda $\mathbf{k} = (k_x, k_y) = \frac{2\pi}{L}(n_x, n_y)$ é medido a partir dos pontos de Dirac K and K′, e os sinais de $+$ e $-$ se referem aos estados acima e abaixo da energia de Fermi, respectivamente. (Não se preocupe com os outros 4 pontos, eles são apenas cópias desses dois.) Em suma, vamos considerar que a relação de dispersão do grafeno é aquela dada pela Eq. (1) como ilustra a Fig. 1(b) e que as auto-energias variam $0 < \epsilon < 2E_F$.

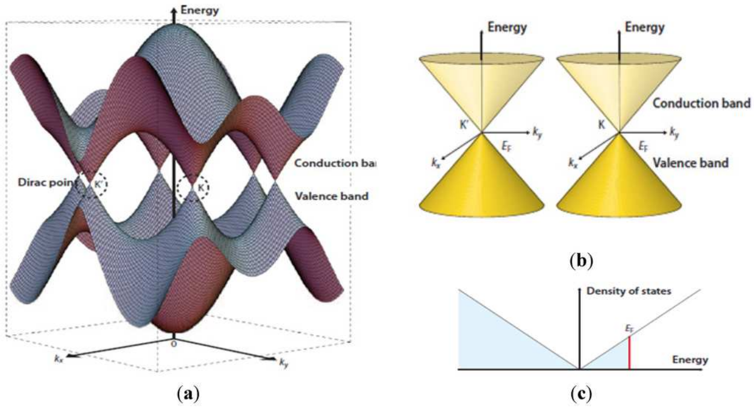

Figura 1: Relação de dispersão dos elétrons no grafeno.

(a) Justifique porque essa é uma boa aproximação para baixas temperaturas (defina precisamente o termo "baixas temperaturas").

(b) Calcule a densidade de estados $D(\epsilon)$ para energias próximas à energia de Fermi E_F. (Não esqueça de considerar energias maiores e menores que E_F, vide Fig. 1(c).)

(c) Usando que $\mu(T) = E_F$, calcule a contribuição eletrônica para a capacidade térmica $C_\mathrm{e}(T)$. (*Dicas*: É conveniente calcular $\bar{E}_\mathrm{e}(T) - \bar{E}_\mathrm{e}(0)$. Não use a expansão de Sommerfeld.)

Desejamos agora estudar a contribuição dos fônons para a capacidade térmica. A Fig. 2 ilustra a relação de dispersão para os fônons numa folha de grafeno suspensa no vácuo e presa pelas bordas. Note que há 6 tipos de fônons denotados por ZA, TA, LA (fônons acústicos), ZO, TO e LO (fônons óticos). Quando a folha de grafeno é "colada" num substrato rígido, os modos ZA e ZO não existem e os demais são pouco modificados.

(d) Para temperaturas muito baixas $k_B T \ll 0.02\,\mathrm{eV}$, explique porque podemos negligenciar a contribuição dos fônons óticos?

(e) Para pequenos vetores de onda ($q \lessapprox 5 \times 10^9\,\mathrm{m}^{-1}$), as relações de dispersão dos fônons LA e TA são relativísticas: $\epsilon_\mathbf{q} = \hbar v q$, onde as velocidades de grupo são $v_\mathrm{TA} \approx 10^4\,\mathrm{m/s}$ e $v_\mathrm{LA} \approx 2v_\mathrm{TA}$. Por outro lado, a dispersão para o modo ZA é quadrática $\epsilon_\mathbf{q} = \hbar\alpha q^2$ com $\alpha \approx 6 \times 10^{-7}\,\mathrm{m^2/s}$. Calcule a contribuição para a capacidade térmica (C_ZA, C_TA e C_LA) de cada um desses modos no limite de baixas temperaturas. (Faca as aproximações que achar necessárias.)

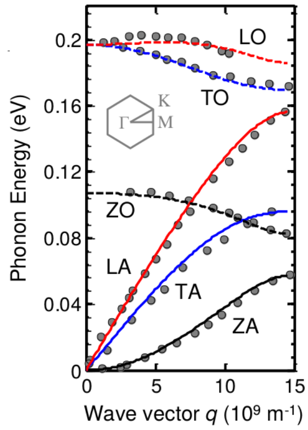

Figura 2: Relação de dispersão dos fônons no grafeno.

(f) Em baixas temperaturas, a capacidade térmica de uma folha de grafeno suspensa é dominada pelos elétrons ou pelos fônons? Justifique.

(g) E para uma folha de grafeno num substrato rígido? Justifique.

(h) Mostre que $\mu = E_F$ para pequenas temperaturas no grafeno? [*Dica 1*: Use a expansão de Sommerfeld e $D(\epsilon)$ calculada no item (b) para mostrar que μ não pode ser nem maior nem menor que E_F. *Dica 2*: calcule diretamente a diferença $N(T) - N(0)$ e use as simetrias de $D(\epsilon)$.]