Lista 6 - 7600041 - Física Estatística

1. Reif: 10.2, 10.3

2. **Grafeno** (parte 1)
   Considere um modelo simples do grafeno onde os elétrons formam um gás de Fermi bidimensional cuja relação de dispersão é ilustrada na Fig. 1a(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

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

   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. 1a(b) e que as auto-energias variam $0 < \epsilon < 2E_F$.

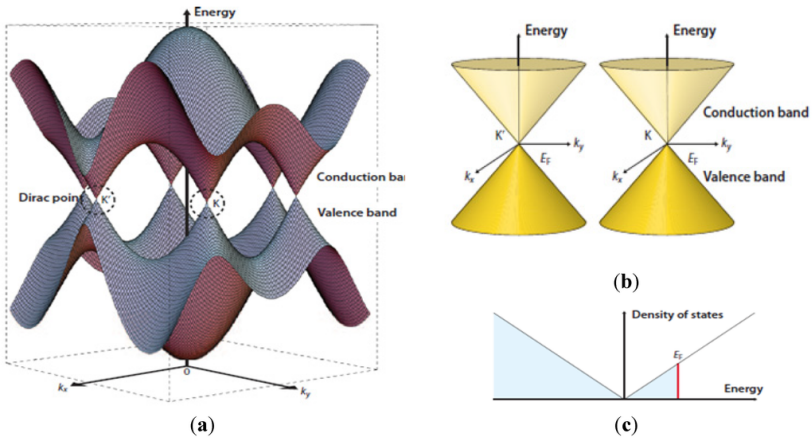
   (a) Justifique porque essa é uma boa aproximação para baixas temperaturas (defina precisamente o termo "baixas temperaturas").

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

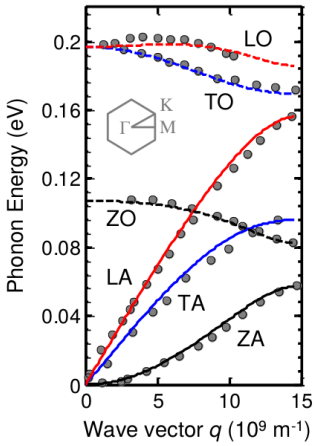
   (c) Usando que $\mu(T) = E_F$, calcule a contribuição eletrônica para a capacidade térmica $C_\mathrm{e}\,(T)$.
   Dica: (i) É conveniente calcular $\bar{E}_\mathrm{e}\,(T) - \bar{E}_\mathrm{e}\,(0)$. (ii) Não use a expansão de Sommerfeld.

   (d) Mostre que $\mu = E_F$ para pequenas temperaturas no grafeno?
   Dica: (i) 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. (ii) Alternativamente, calcule diretamente a diferença $N(T) - N(0)$ e use as simetrias de $D(\epsilon)$.

3. **Grafeno** (parte 2)
   Desejamos agora estudar a contribuição dos fônons para a capacidade térmica. A Fig. 1b 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.



(a) Relação de dispersão dos elétrons no grafeno.



(b) Relação de dispersão dos fônons no grafeno.

Figura 1: Grafeno.

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

(b) 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 $\alpha \approx 6 \times 10^{-7}\,\mathrm{m}^2/\mathrm{s}$. 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.)

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

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