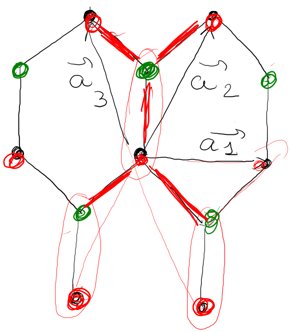
Structure de bandes du graphène



$$\begin{cases} \vec{a}_1 = \sqrt{3}\, a\, \vec{u}_x \\ \vec{a}_2 = \dfrac{\sqrt{3}}{2} a \left(\vec{u}_x + \sqrt{3}\, \vec{u}_y \right) \end{cases}$$

$$\vec{a}_3 = \frac{\sqrt{3}}{2} a \left(-\vec{u}_x + \sqrt{3}\, \vec{u}_y \right)$$

Réseau réciproque

$$\begin{cases} \vec{a}_1^{\,*} = \dfrac{2\pi}{\sqrt{3}} \dfrac{1}{a} \left(\sqrt{3}\, \vec{u}_x - \vec{u}_y \right) \\ \vec{a}_2^{\,*} = \dfrac{4\pi}{3} \dfrac{1}{a} \vec{u}_y \end{cases}$$

$$\langle \overset{R=0}{\phi_{m'}} | \hat{W} | \overset{R=R_j}{\phi_m} \rangle$$

3) Hamiltonien de BLOCH

$$T_{m,m'}(k) = \sum_j e^{i\vec{k}\vec{R_j}}\, t_{m,m'}(R_j)$$

ici matrice 2×2

Couplage entre atome m' situé dans la maille $R=0$ et l'atome m de la maille R_j

$$T_{m,m'} = -t \left(1 + e^{-i\vec{k}\vec{a}_2} + e^{-i\vec{k}\vec{a}_3} \right) = -t\, \gamma_k^*$$

$$S_{m,m}(k) = E_a^m$$ énergie sur site de l'atome m

Graphène : $\hat{H}_k = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & -t\gamma_k^* \\ -t\gamma_k & \varepsilon_0 \end{pmatrix}$

4 Nitrure de Bohr

$$\hat{H}_k = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 + \Delta & -t\gamma_k^* \\ -t\gamma_k & \varepsilon_0 - \Delta \end{pmatrix}$$

5 Bandes d'énergie

$$\det(\hat{H}_k - \lambda \hat{I}d) = 0$$

$$(\varepsilon_0 - \lambda + \Delta)(\varepsilon_0 - \lambda - \Delta) - t^2 |\gamma_k|^2 = 0$$

$$(\varepsilon_0 - \lambda)^2 - \Delta^2 = t^2 |\gamma_k|^2$$

$$\lambda_\pm = \boxed{E_\pm(k) = \varepsilon_0 \pm \sqrt{\Delta^2 + t^2 |\gamma_k|^2}}$$

$$\gamma_k = 1 + e^{i\vec{k}\vec{a}_2} + e^{i\vec{k}\vec{a}_3}$$

$$= 1 + e^{i\frac{3}{2}k_y a}\left[e^{ik_x\frac{\sqrt{3}}{2}a} + e^{-ik_x\frac{\sqrt{3}}{2}a}\right]$$

$$\gamma_k = 1 + 2e^{i 3/2 k_y a} \cos\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a$$

$$E_\pm(k) = \varepsilon_0 \pm \sqrt{\Delta^2 + t^2\gamma_k\gamma_k^*}$$

avec $\gamma_k\gamma_k^* = 1 + 4\cos^2\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a + 4\cos\left(k_x\frac{\sqrt{3}}{2}a\right)\cos\left(\frac{3k_y a}{2}\right)$

- Graphène : $\Delta = 0$: Points de contact $E_+(k) = E_-(k)$

$$\longrightarrow \boxed{\gamma_k = 0}$$

- Nitrure de Bohr pas de point de contact

Coordonnées des points de contact

$$\gamma_k = 1 + e^{i\frac{3}{2}k_y a}\, 2\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a\right) = 0$$

$$2\cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a\right) + e^{-i\frac{3}{2}k_y a} = 0$$

$$\Longrightarrow \sin\frac{3}{2}k_y a = 0 \qquad \longrightarrow \frac{3}{2}k_y a = 0 \text{ ou } \pm\pi$$

- si $k_y = 0$ alors $2\cos\frac{\sqrt{3}}{2}k_x a = -1$

  2 points de contact $\longrightarrow k_x = \pm\frac{4\pi}{2\sqrt{3}a}$

- si $k_y = \pm\frac{2}{3}\frac{\pi}{a}$ alors $2\cos\frac{\sqrt{3}}{2}a k_x = +1$

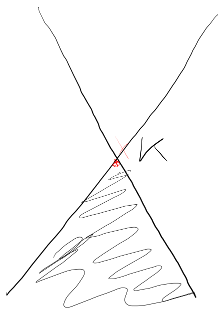
  4 points de contact $\longrightarrow k_x = \pm\frac{2}{3}\frac{\pi}{\sqrt{3}a}$

Remplissage des bandes

$2N$ états $\times \underset{\substack{\uparrow \\ \text{spin}}}{2} = 4N$ états

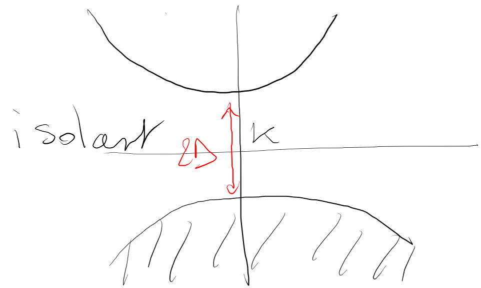
$2N$ électrons $(1/\text{atome})$

Graphène



Semi métal

Nitrure de Bore



$$E_\pm = \varepsilon_0 \pm \sqrt{\Delta^2 + t^2 |\gamma_k|^2}$$

$$= \varepsilon_0 \pm \Delta \left(1 + \frac{1}{2} \frac{t^2 |\gamma_k|^2}{\Delta^2} \right)$$

dispersion parabolique près de K

6) Au voisinage des points de Dirac

<u>par ex :</u> $\vec{K} \begin{vmatrix} \dfrac{4\pi}{3\sqrt{3}\,a} \\ 0 \end{vmatrix}$

$$\boxed{\gamma_{\vec{K}+\vec{q}} = \gamma_{\vec{K}} + \vec{q}\cdot\vec{\nabla}_k \gamma_k\Big)_{\vec{K}}}$$

$$\gamma_{\vec{k}} = 1 + e^{i\vec{k}\vec{a}_2} + e^{i\vec{k}\vec{a}_3}$$

$$\vec{\nabla}\gamma_{\vec{k}} = i\,\vec{a}_2\, e^{i\vec{k}\vec{a}_2} + i\,\vec{a}_3\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_3}$$

$$e^{i\vec{K}\vec{a}_2} = e^{2i\pi/3} \qquad e^{i\vec{K}\vec{a}_3} = e^{-2i\pi/3}$$

$$\Rightarrow \gamma_{\vec{K}+\vec{q}} = \vec{q}\left(i\,\vec{a}_2\, e^{\frac{2i\pi}{3}} + i\,\vec{a}_3\, e^{-2i\pi/3}\right)$$

$$= \vec{q}\cdot\begin{vmatrix} -3/2 \;\; a \\ -3/2 \;\; ia \end{vmatrix}$$

$$\boxed{\gamma_{\vec{K}+\vec{q}} = -\frac{3}{2}\left(q_x + i\,q_y\right)}$$

Au voisinage de K :

$$\hat{H}(\vec{q}) = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 & -\frac{3}{2}at(-q_x + i q_y) \\ -\frac{3}{2}at(-q_x - i q_y) & \varepsilon_0 \end{pmatrix}$$

$$\boxed{\hat{H}(\vec{q}) = \varepsilon_0 \hat{\mathbb{1}} + \frac{3}{2} at\, \hat{\sigma}_x q_x + \frac{3}{2} at\, \hat{\sigma}_y q_y \quad (+ \Delta \hat{\sigma}_z)}$$

Nitrure de Bore

Dispersion linéaire au voisinage des points de Dirac : Cônes de Dirac

vitesse : $v = \frac{3}{2} \frac{at}{\hbar} \simeq \frac{1}{300} c$

$c = 3\,10^8\ \mathrm{m\,s^{-1}}$