

Jaqueline Bloch, jacqueline.bloch@c2n.upsaclay.fr ; Mark Goerbig, goerbig@lps.u-psud.fr

Le but de ce TD est la compréhension des bandes électroniques du graphène et du nitrure de bore, notamment à basse énergie où l'on constate l'émergence de fermions de Dirac (sans masse ainsi que massifs). Elle couvre le chapitre 1 de la deuxième partie du poly.

Structure de bande du graphène et du nitrure de bore

Nous nous intéressons maintenant au graphène et au nitrure de bore. Dans les deux cas l'hybridation chimique sp^2 est à l'origine d'une structure cristalline en nid d'abeille (lien covalents coplanaires avec des angles de 120°). L'orbitale p_z (occupé par un seul électron) est à l'origine de la structure de bande électronique qui nous intéresse ici.

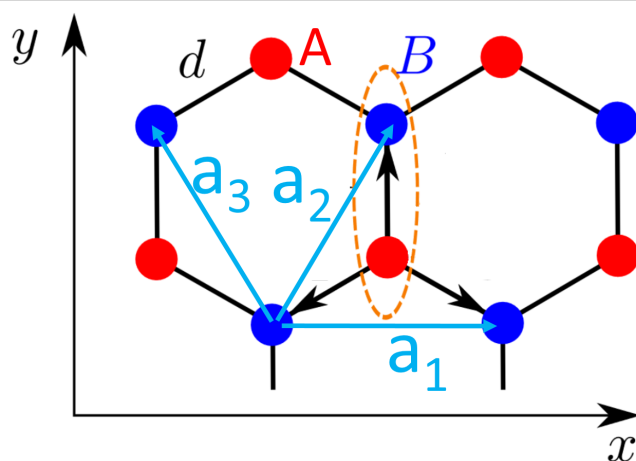


FIGURE 1 – La structure cristalline du graphène

1. Le réseau en nid d'abeille est-il un réseau de Bravais ? Sinon, quel est le réseau de Bravais sous-jacent et combien de sites le motif contient-il ?
2. Quels sont les vecteurs primitifs de la maille élémentaire ? Quels sont les vecteurs primitifs du réseau réciproque ?
3. On considère un modèle de liaisons fortes où les électrons de l'orbitale p_z peuvent passer par effet tunnel aux sites plus proches voisins. L'énergie de saut associée est $t = -3$ eV et on notera ϵ_0 l'énergie atomique d'un électron dans l'orbitale p_z du carbone. Calculer le hamiltonien de Bloch. Quelle est la taille de la matrice ?
4. Qu'est-ce qui change pour le nitrure de bore ? On appellera $\epsilon_0 + \Delta$ l'énergie d'un électron dans l'orbitale p_z du bore et $\epsilon_0 - \Delta$ celle d'un électron dans l'orbitale de l'azote.
5. Calculer les bandes d'énergie. À quels points de la première zone de Brillouin les bandes se touchent-elles pour le graphène ? Il y en a combien (inéquivalents) ? Qu'est-ce qu'on y trouve dans le cas du nitrure de bore ? Où le niveau de Fermi se trouve-t-il ?
6. On s'intéresse désormais au voisinage des points de croisement (évités), en faisant un développement des éléments non diagonaux du hamiltonien de Bloch. Justifier cette approximation. Quelle est la forme du hamiltonien de Bloch à l'ordre le plus bas (non trivial) de ce développement (limite continue) ? Justifier l'appellation « hamiltonien de Dirac ».