Estructura de la Materia 2

Curso de Verano de 2014

Guía 6: Modelo de Enlaces Fuertes del Grafeno y Ecuación de Dirac.

1. Considere una monocapa de grafeno.

   (a) Derivar la relación de dispersión para el grafeno sobre la base de un modelo tight-binding con hopping entre primeros vecinos.

   (b) Realizar un gráfico de las bandas utilizando Mathematica o Matlab. Dibujar la "superficie de Fermi" y discutir si se trata de un metal o un aislador.

   (c) Considerar una expansión en serie de Taylor de la relación de dispersión respecto de los "valles". Demostrar que la relación de dispersión es aproximadamente lineal en torno de estos puntos.

   (d) Para cada valle, escribir una ecuación de Dirac equivalente que dé como resultado la misma relación de dispersión.

   (e) Intentar hacer (numéricamente) el cálculo de la densidad de estados para la relación de dispersión exacta.

   (f) Usando la aproximación lineal para la relación de dispersión y el modelo de Debye, calcular una densidad de estados aproximada.

   (g) Calcular la dependencia del calor específico con la temperatura a bajas temperaturas. Comparar con el comportamiento correspondiente al gas de electrones libres.

2. Efecto tunel de Klein en grafeno.
   El objetivo es calcular la probabilidad de transmisión T de un electrón del grafeno a través de un potencial escalón o de barrera. El Hamiltoniano en un "valle" es

$$H = v_F \mathbf{p} \cdot \sigma + V(r)$$

   donde $V(r)$ es un potencial constante a trozos. Tome $\hbar = 1$ y $v_F = 1$.

   (a) Si el potencial es constante, $V(r) = V_0$ muestre que una onda plana (espinorial) es autovector del Hamiltoniano

$$\varphi(r) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix}$$

   donde $\mathbf{k}$ es el vector de onda, $\tan\theta_{\mathbf{k}} = k_y/k_x$, el autovalor es $E = \alpha k + V_0$ y el índice de bandas es $\alpha = \operatorname{sgn}(E - V_0)$.

   (b) Considere ahora un potencial del tipo escalón, $V(r) = 0$ si $x < 0$ (región 1) y $V(r) = V_0$ si $x > 0$ (región 2). El electrón incide con energía $E < V_0$ desde $x = -\infty$ formando un ángulo ϕ con el eje $\hat{x}$ ($\tan\phi = k_y/k_x$).

      i. Obtenga la amplitud de reflexión en $x = 0$ y de ahí la transmisión $T = 1 - |r|^2$.

      ii. Muestre que T no es igual a $|t|^2$, donde t es la amplitud de transmisión.

iii. Considere el caso de incidencia normal $\phi = 0$, muestre que en el caso particular $E = V_0/2$ la transmisión es $T = \cos^2\phi$.

(c) Considere por último un potencial de barrera

$$V(r) = \begin{cases} 0 & \text{si } x < 0 \text{ ó } x > L \\ V_0 & \text{si } 0 < x < L \end{cases}$$

con un electrón incidiendo en las mismas condiciones que el ítem anterior.

i. Obtenga el coeficiente de transmisión $T(\phi)$.

ii. Muestre que existen resonancias tipo Fabry-Pérot cuando $q_x L = m\pi$, donde q_x es la componente x del vector de ondas en la región dentro de la barrera.

iii. Muestre que $T(\phi = 0) = 1$ para toda energía E (ausencia de backscattering).