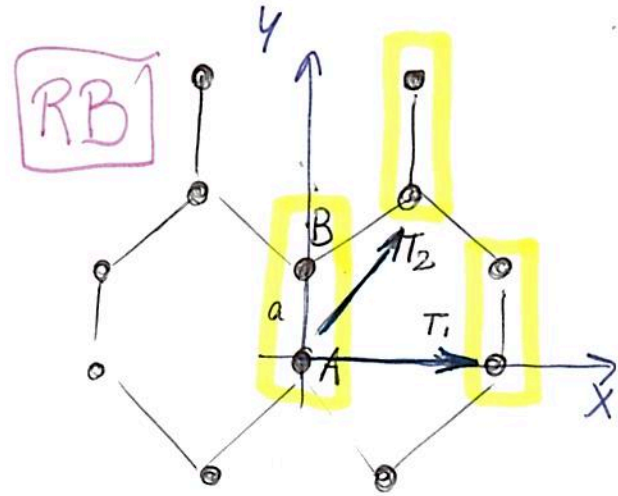


1

TB: grafeno

Honey comb lattice

$$RB: \begin{cases} T_1 = \sqrt{3} a \hat{x} \\ T_2 = \sqrt{3} a \left( \frac{1}{2} \hat{x} + \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{y} \right) \end{cases}$$



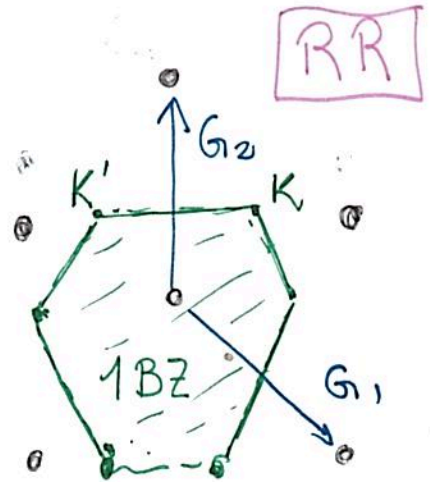
ES TRIANGULAR CON BASE

$$RR: \begin{cases} G_1 = \frac{4\pi}{3a} \left( \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{x} - \frac{1}{2} \hat{y} \right) \\ G_2 = \frac{4\pi}{3a} \hat{y} \end{cases}$$

K, K' en el extremo de 1BZ: Puntos de Dirac

$$K = \frac{1}{3} (G_1 + 2G_2)$$

$$K' = \frac{1}{3} (-G_1 + G_2)$$



NOTAR QUE GIPO

Los orbitales que unen los átomos son los  $s$  y  $p_x, p_y$ , que se "hibridizan", es decir se mezclan. Quedan entonces orbitales moleculares " $\sigma$ " ( $\sigma$ -band).

Tenemos los  $p_z$  de cada átomo, que están "libres" y tienen  $1 e^-$  por orbital. Estos " $\pi$ " orbitales son los que estudiamos ahora:

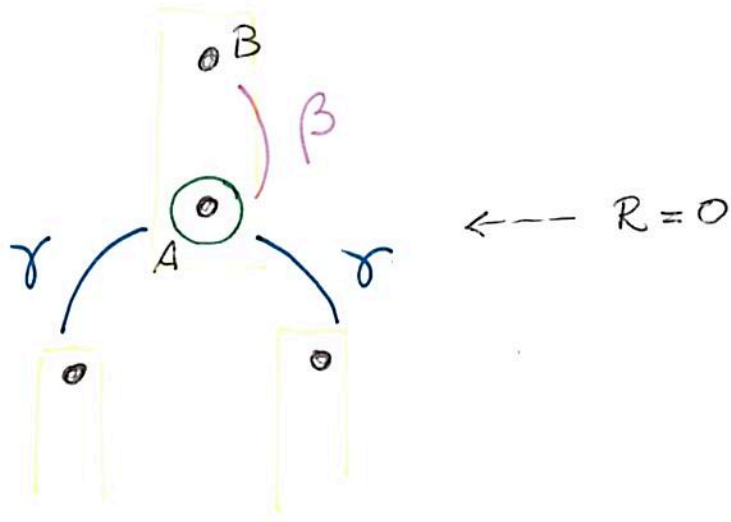
$$\psi_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \left[ b_A \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}) + b_B \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{R} - a\hat{y}) \right]$$

y lo usamos en  $H\psi = E\psi$

$H^\circ$ :

- energía de sitio
- energía de "hopping" dentro de celda  $\beta$
- energía de "hopping" entre celdas  $\gamma$

Las interacciones son a primeros vecinos



Procedimientos:

1

$$H \psi = E \psi$$

$$H \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} [b_A \Phi(\mathbf{r}-\mathbf{R}) + b_B \Phi(\mathbf{r}-\mathbf{R}-a\hat{y})] = \dots$$

$$\bullet \int \Phi^*(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \times \sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \left[ b_A \int d\mathbf{r} \Phi^*(\mathbf{r}) H \Phi(\mathbf{r}-\mathbf{R}) + b_B \int d\mathbf{r} \Phi^*(\mathbf{r}) H \Phi(\mathbf{r}-\mathbf{R}-a\hat{y}) \right] = \dots$$

$$\bullet \int d\mathbf{r} \Phi^*(\mathbf{r}) H \Phi(\mathbf{r}-\mathbf{R}) = \begin{cases} E & \mathbf{R}=\mathbf{0} \\ 0 & \mathbf{R}\neq\mathbf{0} \text{ pues los nn son tipo I} \end{cases}$$

$$\bullet \int d\mathbf{r} \Phi^*(\mathbf{r}) H \Phi(\mathbf{r}-\mathbf{R}-a\hat{y}) = \begin{cases} \beta & \mathbf{R}=\mathbf{0} \\ \gamma & \mathbf{R}\neq\mathbf{0} \wedge (\mathbf{R}=-T_2 \vee \mathbf{R}=T_1) \end{cases}$$

pero como todos los átomos son del mismo tipo  $|\alpha| = |\beta| = t$ .

Este procedimiento me da 1 eq.

$$\begin{aligned} \epsilon b_A + t b_B + t b_B \left[ e^{ikT_2} + e^{ik(T_2-T_1)} \right] \\ = E b_A \end{aligned}$$

[2] la siguiente eq. sale de  
 $\times \int dr \bar{\Phi}^*(r - \hat{q}a)$

Queda una eq. matricial

$$\begin{pmatrix} H: 2 \times 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \end{pmatrix}$$



$$\begin{pmatrix} \epsilon & t e^{+ikT_2} + t e^{+ik(T_2-T_1)} \\ cc. & \epsilon \end{pmatrix}$$

diagonalizo y saco  $E(k)$

Usando MATHÉMATICA y  $E=0$

③ TB

$$E = \left\{ 3 + 2 \cos(\sqrt{3} a k_x) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3} a k_x}{2}\right) \cos\left(\frac{2 a k_y}{L}\right) \right\}^{1/2}$$

Ver gráfico. Como en los pts  $K, K'$  la relación de dispersión es lineal, estudiemos la dinámica electrónica allí

$$\bar{k} = \bar{K} + \bar{q} \quad q_i \ll 1$$

$$H_K = \frac{3 a t}{2} \begin{pmatrix} 0 & q_x + i q_y \\ q_x - i q_y & 0 \end{pmatrix}$$

$$\hbar \dot{q} = p = -i \hbar \nabla \quad (\text{en 2D})$$

$$H_K \simeq \hbar v_F \bar{\sigma}^* \cdot \bar{p}$$

porque la Eq. de Dirac :

$$i \hbar \gamma^\mu \partial_\mu \psi - m c \psi = 0$$

↑  
 $\gamma^{1-3}$  son  $4 \times 4$  de  $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

y se pueden sacar los autovalores

$$\begin{pmatrix} b_A \\ b_B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i \arctan(\frac{q_1}{q_2})} \\ \pm 1 \end{pmatrix}$$

$$\Psi = \int_R e^{i k R} [ b_A \Phi_0 + b_B \Phi_a ]$$

que puede re-esccribirse en términos del teorema de Bloch con:

$$\Psi = e^{i k r} \cdot u$$