

Ejercicio Adicional - Guía 4

1. El grafeno puede describirse como un sólido bidimensional en el que los átomos de carbono ocupan los sitios de una red tipo panal de abeja (Figura 1). Los cuatro orbitales de valencia del carbono son $2s$, $2p_x$, $2p_y$ y $2p_z$. Pero se encuentra que para el grafeno los niveles electrónicos que involucran los orbitales $2s$, $2p_x$ y $2p_y$ están fuertemente desacoplados de los niveles que involucran a los orbitales $2p_z$, e incluso se encuentran a energías alejadas del nivel de Fermi, E_F . Es decir que la estructura de bandas del grafeno cerca de E_F puede describirse por un único orbital $2p_z$ por átomo de carbono.

- a) Obtenga las bandas del grafeno $E(\vec{k})$ en la aproximación de enlaces fuertes, suponiendo como base atómica un único orbital de tipo $2p_z$ por átomo. Considere la energía de sitio $\epsilon_{p_z} = 0$ y sólo interacción entre átomos primeros vecinos $t = 2.9$ eV. Se desprecia el overlap entre orbitales.
- b) A partir de los valores de $E(\vec{k})$ en los puntos $\Gamma = (0, 0)$, $M = \frac{\pi}{3a}(1, \sqrt{3})$ y $K = \frac{4\pi}{\sqrt{33}a}(0, 1)$, grafique cualitativamente la estructura de bandas a lo largo del camino $K \rightarrow \Gamma \rightarrow M \rightarrow K$. Ubique el nivel de Fermi. Justifique. ¿Cómo espera que sea la superficie de Fermi?

c) La conducción eléctrica está determinada por los estados alrededor del E_F , entonces es útil hacer un desarrollo de la relación de dispersión alrededor de E_F . Para el grafeno, las bandas se pueden aproximar por $E(\vec{k}) = \pm t\sqrt{3}k$. Calcule la densidad de estados alrededor de E_F .

- d) Si se enrolla una lámina de grafeno formando un cilindro se tiene un nanotubo de carbono. Hay varias maneras en la que una lámina de grafeno puede ser enrollada, por lo tanto existen una variedad de nanotubos. Para especificar como está enrollado el nanotubo, se define el vector \vec{C} que pertenece a la red de Bravais del grafeno como $\vec{C} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2$ con n y m enteros y \vec{a}_1 y \vec{a}_2 vectores primitivos del grafeno. \vec{C} conecta 2 puntos equivalentes de la lámina de grafeno que van a quedar unidos al formarse el nanotubo. El módulo de \vec{C} , $|\vec{C}|$, es la longitud de la circunferencia del nanotubo.

Se puede estimar los niveles de energía de los nanotubos a partir de la estructura de bandas $E(k_x, k_y)$ del grafeno, teniendo en cuenta que los valores permitidos para el vector de onda \vec{k} que caracteriza a los autoestados del nanotubo están determinados por la imposición de condiciones de contorno periódicas a lo largo de la circunferencia del nanotubo. Por lo tanto, los \vec{k} en esa dirección tomarán valores discretos. En contraste, los vectores de onda \vec{k} a lo largo del eje del nanotubo permanecerán continuos (nanotubo infinito). Encuentre la condición de cuantización para \vec{k} .

Especializarla para los casos: a) \vec{C} tiene dirección \hat{x} (nanotubo del tipo arm-chair) y b) \vec{C} tiene dirección \hat{y} (nanotubo Del tipo zig-zag). Interprete gráficamente (sobre la primera zona de Brillouin del grafeno) la condición encontrada para los casos a) y b).

- e) La estructura de bandas de un nanotubo específico puede ser aproximada como la superposición de los estados electrónicos del grafeno para los \vec{k} permitidos. A partir de las bandas del grafeno que obtuvo, puede explicar por qué todos los nanotubos del tipo arm-chair son metálicos y por qué los del tipo zig-zag pueden ser metálicos o aislantes? En este último caso, ¿cuál sería la condición para que se observe el comportamiento metálico?

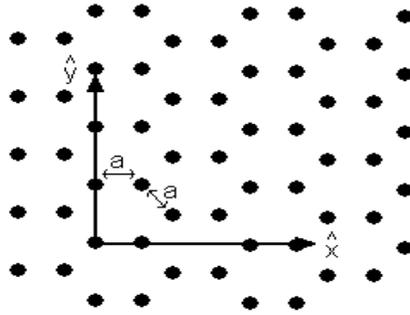


Figura 1: