Relación de dispersión de Grafeno

El grafeno es un cristal bidimensional en una red hexagonal o *panal de abeja* formado de átomos de carbono acomodados en una hoja de un átomo de espesor aproximadamente. Es también, la materia prima de otros alótropos como los fulerenos, los nanotubos y el grafito (ver Figura 1).

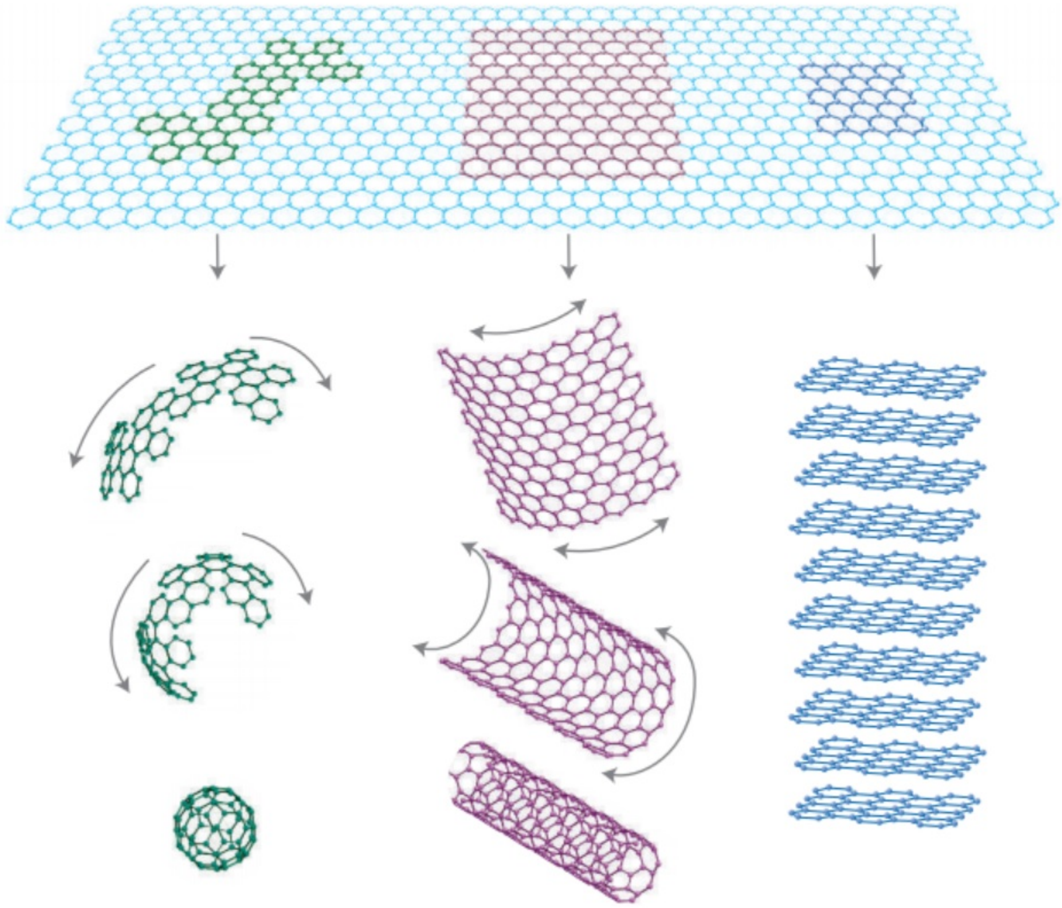

FIG. 1: El grafeno como materia prima de otros alótropos.

Pretendemos ahora, calcular la relación de dispersión de Grafeno utilizando la teoía de *Tight Binding* y el conocido *teorema de Bloch*. Para ello definimos los vectores primitivos de la red y los vectores a primeros vecinos como sigue:

$$\delta_1 = (0, -1)\, a$$
$$\delta_2 = \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right) a$$
$$\delta_3 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right) a$$

Ya que el grafeno es una red bipartita, esto es, tiene dos tipos de átomos a los que llamaremos átomos tipo A y átomos tipo B la red hexagonal podría pensarse como la superposición de dos subredes, como se muestra en la Figura 2.

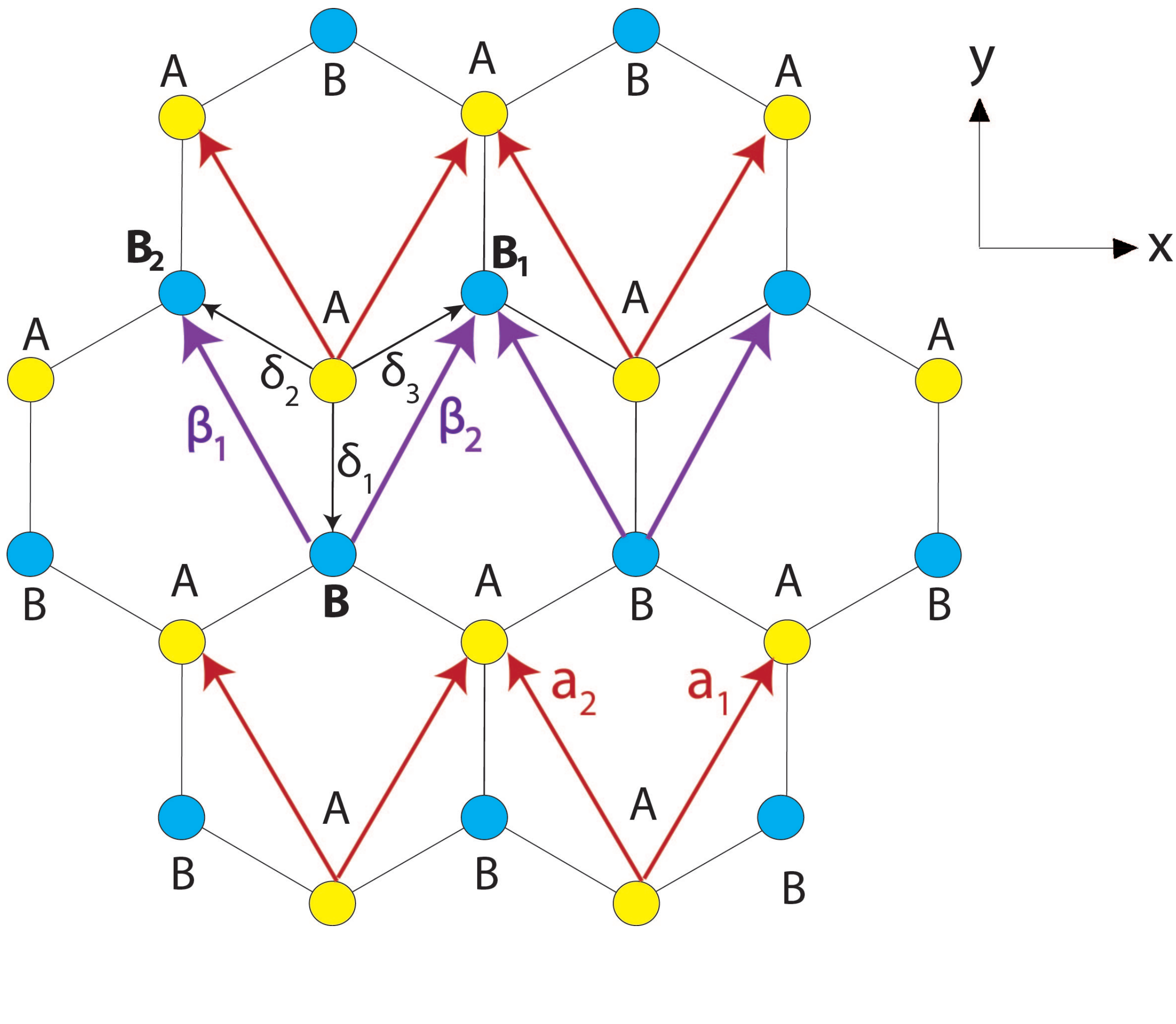

FIG. 2: Se muestran las dos subredes (morado y rojo) de las que se forma la red hexagonal debido a los dos tipos de átomos A (amarillo) y B (azul).

En general, vemos que las posiciones de un átomo A y uno tipo B están dados, respectivamente:

$$r_A = ma_1 + na_2$$

$$r_B = r_A + \delta_1$$

Es decir, los vectores a_1 y a_2 son los mismos que β_1 y β_2 excepto por una traslación.

Ahora, situémonos en la posición de un átomo tipo A y utilizando el desarrollo Tight Binding se tiene que:

$$E\psi\left(r_A\right) = \psi\left(r_A + \delta_1\right) + \psi\left(B_2\right) + \psi\left(B_1\right) = \psi\left(r_B\right) + \psi\left(r_{B_2}\right) + \psi\left(r_{B_1}\right) \tag{1}$$

donde,

$$\psi\left(r_{B_2}\right) = e^{i\beta_1 \cdot k}\psi\left(r_B\right) = e^{ik\cdot(-\delta_1+\delta_2)}\psi\left(r_B\right)$$

$$\psi\left(r_{B_1}\right) = e^{i\beta_2 \cdot k}\psi\left(r_B\right) = e^{ik\cdot(-\delta_1+\delta_3)}\psi\left(r_B\right)$$

Por el teorema de Bloch.

Renombrando a (1),

$$E\psi\left(r_A\right) = \psi\left(B\right) + e^{-ik\cdot\delta_1}e^{ik\cdot\delta_2}\psi\left(B\right) + e^{-ik\cdot\delta_1}e^{ik\cdot\delta_3}\psi\left(B\right) \tag{2}$$

$$Ee^{ik\cdot\delta_1}\psi\left(r_A\right) = e^{ik\cdot\delta_1}\psi\left(B\right) + e^{ik\cdot\delta_2}\psi\left(B\right) + e^{ik\cdot\delta_3}\psi\left(B\right) \tag{3}$$

Finalmente,

$$E\psi\left(A\right) = \psi\left(B\right) + e^{ik\cdot(-\delta_1+\delta_2)}\psi\left(B\right) + e^{ik\cdot(-\delta_1+\delta_3)}\psi\left(B\right) \tag{4}$$

De modo que la relación de dispersión la podemos encontrar al resolver el siguiente determinante:

$$\begin{vmatrix} -E & 1 + e^{ik\cdot(-\delta_1+\delta_2)} + e^{ik\cdot(-\delta_1+\delta_3)} \\ 1 + e^{-ik\cdot(-\delta_1+\delta_2)} + e^{-ik\cdot(-\delta_1+\delta_3)} & -E \end{vmatrix} = 0 \tag{5}$$

Que al resolver obtenemos:

$$E^2 = 3 + 4cos\left(\frac{3}{2}k_y\right)cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_x\right) + 2cos\left(\sqrt{3}k_x\right) \tag{6}$$