

Physique du solide - Devoir à la maison
A rendre au plus tard le 2 décembre 2013

Le graphène est un pavage hexagonal d'atomes de carbone à deux dimensions. Depuis moins d'une dizaine d'années, l'étude de ce matériau a connu un essor très important. Les raisons de cet essor sont multiples. Tout d'abord, il a été montré en 2004 que l'application d'une simple tension de grille permet de contrôler la densité de charge dans le graphène. Des mobilités électroniques exceptionnelles ont ainsi été démontrées [Science 306, 666 (2004)]. D'un point de vue encore plus fondamental, les électrons du graphène ont des comportements relativistes. Le graphène s'avère donc être un système de choix pour l'étude de ces comportements. Les découvertes récentes sur les propriétés du graphène ont valu le prix Nobel 2010 de physique à A. Geim et K. Novoselov.

Ce devoir à la maison se propose d'étudier quelques propriétés électroniques d'une feuille de graphène. Une première partie sera consacrée à des rappels sur la structure cristalline du graphène (espace direct, espace réciproque). La structure de bande du graphène sera calculée dans une deuxième partie en application de la méthode des liaisons fortes.

1 Propriétés électroniques du graphène

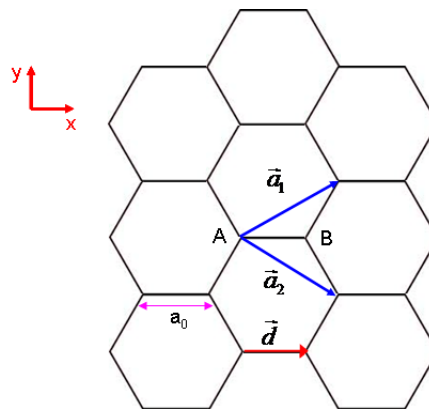


FIGURE 1 – Feuille de graphène. Un atome de carbone est placé à chaque sommet des hexagones. Les vecteurs bleus représentent une maille élémentaire du réseau de Bravais.

1.1 Description de la feuille de graphène : réseau direct ; réseau réciproque

La figure 1 représente l'agencement des atomes de carbone dans la feuille de graphène. Les vecteurs \vec{a}_1 et \vec{a}_2 sont les vecteurs élémentaires d'une maille élémentaire du réseau de Bravais. La distance carbone-carbone notée a_0 vaut 0.142 nm.

1. Exprimer les vecteurs $(\vec{a}_1 ; \vec{a}_2)$ dans la base orthonormée (x, y) .
2. Calculer l'aire de la maille élémentaire $(\vec{a}_1 ; \vec{a}_2)$.
3. Pour décrire le plan de graphène, on doit adjoindre un motif à deux atomes à la base élémentaire. Expliquez pourquoi un motif mono-atomique ne fonctionne pas.

4. Déterminer les vecteurs de base du réseau réciproque $(\vec{a}_1^* ; \vec{a}_2^*)$. Les exprimer dans la base orthonormée (x, y) et donner leur norme en fonction de a_0
5. Expliquer comment construire la première zone de Brillouin et la dessiner.
6. Γ , M et K de coordonnées $(0,0)$, $(\frac{2\pi}{3a_0}, 0)$ et $(\frac{2\pi}{3a_0}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a_0})$ dans la base (x, y) sont trois points de haute symétrie de la première zone de Brillouin. Représenter ces trois points sur le dessin de la première zone de Brillouin

1.2 Structure de bandes du graphène

Les atomes de carbone possèdent quatre électrons de valence. Trois d'entre eux sont utilisés pour former des liaisons de type sp^2 . Ces liaisons sont fortes et donnent ainsi naissance à des bandes occupées profondes. Dans la suite, nous ne considérerons pas ces électrons. Nous admettrons que les niveaux électroniques de conduction et de valence du graphène autour du niveau de Fermi sont bien décrits en ne prenant en compte que le dernier électron de valence dans une bande $2p_z$. Ce dernier électron de valence par atome de carbone participera à la formation de bandes de type π et π^* .

Soit H l'hamiltonien du système. On note : $H = H_{at} + \Delta U(\vec{r})$

où H_{at} représente l'hamiltonien de l'atome de carbone isolé et $\Delta U(\vec{r})$ représente les corrections au potentiel atomique nécessaires à la construction du potentiel cristallin. On notera A et B les atomes du motif. Dans le cadre de la méthode des liaisons fortes, la fonction d'onde peut s'écrire : $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{T}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{T}} (\alpha \phi_A(\vec{r} - \vec{T}) + \beta \phi_B(\vec{r} - \vec{d} - \vec{T}))$. Où \vec{T} est un vecteur du réseau de Bravais direct, α et β sont des constantes, \vec{d} représente la position de l'atome B dans le motif, et ϕ_A, ϕ_B sont les fonctions d'ondes atomiques de type $2p_z$ centrées respectivement sur les sites A et B. Pour le calcul de la relation de dispersion, nous choisirons de ne prendre en compte que les premiers voisins. Autrement dit, nous considérerons les atomes "B" les plus proches d'un atome "A".

1. Donner les coordonnées dans la base (x, y) des premiers voisins en mettant en A en (0, 0).
2. Montrer qu'en se restreignant aux premiers voisins, la relation de dispersion s'écrit : $E_{graphene}(k_x ; k_y) = E_{2p} \pm \gamma [1 + 4 \cos(\frac{3k_x a_0}{2}) \cos(\frac{k_y a_0 \sqrt{3}}{2}) + 4 \cos^2(\frac{k_y a_0 \sqrt{3}}{2})]^{1/2}$, où on donnera la forme de γ . Quelles intégrales ont été négligées pour arriver à ce résultat ? Pour chacune d'entre elles, expliquer pourquoi on les néglige. On notera $E_{2p} = E_{A,B} + \int \phi_{A,B}^*(\vec{r}) \Delta U(\vec{r}) \phi_{A,B}(\vec{r})$. Dans la suite, on choisira l'origine des énergies telle que $E_{2p} = 0$.
3. Tracer la relation de dispersion le long du chemin K Γ MK en expliquant votre démarche.
4. A l'aide d'un logiciel type "Igor", tracer sur une figure 3D la structure de bande $E_g(k_x ; k_y)$. Placer le point K sur la figure.
5. Le graphène idéal (ie sans défaut, sans dopage) est il un métal, un semi-métal ou un semi-conducteur ? Justifier votre réponse.

Suite de l'histoire : Nous avons calculé la structure de bande du graphène autour du niveau de Fermi dans le cadre de l'approximation des liaisons fortes. Cette étude est évidemment préalable à toute étude plus approfondie sur ce matériau. Pour continuer ce travail, nous pourrions par exemple faire une étude plus poussée de la dispersion du graphène autour des points de la première zone de Brillouin où bandes de conduction et de valence se touchent. Nous verrions alors qu'autour de ces points particuliers appelés points de Dirac la dispersion est linéaire. C'est autour de ces points particuliers que la physique des électrons relativistes est étudiée.
