

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI
BOLOGNA

Scuola di Scienze
Corso di Laurea in Fisica

Fermioni Di Dirac nel Grafene

Relatore:
Prof.ssa Elisa Ercolessi

Presentata da:
Antonello Aita

Sessione II
Anno Accademico 2013/2014

A Giuseppe Forte

Indice

1	Reticoli e Bande Elettroniche	4
1.1	Il Carbonio	4
1.2	Descrizione del Reticolo	5
1.3	Costruzione delle Bande Elettroniche	7
1.3.1	Funzioni d'Onda Elettroniche	7
1.3.2	Costruzione dell'Hamiltoniana	9
2	Fermioni di Dirac	14
2.1	Note Storiche	14
2.2	Derivazione delle Equazioni di Dirac	15
2.3	Fermioni di Dirac, di Weyl e Majorana	18
2.4	Equazioni di Weyl e Fermioni a Massa Nulla	18
3	Prove Sperimentali	21
3.1	Tecniche Sperimentali	21
3.1.1	Strumentazione	21
3.1.2	Metodi di Osservazione	21
3.2	Gap e Simmetrie	22
3.3	Osservazioni	22
A	Approfondimenti sull'Hamiltoniana di Tight-Binding	25
B	Condizioni di Born Von-Kármán	27
C	Interazione tra Diversi Piani di Grafene	28
	Bibliografia	29

Sommario

In questo lavoro si affronta l'argomento dei fermioni di Dirac nel grafene, si procederà compiendo nel primo capitolo un'analisi alla struttura reticolare del materiale per poi ricostruirne, sfruttando l'approssimazione di tight-binding, le funzioni d'onda delle particelle che vivono negli orbitali π del carbonio sistemate nella struttura reticolare e ricavarne grazie al passaggio in seconda quantizzazione l'Hamiltoniana. Nel secondo capitolo si ricavano brevemente le equazioni di Dirac e dopo una piccola nota storica si discutono le equazioni di Weyl arrivando all'Hamiltoniana dei fermioni a massa nulla mostrando la palese uguaglianza alla relazione di dispersione delle particelle del grafene. Nel terzo capitolo si commentano le evidenze sperimentali ottenute dalla ASPEC in cui si manifesta per le basse energie uno spettro lineare, dando così conferma alla teoria esposta nei capitoli precedenti.

Introduzione

In questo lavoro si osserva come uno dei materiali più innovativi del nostro secolo presenti un fenomeno assai particolare come la comparsa dei fermioni di Dirac. Questo significa che le particelle nelle bande energetiche non obbediscono più alle equazioni della meccanica quantistica ordinaria, ma ad una particolare classe delle particelle quantistiche relativistiche i **fermioni a massa nulla**, rientrando così nella classe dei **materiali di Dirac**. Queste particelle si manifestano come eccitazioni a bassa energia dello spettro, e sono diretta conseguenza delle *simmetrie* presenti nella struttura. Il grafene si presenta come un materiale in *due dimensioni* in quanto si tratta effettivamente di un singolo strato di atomi di carbonio formanti delle strutture esagonali dello spessore di 4nm, determinando così per le particelle una dinamica in sole due dimensioni. Questa peculiarità fa del grafene un ottimo conduttore in quanto la mobilità elettronica in esso è elevata e mostra una conduttività superiore a quella del rame, per questo motivo lo si impiega nella costruzione di devices elettronici come **transistor** con frequenze di funzionamento superiore ai 150GHz valore di gran lunga più grande dei corrispettivi dispositivi in AsGa.

La storia del grafene è molto antica, infatti le prime osservazioni risalgono al 1859 quando il chimico BENJAMIN BRODIE inserendo un campione di grafite all'interno di un forte acido ottenne ciò che lui definì *acido carbonico*, in realtà lui credette di aver scoperto un nuovo tipo di carbonio, mentre noi oggi sappiamo che si tratta di cristalli di ossido di grafite.

Successivamente, agli inizi del novecento per mezzo della **cristallografia a raggi X**, si dimostra che questo acido carbonico consisteva in *piani atomici* debolmente legati.

Nel 1948 G. RUESS e F. VOGHT usando la TEM (*microscopia a trasmissione elettronica*) dopo aver fatto asciugare una goccia di acido carbonico osservarono la formazione di fiocchi di alcuni nanometri di spessore.

Nel 1962 ULRICH HOFMANN e HANNS-PETER BOEHM osservando frammenti di ossido di grafite si accorsero che erano formati da piani monostrato. Questa scoperta fu di discreto interesse fino al 2010 in quanto la tecnologia non permetteva una buona definizione del materiale, tuttavia si può attribuire a loro

almeno la corretta idea che tra i residui dovevano esserci dei *monostrati*. Nel 1975 A. J. VAN BOMMEL dimostrò per la prima volta la possibilità della *crescita epitassiale* del grafene su un substrato di materiale isolante come **SiC**. Nel 1990 HEINRICH KURZ con il suo gruppo riporta una particolare tecnica per separare otticamente sottili strati per mezzo di nastro trasparente definita **scotch tape**. Ulteriori osservazioni fino precedenti al 2004 derivano dall'utilizzo di microscopi sempre più potenti.

A livello teorico troviamo delle pubblicazioni intorno al 1947 quando PHIL WALLACE affrontò il primo calcolo sulle bande energetiche e comprende le proprietà elettroniche della grafite. Successivamente tra il 1984 ed il 1988 GORDON SEMENOFF e DUNCAN HALDANE capirono che il grafene poteva essere un banco di prova nella materia condensata per la QED in 2 dimensioni. Molte teorie divennero quindi obbiettivo di osservazioni sperimentali ben prima del 2004. Infatti già negli anni precedenti emersero idee sull'applicazione del grafene nell'ambito della microelettronica: nel 1970 HANS-JOACHIM TEUSCHLER brevettò un transistor ad effetto di campo composto di *grafite pirolitica* piuttosto che in SiC e nel 1995 THOMAS EBBESEN e HIDEFUMI HIURA prevedono la possibilità di basare la *nanoelettronica* sul grafene. La scoperta che si pone come chiave di volta sull'argomento è quella effettuata da K.S. NOVOSELOV e A.K. GEIM che nel 2004 riuscirono ad isolare il singolo strato di grafene, mediante la tecnica dello *scotch tape*, aprendo quindi tutte le porte alle possibili sperimentazioni ed applicazioni[7]. Gli impieghi attuali di questo materiale sono variegati quali ad esempio *pannelli fotovoltaici, batterie, monitor super-sottili, membrane, lubrificanti a secco* ed altri ancora. La sua semplice reperibilità, si pensi solo alle matite, lo rende un materiale molto accessibile, per questo motivo si investe molto sulla ricerca in tutto il mondo per conoscere tutte le sue proprietà ed i possibili usi in ambito tecnologico.

Capitolo 1

Reticoli e Bande Elettroniche

In questo capitolo descriveremo la struttura del grafene partendo dalla definizione del reticolo e le sue proprietà fino ad arrivare a descrivere l'Hamiltoniana che descrive le bande elettroniche adottando l'approssimazione di *Tight-Binding* e vedremo emergere i fermioni di Dirac come eccitazioni a bassa energia negli intorno dei punti di minimo relativo dello spettro dell'Hamiltoniana.

1.1 Il Carbonio

Il carbonio isolato presenta una struttura del tipo $(1s)^2(2s)^2(2p)^4$ e può disporsi in due diversi allotropi il diamante ed il grafene. Mentre nel diamante la struttura reticolare è tetraedrica comportando l'assorbimento di tutta la valenza elettronica e presentandosi come un ottimo isolante, nel grafene la struttura è composta da 3 ibridazioni sp^2 e due orbitali p .

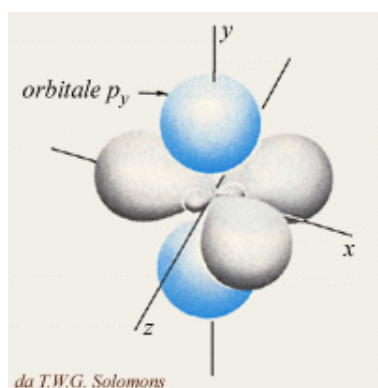


Figura 1.1: Ibridazione SP2

Ogni atomo di carbonio per mezzo degli sp^2 si lega ad altri atomi generando una particolare struttura a nido d'ape. La distanza tra due atomi nel reticolo è pari a $\mathbf{d} = 1,42\text{\AA}$.

1.2 Descrizione del Reticolo

Per lo studio delle sue proprietà definiamo un un **reticolo di Bravais**[1] che per proprietà di simmetria spaziale sarà un *reticolo con base*. Possiamo definire

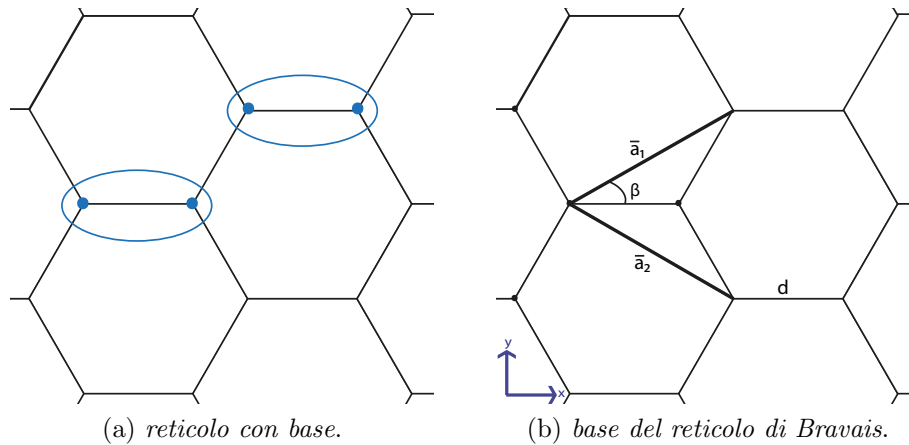


Figura 1.2: struttura del reticolo del Grafene

i vettori del reticolo in funzione della distanza interatomica e dell'angolo che essi formano con il segmento che unisce i 2 atomi vicini.

$$\vec{a}_1 = d\sqrt{3}(\text{sen}\beta, \text{cos}\beta)$$

$$\vec{a}_2 = d\sqrt{3}(\text{sen}\beta, -\text{cos}\beta)$$

che calcolati nel nostro caso per $\beta = 30^\circ$ danno :

$$\vec{a}_1 = \frac{d}{2}(3, \sqrt{3})$$

$$\vec{a}_2 = \frac{d}{2}(3, -\sqrt{3})$$

Costruiamo adesso i vettori del **reticolo reciproco** partendo dalla definizione generale:

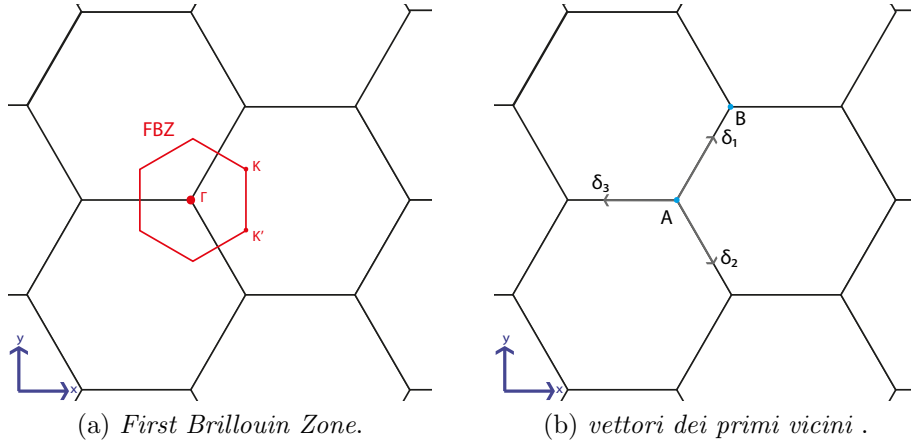
$$\boxed{\vec{a}_i \cdot \vec{b}_j = 2\pi\delta_{ij}} \quad (1.1)$$

ottendendo i vettori:

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3d}(1, \sqrt{3})$$

$$\vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3d}(1, -\sqrt{3})$$

Possiamo così costruire la **First Brillouin Zone**, come da definizione dalla cella di *Wigner-Seitz* costruita nello spazio dei momenti. Questa è ottenuta dal piano di bisezione dei vettori $\vec{\delta}_1, \vec{\delta}_2, \vec{\delta}_3$, che collegano, nello spazio reale, gli atomi del reticolo più vicini all'atomo che noi prendiamo come origine.



Tali vettori saranno:

$$\vec{\delta}_1 = \frac{d}{2}(1, \sqrt{3})$$

$$\vec{\delta}_2 = \frac{d}{2}(1, -\sqrt{3}) \quad (1.2)$$

$$\vec{\delta}_3 = d(-1, 0)$$

mentre per il reticolo nello spazio dei momenti saranno gli stessi ma presi negativamente.

Possiamo definire i vettori nella FBZ come:

$$\vec{k} = \alpha_1 \vec{b}_1 + \alpha_2 \vec{b}_2 \quad 0 \leq \alpha_{1,2} < 1 \quad (1.3)$$

Descriviamo inoltre i vettori generici dello spazio dei momenti:

$$\vec{K} = m_1 \vec{b}_1 + m_2 \vec{b}_2 \quad m_{1,2} \in \mathbb{Z}$$

Possiamo vedere esplicitamente la posizione degli angoli della **FBZ**:

$$\begin{cases} \vec{K} = \frac{2\pi}{3d}(1, \frac{1}{\sqrt{3}}) \\ \vec{K}' = \frac{2\pi}{3d}(1, \frac{-1}{\sqrt{3}}) \end{cases} \quad (1.4)$$

infine conoscendo la distanza interatomica:

$$d = 1,42A^\circ$$

possiamo facilmente ricavare la lunghezza dei vettori:

$$|\vec{a}| = |\vec{a}_1| = |\vec{a}_2| = 2,46A^\circ$$

1.3 Costruzione delle Bande Elettroniche

Per la definizione delle bande elettroniche, formate dagli elettroni degli orbitali π , in prima approssimazione possiamo usare il *Modello a Legame stretto* o *Tight-Binding Model*[1].

Approssimazione di Tigth-Binding Questa approssimazione è possibile quando gli ioni del reticolo cristallino che formano il background di cariche positive sono rarefatti, ossia gli atomi più vicini sono separati tra loro da una distanza di gran lunga superiore al *raggio di Bohr* ritrovandoci così in un **limite quasi atomico**, motivo per cui la funzione d'onda elettronica è concentrata sui centri reticolari. In questo caso la sovrapposizione delle funzioni d'onda atomiche è abbastanza grande da richiedere correzioni alla rappresentazione di singolo atomo ma non abbastanza da rendere la descrizione irrilevante. Inoltre sempre per via della distanza si considerano le interazioni solo con gli atomi più vicini detti *Nearest-Neighbor*.

1.3.1 Funzioni d'Onda Elettroniche

Si usa per la descrizione degli elettroni una base di **stati di Wannier** descritti come:

$$|\phi_{\mathbf{R}n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} |\psi_{\mathbf{k}n}\rangle \quad (1.5)$$

Utilizzando le funzioni di Wannier come *base* possiamo definire l'Hamiltoniana, in quanto *stati localizzati* che giocano il ruolo degli orbitali atomici degli atomi isolati. Per definirli abbiamo bisogno di fare un excursus sulla descrizione delle funzioni d'onda degli elettroni in un *potenziale periodico*.

Stati di Bloch Per il *Teorema di Bloch*[1] considerata l'Hamiltoniana:

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r})$$

dove il potenziale considerato, poichè trattiamo il caso di atomi nel reticolo, può essere considerato periodico dunque:

$$U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{R})$$

presenta degli autostati:

$$\boxed{\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})} \quad (1.6)$$

definiti con condizioni al contorno del tipo:

$$u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}) = u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$$

Stati di Wannier Adesso abbiamo gli elementi per rappresentare formalmente, espandendo nelle coordinate, l'equazione (1.6) otteniamo:

$$\langle \mathbf{r} | \phi_{\mathbf{R}n} \rangle = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \langle \mathbf{r} | \psi_{\mathbf{k}n} \rangle$$

$$\phi_{\mathbf{R}n}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \psi_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})$$

inserendo la forma completa degli stati di Bloch otteniamo:

$$\boxed{\phi_{\mathbf{R}n}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{R})} u_{\mathbf{k}n}(\mathbf{r})} \quad (1.7)$$

Passiamo ora a definire il campo quantistico delle funzioni di Wannier[4]:

$$\boxed{\hat{\phi}_n = \sum_{\mathbf{R}} C_{\mathbf{R}} \phi_{\mathbf{R}n}(\mathbf{r})} \quad (1.8)$$

dove l'operatore $C_{\mathbf{R}}$ è definito in *Seconda Quantizzazione* come **Operatore di Distruzione** e può essere scritto come:

$$C_{\mathbf{R}} = \int d\mathbf{r} \phi_{\mathbf{R}n}^*(\mathbf{r}) \hat{\phi}_n$$

1.3.2 Costruzione dell'Hamiltoniana

Per descrivere la dinamica assumiamo che i nuclei siano fermi e non apportino contributo dinamico al sistema. Questa è definita **Approssimazione di Bohr-Oppenheimer**[1]. Possiamo quindi scrivere l'Hamiltoniana come:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}_{ee}$$

dove:

\hat{H}_0 è l'Hamiltoniana ad un corpo

$$\hat{H}_0 = \sum_{\sigma} \int_V d\mathbf{r} \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right] \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r})$$

\hat{V}_{ee} è il termine di interazione interelettronica

$$\hat{V}_{ee} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int_V d\mathbf{r} \int_V d\mathbf{r}' v(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \hat{\psi}_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\mathbf{r}') \hat{\psi}_{\sigma}(\mathbf{r}) \hat{\psi}_{\sigma'}(\mathbf{r}')$$

Nell'approssimazione di *Tight-Binding* il termine relativo all'interazione interelettronica sparisce per via delle lunghe distanze reticolari. Possiamo così trattare gli elettroni come singole particelle.

Sviluppando ulteriormente la H_0 ossia inserendo le (1.8) si osserva:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\sigma\mathbf{R}\mathbf{R}'} \int_V d\mathbf{r} \phi_{\sigma\mathbf{R}}^*(\mathbf{r}) \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right] \phi_{\sigma\mathbf{R}'}(\mathbf{r}) C_{\mathbf{R}\sigma}^{\dagger} C_{\mathbf{R}'\sigma}$$

Attraverso sviluppi ulteriori che trattiamo nell'Appendice (A) perveniamo all'Hamiltoniana:

$$\hat{H}_0 = -t \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle_{\sigma}} (C_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{R}) C_{\sigma}(\mathbf{R}') + C_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{R}') C_{\sigma}(\mathbf{R})) \quad (1.9)$$

possiamo sostituire i vettori della base del *reticolo di Bravais* per definire gli operatori sui centri reticolari:

$$\begin{aligned} \mathbf{R} &= n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 \\ \mathbf{R}' &= \mathbf{R} + \frac{1}{3}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2) \end{aligned}$$

al variare del vettore \mathbf{R} ci posizioneremo su centri reticolari diversi. Nell'Hamiltoniana dobbiamo inserire, come detto in precedenza, solo le interazioni con gli atomi più vicini. Consideriamo quindi gli operatori:

$$C_{\sigma_1}(\mathbf{R}) = C_{\sigma}(\mathbf{R})$$

$$C_{\sigma_2}(\mathbf{R}) = C_{\sigma}(\mathbf{R} + \frac{1}{3}(\vec{a}_1 + \vec{a}_2))$$

Scriviamo l'Hamiltoniana come:

$$\hat{H}_0 = -t \sum_{\mathbf{R}\sigma} \left[C_{\sigma_1}^{\dagger}(\mathbf{R})C_{\sigma_2}(\mathbf{R}) + C_{\sigma_1}^{\dagger}(\mathbf{R})C_{\sigma_2}(\mathbf{R} - \mathbf{a}_1) + C_{\sigma_1}^{\dagger}(\mathbf{R})C_{\sigma_2}(\mathbf{R} - \mathbf{a}_2) + \right. \\ \left. C_{\sigma_1}(\mathbf{R})C_{\sigma_2}^{\dagger}(\mathbf{R}) + C_{\sigma_1}(\mathbf{R})C_{\sigma_2}^{\dagger}(\mathbf{R} - \mathbf{a}_1) + C_{\sigma_1}(\mathbf{R})C_{\sigma_2}^{\dagger}(\mathbf{R} - \mathbf{a}_2) \right]$$

Ci interessa adesso passare nello *spazio dei momenti*, possiamo farlo per mezzo di una *trasformazione canonica* che preserva le operazioni di commutazione che definiscono gli operatori di creazione e distruzione, ossia per mezzo di una *trasformata di Fourier*:

$$C_{\sigma_1}^{\dagger}(\mathbf{R}) = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} \tilde{C}_{\sigma_1}^{\dagger}(\mathbf{k})$$

Questa operazione ci è consentita dalla *discretizzazione dei k* (1.2) garantitaci dalle **Condizioni di Born Von-Kármán** discussa nell'Appendice(B). Sfruttando l'invarianza dell'Hamiltoniana per variazioni di \mathbf{R} e la condivisione della cardinalità di \mathbf{R} nello spazio reale con i \mathbf{k} nello spazio dei momenti, possiamo scrivere:

$$\tilde{C}_{\sigma_1}^{\dagger}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{N_c}} \sum_{\mathbf{R}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} C_{\sigma_1}^{\dagger}(\mathbf{R})$$

Scriviamo l'Hamiltoniana nel seguente modo:

$$\hat{H}_0 = -t \sum_{\mathbf{R}\mathbf{R}'\sigma} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \tilde{C}_{1\sigma}(\mathbf{k}) \tilde{C}_{2\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}') e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}} \left[1 + e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{a}_2} \right] \\ \tilde{C}_{2\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}') \tilde{C}_{1\sigma}(\mathbf{k}) e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{R}} \left[1 + e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{a}_2} \right] \\ = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left[-tf(\mathbf{k}) \tilde{C}_{1\sigma}(\mathbf{k}) \tilde{C}_{2\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) - tf^*(\mathbf{k}) \tilde{C}_{2\sigma}(\mathbf{k}) \tilde{C}_{1\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) \right] \\ = \sum_{\mathbf{k}\sigma} (\tilde{C}_{1\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k}) \tilde{C}_{2\sigma}^{\dagger}(\mathbf{k})) \begin{pmatrix} 0 & -tf(\mathbf{k}) \\ -tf^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{C}_{1\sigma}(\mathbf{k}) \\ \tilde{C}_{2\sigma}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}$$

dove abbiamo definito la funzione:

$$f(\mathbf{k}) = 1 + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2}$$

Sfruttando la relazione (1.1) e la (1.2) possiamo riscrivere:

$$f(\alpha_1, \alpha_2) = 1 + e^{i2\pi b_1} + e^{i2\pi b_2}$$

Diagonalizzando la matrice 2x2 dell'Hamiltoniana ricaviamo la **relazione di dispersione** ossia gli autovalori dell'Hamiltoniana.

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \pm|t||f(\mathbf{k})| = \pm|t|\sqrt{3 + 2\cos 2\pi k_1 + 2\cos 2\pi k_2 + 2\cos 2\pi(k_1 - k_2)} \quad (1.10)$$

dove troviamo degli zeri per i valori:

$$(\alpha_1, \alpha_2) = \left(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}\right) \wedge \left(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}\right)$$

che sostituiti nell'equazione (1.3) ci danno i vettori (1.4). In questo caso, come

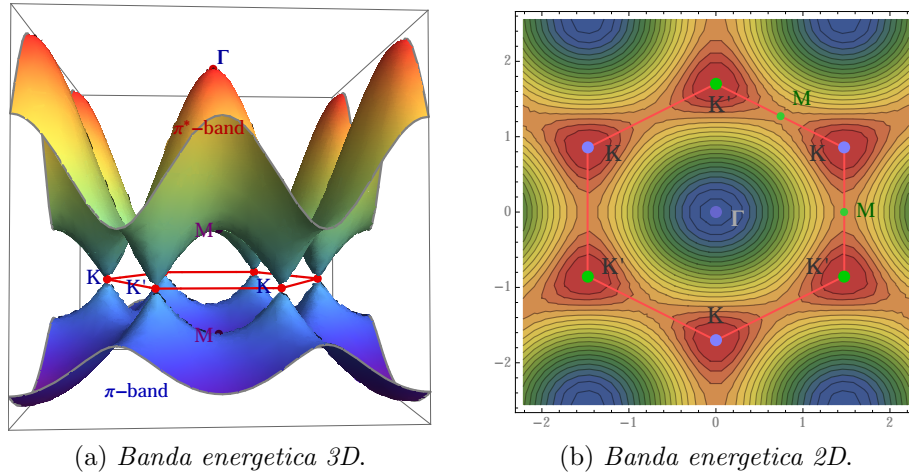


Figura 1.3: spettro energetico del grafene: Graphene Brillouin Zone and Electronic Energy Dispersion from the Wolfram Demonstrations Project [14]

si evince dalla figura(1.3 ,1.4), sui \mathbf{K} e \mathbf{K}' i livelli della *banda di conduzione* e della *banda di valenza* si toccano palesando un gap nullo in questi due punti. La parte negativa e quella positiva della relazione di dispersione ci fanno vedere l'andamento della *banda di valenza* e la *banda di conduzione*. Nei punti in cui

è nulla queste due vanno a toccarsi.

Definiamo gli operatori di creazione e distruzione per le due bande:

$$\begin{cases} d_{1\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{tf(\mathbf{k})}{|tf(\mathbf{k})|} \tilde{C}_{1\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) - \frac{1}{\sqrt{2}} \tilde{C}_{2\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \\ d_{2\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{tf(\mathbf{k})}{|tf(\mathbf{k})|} \tilde{C}_{1\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) + \frac{1}{\sqrt{2}} \tilde{C}_{2\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \end{cases}$$

Possiamo così riscrivere l'Hamiltoniana come:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left[-t|f(\mathbf{k})|d_{1\sigma}(\mathbf{k})d_{1\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) - t|f(\mathbf{k})|d_{2\sigma}(\mathbf{k})d_{2\sigma}^\dagger(\mathbf{k}) \right]$$

Il grafene ha la banda di valenza totalmente riempita, comportamento tipico di un *isolante*. Tuttavia nei punti in cui le due bande si incontrano si fondono generando una singola banda, acquistando il comportamento tipico dei metalli.

Il grafene si presenta così come un **semi-metallo**.

Discutiamo la natura dello spettro energetico in un intorno del punto \mathbf{K} . Per la proprietà che vedremo da quest'analisi prenderanno il nome di **punti di Dirac**.

Se consideriamo lo sviluppo di $f(\mathbf{k})$ intorno a \mathbf{K} notiamo che assume la forma:

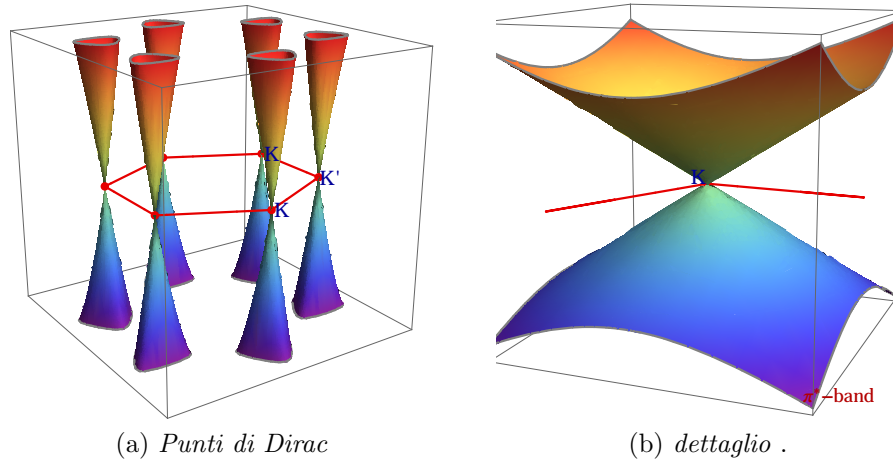


Figura 1.4: spettro energetico del grafene : Graphene Brillouin Zone and Electronic Energy Dispersion from the Wolfram Demonstrations Project [14]

$$f(\mathbf{k}) \simeq \frac{\sqrt{3}}{2} d [\pm(k_x - K_x) - i(k_y - K_y)]$$

Ponendo :

$$q_x = \pm(k_x - K_x) \quad q_y = (k_y - K_y)$$

riscriviamo l'Hamiltoniana come:

$$\begin{pmatrix} 0 & -tf(\mathbf{k}) \\ -tf^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} = -t\frac{\sqrt{3}}{2}d \begin{pmatrix} 0 & q_x - iq_y \\ q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix} \quad (1.11)$$

Come vedremo emergere dal successivo capitolo questa forma risulta formalmente simile all'Hamiltoniana dei **fermioni di Dirac senza massa**.

Si dimostrerà nel prossimo capitolo come dall'equivalenza:

$$t\frac{\sqrt{3}}{2}a = v_F\hbar \quad (1.12)$$

si ritrovi la *velocità delle particelle*, definita **velocità di Fermi** che risulta essere circa:

$$v_F \simeq \frac{c}{300}$$

Il valore della velocità di Fermi può essere ottenuto attraverso calcoli teorici per mezzo della teoria trattata in questo capitolo e dimostrata più in dettaglio nel secondo.

In realtà le particelle del grafene che vivono nei punti \mathbf{K} , non sono del tutto *senza massa* poichè l'accoppiamento *spin-orbita* non è zero. Questo termine tuttavia è molto piccolo in quanto l'atomo di carbonio è leggero ed il grafene ha simmetria di riflessione attorno al piano verticale passante attraverso le bande dei *nearest-neighbors* quindi la massa diventa del tutto trascurabile poichè ha un valore pari a[11]:

$$m_{\mathbf{K}} \simeq 10^{-3}meV$$

Capitolo 2

Fermioni di Dirac

Si passa ora a descrivere l'apparato teorico che sostiene la **Meccanica Quantistica Relativistica** per particelle con *Spin* $\frac{1}{2}$ che prendono il nome di *fermioni*.

Per poi focalizzare solo su una classe di questi: i **fermioni a massa nulla**, che condurranno alla medesima Hamiltoniana vista alla fine del capitolo precedente.

2.1 Note Storiche

Nel 1928 P.A.M DIRAC pubblicò un'equazione d'onda descrivente il moto (relativistico) dei fermioni in forma covariante, nel tentativo di rimediare alle difficoltà cui dava luogo l'*equazione di Klein-Gordon*, la più ovvia estensione relativistica dell'*equazione di Schrödinger*. Con questo suo lavoro Dirac riuscì a ripristinare la positività della *densità di probabilità*, tuttavia rimanevano in questa trattazione delle soluzioni ad *energia negativa* che lo porteranno ad ipotizzare l'esistenza di un **mare di particelle** che riempiono tutti gli stati ad energia negativa. Successivamente questi stati vennero interpretati come descrittivi le **antiparticelle**. Nel 1932 dai laboratori americani del *California Institute of Technology* C.D. ANDERSON, collaboratore di R.MILLIKAN, riconobbe e confermò l'esistenza dell'antielettrone, meritandosi l'assegnazione del Premio Nobel.

La scoperta ricevette subito degli assenti da parte della comunità scientifica, infatti il team europeo di BLACKETT ed OCCHIALINI, al *Cavendish Laboratory di Cambridge*, avevano ottenuto gli stessi risultati ma si erano mantenuto più cauti.

Nel 1955 E. SEGRÈ e O. CHAMBERLAIN scoprirono l'**antiprotone** ricevendo il Nobel nel 1959.

Nel corso degli anni diverse sono state le particelle che hanno trovato descrizione per mezzo di queste equazioni e sono state riassunte in un modello generale detto **Modello Standard**, sviluppato a cavallo degli anni sessanta e settanta. Questo modello è una teoria fisica che descrive tre delle quattro forze fondamentali (elettromagnetica, forza forte e forza debole) e tutte le particelle elementari ad esse collegate.

È interessante osservare alcune di queste particelle: i **neutrini**, comparsi nella letteratura scientifica nel 1930, in una lettera inviata il 4-12-1930 ad un congresso di fisica a Tubinga[15], da W.E. PAULI per spiegare l'annosa questione dello spettro energetico continuo dell'elettrone nel decadimento β^- . Una bellissima interpretazione teorica di questo fenomeno fu data dal fisico italiano E. FERMI nel 1933 con la sua **teoria del decadimento β^-** , infatti fu proprio lui ad assegnargli il nome[5]. Dalla teoria il neutrino emergeva come una particella senza massa, che rientrava quindi nel Modello Standard come *fermione a massa nulla*. Tuttavia studi successivi condotti da B. PONTECORVO negli anni 50', portarono a considerare questi particolari fermioni come particelle oscillanti tra un *sapore* ed un altro, processo possibile solo per particelle dotate di massa.

Le scoperte attuali condotte nei laboratori nel Gran Sasso ed il CERN hanno dimostrato la validità della teoria di Pontecorvo, allontanando la possibilità della descrizione per mezzo delle equazioni a massa nulla. Tuttavia i risultati ottenuti dal **grafene** riaprono la prospettiva di poter osservare questa particolare classe di particelle di Dirac nello stato solido.

2.2 Derivazione delle Equazioni di Dirac

Per costruire la sua funzione d'onda Dirac parte dall'*energia relativistica*.

$$E^2 = \vec{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \quad (2.1)$$

tuttavia questa relazione porta all'equazione di **Klein-Gordon** che presenta una discrepanza sulla definizione della densità di probabilità per via della comparsa di una derivata del secondo ordine nel tempo. Per questo motivo Dirac cerca di definire una relazione lineare tra l'energia ed il momento ponendo:

$$\boxed{E = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + mc^2\beta} \quad (2.2)$$

dove $\vec{\alpha}$ e β sono delle matrici 4x4 hermitiane che rendono consistente la relazione lineare con la relazione energetica (2.1).

Queste matrici soddisfano delle proprietà algebriche note come **Algebra di Clifford**:

$$\{\alpha^i, \alpha^j\} = 2\delta_{ij}\mathbb{1} \quad \{\alpha^i, \beta\} = 0 \quad \beta^2 = \mathbb{1} \quad (2.3)$$

Dirac ottenne una soluzione minimale che si esprime:

$$\alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix}; \quad \beta = \begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & -\mathbb{1} \end{pmatrix} \quad (2.4)$$

Per mezzo di un teorema possiamo dimostrare che tutte le rappresentazioni 4x4, di questa algebra, sono equivalenti alla rappresentazione di Dirac[2]. Definendo l'*Hamiltoniana*:

$$i\hbar\partial_t\psi = (-i\hbar c\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + mc^2\beta)\psi = \hat{H}_D\psi \quad (2.5)$$

descriviamo gli operatori: $\gamma^0 = -i\beta$, $\gamma^i = -i\vec{\sigma} \cdot \beta$.

Possiamo riscrivere l'equazione di Dirac in forma *covariante*:

$$\boxed{(\gamma^\nu \partial_\nu + \mu)\psi = 0} \quad (2.6)$$

dove abbiamo posto

$$\mu = \frac{mc^2}{\hbar}$$

Equazione di Continuità

Ricaviamo adesso l'equazione di continuità dall'Hamiltoniana.

Moltiplichiamo l'equazione (2.5) per la funzione d'onda e la sua hermitiana:

$$\psi^\dagger(i\hbar\partial_t\psi + i\hbar\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla}\psi - mc^2\beta\psi)$$

$$(i\hbar\partial_t\psi + i\hbar\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla}\psi - mc^2\beta\psi)\psi$$

facciamo la differenza tra le due ponendola uguale a zero, e otteniamo:

$$\partial_t(\psi\psi^\dagger) + \vec{\nabla} \cdot (c\psi^\dagger\vec{\alpha}\psi) = 0 \quad (2.7)$$

La densità di carica è definita positiva:

$$\psi^\dagger\psi \geq 0$$

e venne inizialmente interpretata come una *densità di probabilità*.

Teoria delle Buche

Per superare il problema emerso con la comparsa delle soluzioni ad energia negativa Dirac fu costretto ad abbandonare l'interpretazione della funzione d'onda di *singola particella*.

Egli definì così lo **stato di vuoto**, stato ad energia più bassa, come l'assenza di elettroni reali (in stati ad energia positiva) e gli stati ad energia negativa riempiti totalmente. Questo è il più profondo stato energeticamente stabile che può essere realizzato in presenza di vincoli, come un campo esterno. In assenza di campi esterni si presenta un continuo di stati ad energia negativa totalmente occupati da elettroni che prende il nome di **mare di Dirac**. Il fatto di avere tutti gli stati riempiti garantisce per via del *principio di esclusione di Pauli* l'impossibilità ad ogni altro elettrone di potervi entrare.

Tuttavia l'interazione di un fotone di sufficientemente energetico con lo stato di vuoto può eccitare una particella portandola ad occupare gli stati ad energia positiva generando così una coppia di **particella e buca**, lasciata dall'elettrone negli stati ad energia negativa, che verrà definita come l'antiparticella, (si veda la Fig(2.1)).

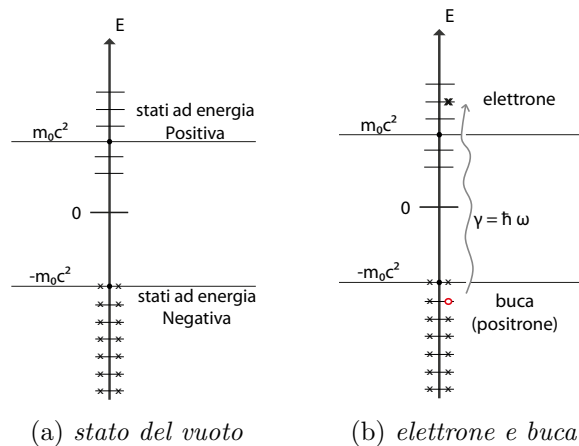


Figura 2.1: Teoria delle Buche

Possiamo osservare come risultino conservate sia la carica che l'energia:

$$Q_{buca} + e^- = 0$$

$$\hbar\omega = E_{elettrone} + E_{positrone}$$

dove le energie delle particelle sono ovviamente relativistiche[2][7].

2.3 Fermioni di Dirac, di Weyl e Majorana

Iniziamo ad addentrarci nella descrizione delle particelle a massa nulla, partendo da una panoramica sulle soluzioni delle equazioni di Dirac per questa particolare classe di particelle. Per una particella libera l'equazione di Dirac si presenta (forma hamiltoniana):

$$i\hbar\psi = (c\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta mc^2)\psi$$

Abbiamo definito precedentemente la forma esplicita per le matrici α^i e β , tuttavia esistono diversi modi per rappresentarle. Consideriamo la **rappresentazione di Weyl** o *rappresentazione chirale*, grazie alla quale riusciamo a disaccoppiare le componenti dello *spinore* ed isolare le soluzioni ad energia positiva ed energia negativa arrivando a scrivere l'equazione di Weyl come:

$$i\hbar\partial_t\chi_{\pm} = \pm c\vec{\sigma} \cdot \vec{p}\chi_{\pm}$$

Entrambi queste equazioni mischiano numeri complessi e numeri immaginari. Majorana osservò che è possibile scrivere le equazioni di Dirac con massa interamente in termini di numeri reali. Questo può essere realizzato scegliendo:

- $\vec{\alpha}$ totalmente reale
- β totalmente immaginario

Una volta che l'equazione è puramente reale, le sue soluzioni possono anche essere scelte puramente reali.

Nella *teoria dei campi quantizzati* un campo reale descrive una particella identica alla sua antiparticella[11].

2.4 Equazioni di Weyl e Fermioni a Massa Nulla

Partendo dall'equazione di Dirac senza il termine di massa ed in sole due dimensioni:

$$i\hbar\partial_t\psi = c\vec{\alpha} \cdot \vec{p}\psi$$

L'equazione d'onda di una tale particella può essere data con solo uno spinore poichè la necessità di utilizzare due spinori nasce dalla utilizzo di β .

Come anticipato nella sezione precedente per isolare le soluzioni ad energia positiva e negativa si utilizza la **rappresentazione chirale** dove le matrici α^i (con $i = 1, 2$) e β si scrivono esplicitamente:

$$\alpha^i = \begin{pmatrix} \sigma^i & 0 \\ 0 & \sigma^i \end{pmatrix}; \quad \beta = \begin{pmatrix} 0 & \mathbb{1} \\ \mathbb{1} & 0 \end{pmatrix} \quad (2.8)$$

Le proprietà di anticommutazione (2.3) delle α sono soddisfatte anche dalle sole matrici di Pauli σ^i . Per questo motivo possiamo riscrivere le equazioni precedenti:

$$i\hbar\partial_t\chi_{\pm} = \pm c\vec{\sigma} \cdot \vec{p}\chi_{\pm} \quad (2.9)$$

Le equazione stazionarie soddisfano l'equazione:

$$\hat{H}_w\chi_{\pm} = \pm c\vec{\sigma} \cdot \vec{p}\chi_{\pm}$$

che possiamo esplicitare come:

$$\hat{H}_w\chi_{\pm} = \pm(i\hbar c\vec{\sigma}\partial_{\mu})\chi_{\pm}$$

definendo lo spinore in seconda quantizzazione:

$$\chi_{\pm}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{x})a_{\mathbf{k}}$$

$$\chi_{\pm}^{\dagger}(\mathbf{x}) = \sum_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{x})a_{\mathbf{k}}^{\dagger}$$

Possiamo considerare delle soluzione in onda piana per le:

$$u_{\mathbf{k}}(x) = \frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$$

calcolo l'onda piana come:

$$\begin{aligned} \hat{H}_w &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle u_{\mathbf{k}}(x) | \hat{H}_w | u_{\mathbf{k}'}(x) \rangle = \\ &= i\hbar c\vec{\sigma} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \int_V d^3x \frac{1}{V} e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{x}} \partial_{\mu} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} a_{\mathbf{k}'}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} = \\ &= i\hbar c\vec{\sigma} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} i\mathbf{k} \int_V d^3x \frac{1}{V} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{x}} (a_{\mathbf{k}'}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}) = i\hbar c\vec{\sigma} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} i\mathbf{k} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}'}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \end{aligned}$$

ovvero:

$$\boxed{\hat{H}_w = -\hbar c\vec{\sigma} \cdot \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}}}$$

che possiamo esplicitare come:

$$\hat{H}_w = -\hbar c \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} 0 & k_x + ik_y \\ k_x - ik_y & 0 \end{pmatrix} a_{\mathbf{k}}^{\dagger} a_{\mathbf{k}} \quad (2.10)$$

È evidente adesso la somiglianza con l'equazione (1.11) a meno di uno shift delle coordinate. Compare inoltre la **velocità di Fermi** della (1.12) che possiamo facilmente definire effettuando un parallelismo tra la (1.11) e la (2.10) dove emerge l'equivalenza:

$$\boxed{\hbar c \equiv v_F \hbar}$$

Capitolo 3

Prove Sperimentali

In questo capitolo si affronta una visione più sperimentale per dimostrare la validità della fenomenologia descritta nei capitoli precedenti, dando una breve descrizione del tipo di ricerca e strumentazione per poi passare all'osservazione diretta del fenomeno.

3.1 Tecniche Sperimentali

3.1.1 Strumentazione

Per poter osservare i fermioni di Dirac, come si evince dal primo capitolo, dobbiamo osservare le eccitazioni a bassa energia dello spettro energetico. Per osservarlo si utilizza la **ARPES** *Angle-Resolved Photoemission Spectroscopy*, fin ora la prova principale, che consiste nel bombardare di fotoni il reticolo per far emettere *elettroni* che vengono così analizzati dallo spettroscopio. Conoscendo il momento reale dell'elettrone, attraverso delle *trasformate di Fourier*, ricostruisce la banda nel reticolo reciproco. Grazie a questo apparato si riesce a definire la struttura delle bande fino al livello di Fermi.

3.1.2 Metodi di Osservazione

Come è risaputo il grafene è presente in natura sottoforma di *grafite* ossia un aggregato di diversi piani di grafene, l'interazione tra i diversi piani interferisce alterando la formazione delle bande, per questo motivo è necessario un singolo piano per osservare la *dispersione lineare* fin ora discussa, si rimanda all'Appendice (C) per i dettagli.

Per ottenere un singolo strato è necessario quindi isolarlo e si usano per questo scopo dei **substrati** di diversi materiali (Es. SiC, h-NB) su cui viene depositato per **crescita epitassiale** lo strato di grafene, si utilizzano a tal

fine solo materiali in cui il *substrato* ha la stessa **orientazione cristallografica** dell'*epistrato*(grafene)e quando risulta possibile anche lo stesso passo reticolare. Al fine di limitare l'interferenza con l'epistrato si usa inoltre agire chimicamente sulla superficie del substrato cercando così di favorire lo studio del materiale senza interferire con le sue bande energetiche.

3.2 Gap e Simmetrie

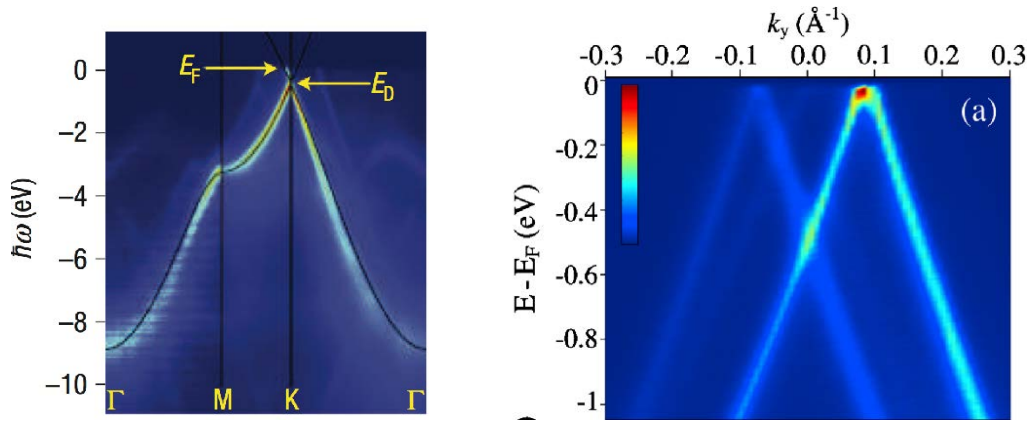
Ci sono delle simmetrie che controllano la formazione dei fermioni di Dirac dunque la linearità della relazione di dispersione. Nel grafene come si evince dal primo capitolo la **simmetria del reticolo**, dovuta alla ripetizione della cella unitaria nello spazio ossia alla presenza di un *reticolo di Bravais*, ci permette attraverso le approssimazioni usate di poter calcolare l'Hamiltoniana e la conseguente *relazione di dispersione*, abbiamo inoltre l'invarianza per inversione temporale in assenza di campi magnetici esterni che definisce la **simmetria temporale** [12]. Tuttavia ci sono molti fattori che possono indurre una **rottura della simmetria** provocando una variazione delle bande energetiche comportando l'*apertura di un gap*. Le rotture delle simmetrie possono essere causate sia da fattori esterni che interni al materiale come:

- interazione con il substrato
- campo magnetico esterno
- accoppiamento spin-orbita
- la dimensione finita
- interazione coulombiana di uno stato eccitato
- un diverso parametro di hopping tra due coni adiacenti

In realtà si contano 36 differenti instabilità che possono causare l'*apertura di un gap*. L'apertura di un gap dovuta alla rottura di una simmetria comporta la comparsa di un **termine di massa** [12].

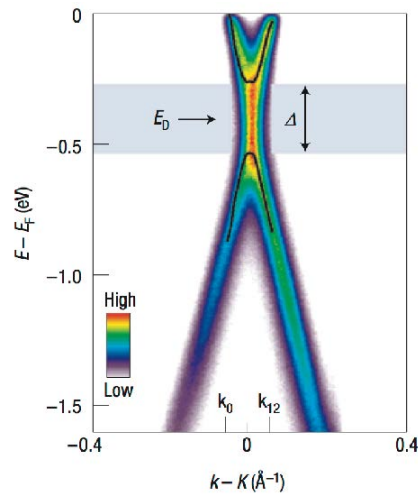
3.3 Osservazioni

Si mostrano ora delle misure della dispersione di un singolo piano di grafene cresciuto su *SiC(0001)*.



(a) ARPES misure di dispersione di un singolo strato di grafene cresciuto sulla superficie Si del SiC(0001)

(b) ARPES misure di dispersione di un singolo strato di grafene cresciuto sulla superficie C del SiC(0001)



(c) ARPES misure di dispersione di un singolo strato di grafene cresciuto sulla superficie Si del SiC

Figura 3.1: (a) Nature Physics, A. Bostwick et al., Nature Phys. 3, 36 (2007), copyright c (2007) [6]; (b) Phys. Rev. Lett. 103, 226803 (2009) [204]. Copyright c (2009) by the American Physical Society [10]; Nature Materials, S. Y. Zhou et al., Nature Mater. 6, 770 (2007), copyright c (2007) [13]

Nella (3.1a,c) possiamo vedere come intorno allo zero dell'energia la *dispersione* è lineare. Si palesa tuttavia un **gap energetico** tra il livello di Fermi ed il punto di Dirac, posizionato a circa 0,4eV (a) e 0,26eV(c)sopra. Questo gap tra le bande è essenzialmente dovuto all'interazione con il substrato.

Nella(3.1b) il punto di Dirac è circa 30meV, mentre sullo sfondo notiamo dei coni di Dirac *fantasma* dovuti ad ulteriori piani presenti sul sito che tuttavia sono elettronicamente disaccoppiati.

Possiamo notare la differenza di 3 ordini di grandezza tra i gap dovuti ad una diversa sistemazione del grafene sul substrato, dovuta alla differente interazione del grafene con i diversi atomi del substrato.

Conclusione

Possiamo concludere osservando come l'analisi sperimentale, condotta con la ASPEC mostra la linearità della relazione di dispersione del grafene intorno allo zero dando così evidenza empirica alla teoria sviluppata nei primi due capitoli palesando la presenza delle *particelle di Dirac* come eccitazioni a bassa energia dello spettro del grafene, ossia quelle senza massa che abbiamo visto emergere dalla teoria della meccanica quantistica relativistica per i fermioni.

Appendice A

Approfondimenti sull'Hamiltoniana di Tight-Binding

Consideriamo l'Hamiltoniana:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\sigma \mathbf{R} \mathbf{R}'} \int_V d\mathbf{r} \phi_{\sigma \mathbf{R}}^*(\mathbf{r}) \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right] \phi_{\sigma \mathbf{R}'}(\mathbf{r}) C_{\mathbf{R}\sigma}^\dagger C_{\mathbf{R}'\sigma}$$

Possiamo sostituire alle funzioni di Wannier la sua espansione in stati di Bloch ottenendo:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\sigma \mathbf{R} \mathbf{R}'} \int_V d\mathbf{r} \frac{1}{N_c} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{R})} u_{\sigma \mathbf{k}n}^*(\mathbf{r}) \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(\mathbf{r}) \right] e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{R})} u_{\sigma \mathbf{k}}(\mathbf{r}) C_{\mathbf{R}\sigma}^\dagger C_{\mathbf{R}'\sigma} \quad (\text{A.1})$$

Calcolando gli integrali otteniamo il tensore \mathbf{t} che rappresenta appunto i termini di overlapping tra le funzioni d'onda:

$$\hat{H}_0 = \sum_{\mathbf{R} \mathbf{R}' \sigma} t_{\mathbf{R} \mathbf{R}'} C_{\sigma \mathbf{R}}^\dagger C_{\sigma \mathbf{R}'}$$

Poichè gli *stati di Wannier* non sono autostati dell'Hamiltoniana, H_0 non è diagonale, mentre solo nel limite atomico ci si riconduce alla forma diagonale.

$$t_{\mathbf{R} \mathbf{R}'} \propto \delta_{\mathbf{R} \mathbf{R}'}$$

Tuttavia il tensore \mathbf{t} è costituito da quasi tutti i termini nulli. Vedremo infatti che per il grafene sarà presente un solo termine detto **Parametro di Hopping**:

$$t \simeq 2,8eV$$

Per la stima di questo valore è necessario integrare la (A.1) definendo il tipo di funzione $u_{\sigma\mathbf{k}n}$ ed il coefficiente del potenziale. Mentre la prima è definita teoricamente, dipende infatti dal tipo di soluzione della funzione di Bloch, la seconda è da determinare sperimentalmente. Tuttavia il calcolo esula dal contesto di questo lavoro per questo ci limitiamo a considerare il valore trovato nei testi e gli articoli di riferimento [1][4].

Inoltre uno studio più preciso potrebbe includere ulteriori termini della matrice $t_{\mathbf{R}\mathbf{R}'}$ e quindi considerare l'interazione con ulteriori atomi del reticolo. Tali termini distruggono la perfetta simmetria delle bande intorno al valore zero. Per ulteriori approfondimenti rimandiamo all'articolo di riferimento [11].

Appendice B

Condizioni di Born Von-Kármán

Attraverso l'imposizione di condizioni a contorno sulle funzioni d'onda possiamo dimostrare che il vettore d'onda \mathbf{k} deve essere reale e può acquistare solo determinati valori. Imponendo la condizione di periodicità:

$$\psi(\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) = \psi(\mathbf{r}) \quad i = 1, 2, 3$$

ed applicando il **Teorema di Bloch** troviamo:

$$\psi(\mathbf{r} + N_i \mathbf{a}_i) = e^{iN_i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i} \psi(\mathbf{r}) \quad i = 1, 2, 3$$

da cui si ricava:

$$e^{iN_i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i} = 1 \quad i = 1, 2, 3$$

Affinchè questa condizione sia soddisfatta dobbiamo avere:

$$N_i \mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i = 2\pi n \quad n \in \mathbb{Z}$$

Scomponendo \mathbf{k} con la (1.2) otteniamo:

$$(\alpha_1 \vec{b}_1 + \alpha_2 \vec{b}_2) \cdot \vec{a}_1 = 2\pi n$$

Conoscendo le condizioni (1.1) del reticolo reciproco osserviamo che:

$$\alpha_i = \frac{n}{N_i}$$

Dove con N_i indichiamo il numero di centri presenti nel reticolo in ogni direzione. Poiché questo numero è finito possiamo definire soltanto alcuni valori che può acquisire la variabile n siffatta in base alla condizione (1.1):

$$n = 0, \dots, N_i - 1$$

Appendice C

Interazione tra Diversi Piani di Grafene

Oltre che per il singolo piano di grafene sono stati condotti esperimenti anche su:

- grafite
- multistrato
- doppio strato

Anche per questi casi i dati sono stati presi per mezzo della ARPES, si discutono brevemente i risultati:

Grafite Osservando i risultati degli esperimenti si evince la presenza dei *fermioni di Dirac* che coesistono con delle bande paraboliche intorno ai punti K, dove i piani interagiscono.

Multistrato Le misure effettuate su piani di grafene cresciuti su *6H-SiC* hanno dimostrato uno spettro attorno ai punti K consistente con lo spettro di Dirac.

Doppio strato Per questa configurazione lo spettro non è lineare vicino a quelli che dovrebbero essere i punti di Dirac, ciò è giustificabile ammettendo che ci sia una interazione tra i piani di grafite.

Per approfondimenti rimandiamo all'articolo [\[12\]](#).

Bibliografia

Testi

- [1] N. W. ASHCROFT, N. D. MERMIN: Solid State Physics, Saunders College Publishing (1976)
- [2] FIORENZO BASTIANELLI : Equazioni d'onda relativistiche, Appunti per il corso di Fisica Teorica 1 - a.a. 2014/15
- [3] W. GREINER: Relativistic Quantum Mechanics, Wave Equations, Springer (2000).
- [4] FABIO ORTOLANI: Appunti di Teoria Quantistica della Materia.
- [5] EMILIO SEGRÈ, Personaggi e Scoperte della Fisica Contemporanea, Mondadori (1996)

Articoli

- [6] A. BOSTWICK, T. OHTA, T. SEYLLER, K. HORN, E. ROTENBERG, Nat. Phys. 3 (2007), p. 36
- [7] A K GEIM: Graphene prehistory, A K Geim 2012 Phys. Scr. 2012 014003
- [8] ANTHONY J. LEGGETT: Graphene: Electronic band structure and Dirac fermions
- [9] K.S. NOVOSELOV, A.K. GEIM, S.V. MOROZOV, D. JIANG, M.I. KATSNELSON, I.V. GRIGORIEVA, S.V. DUBONOS, A.A. FIRSOV: Two-Dimensional Gas of Massless Dirac Fermions in Graphene
- [10] M. SPRINKLE, D. SIEGEL, Y. HU, J. HICKS, A. TEJEDA, A. TALEB-IBRAHIMI, P. LE FEVRE, F. BERTRAN, S. VIZZINI, H. ENRIQUEZ, S. CHIANG, P. SOUKIASSIAN, C. BERGER, W.A. DE HEER, A. LANZARA, E.H. CONRAD, Phys. Rev. Lett. 103 (2009), p. 226803

- [11] OSKAR VAFEK:Dirac Fermions in Solids — from High Tc cuprates and Graphene to Topological Insulators and Weyl Semimetals.
- [12] T. O. WEHLINGA , A. M. BLACK-SCHAERC, AND A. V. BALATSKYD, Dirac materials , May 23, 2014)
- [13] S.Y. ZHOU, G.H. GWEON, A.V. FEDOROV, P.N. FIRST, W.A. DE HEER, D.H. LEE, F. GUINEA, A.H. CASTRO NETO, A. LANZARA, Nat. Mater. 6 (2007), p. 770

Link

- [14] Graphene Brillouin Zone and Electronic Energy Dispersion from the Wolfram Demonstrations Project, Contributed by VLADIMIR GAVRYUSHIN (Vilnius University, Lithuania) : <http://demonstrations.wolfram.com/GrapheneBrillouinZoneAndElectronicEnergyDispersion/>
- [15] http://scienzapertutti.lnf.infn.it/index.php?option=com_content&view=article&id=33:lettera-inviata-da-pauli-ai-partecipanti-ad-un-congresso-di-fisica-a-tubinga&Itemid=395:lettera-pauli

Ringraziamenti

In questo piccolo paragrafo intendo ringraziare tutti coloro che hanno contribuito alla stesura di questo lavoro. Innanzitutto vorrei esprimere la mia gratitudine alla Prof.ssa *Elisa Ercolessi*, relatrice della mia tesi, per l'aiuto e la grande disponibilità. Desidero inoltre ringraziare il Prof. *Giorgio Dragoni* ed il Prof. *Silvio Bergia* per il tempo dedicatomi, il Prof. *Fabio Ortolani* ed il Prof. *Fiorenzo Bastianelli* per le dispense fornitemi ed i preziosi consigli. Ringrazio con affetto la mia famiglia che mi ha sostenuto durante gli anni all'università e tutti i miei amici con cui ho trascorso le ore di studio che mi hanno portato a raggiungere questo traguardo.