

# La révolution du graphène

Tunis, Novembre 2011

Gilles Montambaux

## Quelques références de base

- Les premiers papiers
  - Electric field effect in atomically thin carbon films,  
K. Novoselov, A. Geim *et al.*, Science **306**, 666 (2004)
  - Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene,  
K. Novoselov, A. Geim *et al.*, Nature **438**, 197 (2005)
  - Experimental observation on the quantum Hall effect and Berrys phase in graphene,  
Y. Zhang, Y. Tan, H. Stormer and P. Kim, Nature **438**, 201 (2005)
  - Electronic confinement and coherence in patterned epitaxial graphene,  
C. Berger *et al.*, Science **312**, 1191 (2006)
  - Unconventional quantum Hall effect and Berry's phase of  $2\pi$  in bilayer graphene,  
K.S. Novoselov *et al.*, Nature Physics **2**, 177 (2006)
- Des papiers de revue
  - The rise of graphene,  
A. Geim and K. Novoselov, Nat. Mat. **6**, 183 (2007)
  - The electronic properties of graphene,  
A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov and A.K. Geim, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009)
  - The transport properties of graphene: An introduction,  
N.M.R. Peres, Rev. Mod. Phys. **82**, 2673 (2010)
  - Graphene: Status and prospects,  
A. Geim, Science **324**, 530 (2009)
  - Electronic transport in two dimensional graphene,  
S. Das Sarma, S. Adams, A. Hwang and E. Rossi, Rev. Mod. Phys. **83**, 407 (2011)
  - Epitaxial graphene electronic structure and transport,  
W. A. de Heer, C. Berger *et al.*, J. Phys. D: Appl. Phys. **43**, 374007 (2010)
  - Electronic properties of graphene in a strong magnetic field,  
M. O. Goerbig, Rev. Mod. Phys. **83**, 1193 (2011)

---

## Quelques exercices

### 1. Conductance

Vérifier que  $\frac{e^2}{h}$  a les dimensions d'une conductance.

### 2. Quelques propriétés

Le spectre électronique du graphène est décrit par l'hamiltonien effectif

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} 0 & f(\mathbf{k}) \\ f^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix}$$

où la fonction  $f(\mathbf{k})$  est donnée par  $f(\mathbf{k}) = -t(1 + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_2})$ .  $\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\sqrt{3}, 3)$  et  $\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(-\sqrt{3}, 3)$  sont des vecteurs élémentaires du réseau réel.  $t = 2,8eV$  est l'intégrale de transfert entre premiers voisins distants de  $a = 1,2ra$ .

1 - Montrer que la fonction  $f(\mathbf{k})$  s'annule pour  $\mathbf{K}^{(\prime)} = \pm \frac{\mathbf{a}_1^* - \mathbf{a}_2^*}{3}$  où  $\mathbf{a}_1^*$  et  $\mathbf{a}_2^*$  sont des vecteurs élémentaires du réseau réciproque. Développer la fonction au voisinage des deux points  $\mathbf{K}$  et  $\mathbf{K}'$ , et montrer que  $(\mathbf{k} = \mathbf{K}^{(\prime)} + \mathbf{q})$

$$f(\mathbf{k}) = \frac{3}{2}ta(\pm q_x - iq_y) .$$

où le signe  $\pm$  correspond aux deux vallées  $\mathbf{K}$  et  $\mathbf{K}'$ . En déduire que le spectre de basse énergie (autour du demi-remplissage) est donné par

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \pm \hbar v_F |\mathbf{q}|$$

Donner l'expression de la vitesse de Fermi  $v_F$  et son ordre de grandeur.

2 - Rappeler que la densité d'états à basse énergie est donnée par

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2}{\pi \hbar^2 v_F^2} |\varepsilon|$$

3 - Calculer l'énergie de Fermi  $\varepsilon_F$  en fonction de la densité  $n_c$  de porteurs de charge.

4 - Montrer que pour  $\varepsilon_F = 0$ , la chaleur spécifique  $C(T)$  varie comme

$$C(T) = \frac{8\zeta(3)}{\pi} k_B \left( \frac{k_B T}{ta} \right)^2 , \quad (1)$$

Expliquer qualitativement cette dépendance en énergie et la comparer à celle d'un gaz d'électrons massifs. Expliquer qualitativement comment varie la chaleur spécifique si le nombre de porteurs augmente de telle sorte que la température de Fermi devient supérieure à la température  $T$ .

5 - Montrer que la conductivité  $\sigma(\mu, T)$  varie comme

$$\sigma(\mu, T) = 2 \frac{e^2}{h} \frac{k_B T \tau_e}{\hbar} \ln(2 + 2 \cosh \beta\mu) . \quad (2)$$

Commenter les limites  $T \ll T_F$  et  $T \gg T_F$ , où  $T_F$  est la température de Fermi.

On rappelle que l'énergie totale  $E_t$  est donnée par

$$E_t(T) = \int_{-\infty}^{\infty} \varepsilon \rho(\varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (3)$$

La conductivité à température finie est donnée par

$$\sigma(T) = - \int_{-\infty}^{\infty} \sigma(\varepsilon) f'(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (4)$$

On donne les intégrales

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{\cosh^2 x} dx = \frac{9}{8} \zeta(3) \quad (5)$$

$$\int_0^{\infty} \frac{x}{\cosh^2(x-a)} dx = \ln(1 + e^{2a}) \quad (6)$$

### 3. Couplage second voisins

Find the dispersion relation for graphene, in the tight binding approximation, with nearest neighbor hopping  $t$  and next nearest neighbor hopping  $t'$ .

### 4. Einstein relation

For an electric field in the  $x$  direction, we define the conductivity  $\sigma$  as

$$j_x = \sigma E_x .$$

In a solid with several bands, the current density results from the contribution of all filled electronic states. In the absence of electric field, it reads:

$$j_x = -\frac{2}{V} \sum_{n, \mathbf{k}} e v_{n,x}(\mathbf{k}) f[\epsilon_n(\mathbf{k})] \quad (7)$$

where  $n$  stands for the contribution of several bands  $\epsilon_n(\mathbf{k})$ .  $V$  is the volume,  $f(\epsilon)$  is the Fermi distribution and  $-e$  is the electronic charge. The group velocity  $v_{n,x}(\mathbf{k})$  is given by

$$\hbar v_{n,x}(\mathbf{k}) = \frac{\partial \epsilon_n(\mathbf{k})}{\partial k_x} .$$

In the absence of electric field, check that the current vanishes.

An electric field  $E$  is applied along  $Ox$ . Show that there is a current  $j_x$  given by

$$j_x = -\frac{2}{V} \sum_{n, \mathbf{k}} e v_{n,x}(\mathbf{k}) f[\epsilon_n(\mathbf{k} - \Delta k_x \mathbf{i})] \quad (8)$$

where  $\mathbf{i}$  is a unitary vector along  $Ox$ . Give the value of  $\Delta k_x$ . We now assume that the collisions can be described by a friction force and a phenomenological time  $\tau_e$  called collision time (Drude). For simplicity, we assume that there is only one band at the Fermi level, with a dispersion relation  $\epsilon(\mathbf{k})$  and we write  $\hbar v_x(\mathbf{k}) = \partial \epsilon(\mathbf{k}) / \partial k_x$ . The contribution of deep lower bands is neglected. After a linearization of the Fermi function for a weak electric field, show that the conductivity reads

$$\sigma = 2 \frac{e^2 \tau_e}{V} \sum_{\mathbf{k}} v_x^2(\mathbf{k}) \left( -\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) \Big|_{\epsilon(\mathbf{k})} \quad (9)$$

and can be written in the form

$$\sigma = e^2 \tau_e \int_{-\infty}^{\infty} v_x^2(\epsilon) \rho(\epsilon) \left( -\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) dE \quad (10)$$

where  $\rho(\epsilon)$  is the density of states per volume unit and  $v_x^2(\epsilon)$  is the mean quadratic velocity at energy  $\epsilon$ , defined by

$$\rho(\epsilon) v_x^2(\epsilon) = \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}} v_x^2(\mathbf{k}) \delta[\epsilon - \epsilon(\mathbf{k})] \quad (11)$$

Deduce that the  $T = 0$  conductivity is given by

$$\sigma = e^2 D \rho(\epsilon_F) , \quad (12)$$

where  $\rho(\epsilon_F)$  is the density of states at the Fermi level and the diffusion coefficient  $D$  is given by

$$D = D(\epsilon_F) = v_x^2(\epsilon_F) \tau_e = v_F^2 \tau_e .$$

This expression, called Einstein relation, is quite general and does not depend on the dispersion relation.

*Check that for free electrons, it is equivalent to the Drude formula  $\sigma = ne^2 \tau_e / m$ .*

## 5. Klein tunnelling in graphene

(From Pierre Allain and Jean-Noël Fuchs, Klein tunneling in graphene: optics with massless electrons, Eur. Phys. J. B **83**, 301 (2011), arXiv:1104.5632)

The goal is to compute the probability transmission  $T$  of a graphene electron across a potential step or barrier — smooth at the lattice scale  $a \sim 0.1$  nm but sharp at the wavelength scale  $\lambda_F$  —. The single valley hamiltonian is:

$$H = v_F \mathbf{p} \cdot \boldsymbol{\sigma} + V(\mathbf{r}) \quad (13)$$

where the potential  $V$  is stepwise constant. In the following we take  $\hbar \equiv 1$  and  $v_F \equiv 1$ .

For a constant potential  $V(\mathbf{r}) = V_0$ , show that the (spinorial) plane wave is an eigenvector of the hamiltonian:

$$\varphi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \begin{pmatrix} 1 \\ \alpha e^{i\theta_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} \quad (14)$$

where  $\mathbf{k}$  is the wavevector,  $\tan \theta_{\mathbf{k}} = k_y/k_x$  gives the  $x$ -axis angle, the eigenenergy is  $E = \alpha k + V_0$  and the band index is  $\alpha = \text{sgn}(E - V_0)$ .

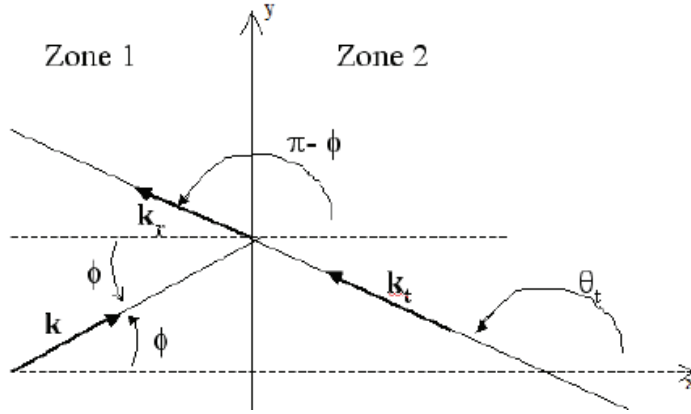


Figure 1: transmission through a potential step.

- Potential step (np junction)

Here  $V(\mathbf{r}) = 0$  if  $x < 0$  (region 1) and  $= V_0 > 0$  if  $x > 0$  (region 2). The electron is incident with an energy  $E > 0$ , which is below the step height  $V_0$ , and its momentum  $\mathbf{k}$  makes an angle  $\phi$  with the normal  $\tan \phi = k_y/k_x$  (figure 1).

- Show that the average velocity of a plane wave is  $\langle \varphi | \mathbf{v} | \varphi \rangle = \alpha \mathbf{k} / k$ .
- From the continuity of the (spinorial) wavefunction at the interface  $x = 0$ , obtain the reflection amplitude  $r$  and from there the transmission  $T = 1 - |r|^2$ .
- Show that the transmission probability  $T$  is *not* simply given by  $|t|^2$ , where  $t$  is the transmission amplitude.
- Consider the case of normal incidence  $\phi = 0$  (absence of backscattering).
- In the particular case  $E = V_0/2$  show that  $T = \cos^2 \phi$  (Cheianov and Falko 2006).
- Using the conservation of parallel momentum  $k_y$ , obtain the equivalent of the Snell-Descartes law  $n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2$  for an electron in graphene and show that the “optical index”  $n$  is proportional to the kinetic energy  $E - V_0$ . Discuss the case of negative optical index (Cheianov, Falko and Altshuler 2007).
- Show that total reflection is possible if  $E > V_0/2$  and compute the corresponding critical angle  $\phi_c$ . For angles  $\phi$  larger than  $\phi_c$ , there is an evanescent wave in region 2.
- Draw a “phase diagram” in the  $(\phi, E/V_0)$  plane indicating the critical angle  $\phi_c$  and the regions classically allowed or forbidden.

- Potential barrier (npn junction)

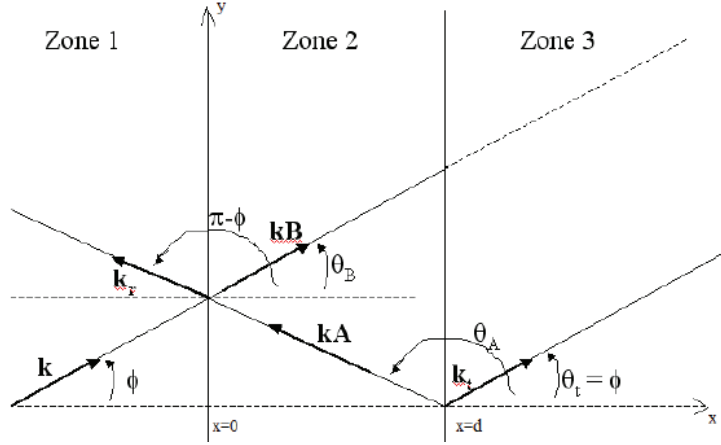


Figure 2: transmission through a potential barrier.

Here  $V(\mathbf{r}) = 0$  if  $x < 0$  (region 1) or  $x > L$  (region 3), and  $= V_0 > 0$  if  $L > x > 0$  (region 2). The electron is incident with an energy  $E > 0$ , which is below the barrier height  $V_0$ , and its momentum  $\mathbf{k}$  makes an angle  $\phi$  with the normal  $\tan \phi = k_y/k_x$ .

- Repeating the steps of the previous section, obtain the transmission  $T(\phi)$  and the Snell-Descartes law.
- Show that there are also (Fabry-Pérot) resonances when  $q_x L = \pi \times \text{integer}$ , where  $q_x$  is the  $x$ -component of the wavevector inside the barrier (region 2).
- Study the case  $E = V_0$  by taking the  $E \rightarrow V_0^-$  limit. Show that  $T(\phi) \approx \cosh^{-2}(k_y L)$  when  $|\phi| \ll 1$ .
- Show that  $T(\phi = 0) = 1$  for all energies  $E$  (absence of backscattering).

## 6. Niveaux de Landau dans le graphène

Un plan de graphène est soumis à un champ magnétique uniforme  $B$  perpendiculaire.

- (a) En choisissant la jauge appropriée, montrer que l'hamiltonien de basse énergie, pour une vallée, s'écrit

$$\hat{H} = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_x - i(p_y + eBx) \\ p_x + i(p_y + eBx) & 0 \end{pmatrix}$$

dont on cherche les fonctions propres sous la forme

$$\psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} a(x) \\ b(x) \end{pmatrix} e^{ik_y y}.$$

- (b) Montrer que l'opérateur  $\hat{H}^2$  est diagonal et chercher ses valeurs propres. Montrer que les énergies propres sont données par

$$\epsilon_n = \pm v_F \sqrt{2n\hbar eB}, \quad n \in \mathbb{N}$$

Comparer au cas du spectre d'une particule massive décrite par l'équation de Schrödinger.

- (c) Quelle est la dégénérescence d'un niveau de Landau ?  
 (d) Décrire qualitativement la séquence des plateaux de Hall dans le graphène.

## 7. Bicouches de graphène

Il est possible de réaliser expérimentalement des bicouches constituées de deux plans de graphène décalés, comme le montre la figure (3). Les deux couches sont décalées d'une distance  $a$  égale à la distance entre atomes de carbone. Les atomes  $A$  et  $\tilde{B}$  n'ont pas de vis à vis, mais les atomes  $B$  et  $\tilde{A}$  se font face. On note  $-t$  l'intégrale de transfert entre les atomes premiers voisins d'une même couche et  $\Delta$  l'intégrale de transfert entre les atomes  $B$  et  $\tilde{A}$ . Les atomes  $A$  et  $\tilde{B}$  ne sont pas couplés (figure 3).  $t \simeq 3$  eV et  $\Delta \simeq 0,3$  eV.

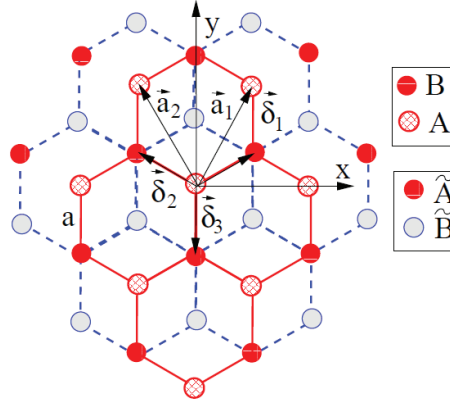


Figure 3: Structure d'une bicouche de graphène

1 - On cherche des solutions, combinaisons linéaires d'orbitales atomiques, sous la forme satisfaisant le théorème de Bloch

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j [\lambda_A |\varphi_j^A\rangle + \lambda_B |\varphi_j^B\rangle + \lambda_{\tilde{A}} |\varphi_j^{\tilde{A}}\rangle + \lambda_{\tilde{B}} |\varphi_j^{\tilde{B}}\rangle] e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \quad (15)$$

Montrer que les quatre  $\lambda_i$  sont solutions d'une équation matricielle de la forme

$$\hat{H} \begin{pmatrix} \lambda_{\tilde{A}} \\ \lambda_{\tilde{B}} \\ \lambda_A \\ \lambda_B \end{pmatrix} = \varepsilon \begin{pmatrix} \lambda_{\tilde{A}} \\ \lambda_{\tilde{B}} \\ \lambda_A \\ \lambda_B \end{pmatrix} \quad (16)$$

Écrire la matrice  $\hat{H}$ . On note  $\mathbf{a}_1$  et  $\mathbf{a}_2$  les vecteurs élémentaires du réseau de Bravais triangulaire (figure 3).

2 - Calculer les niveaux d'énergie. Combien y a-t-il de bandes? Montrer que

$$\varepsilon = \pm \left[ \frac{\Delta}{2} \pm \sqrt{|f|^2 + \frac{\Delta^2}{4}} \right] \quad (17)$$

Donner l'expression de la fonction  $f$ . Quelle est la relation de dispersion à basse énergie ( $\varepsilon \simeq 0$ )? Montrer que l'on peut définir une masse dont on donnera l'expression.

3 - Écrire un hamiltonien effectif qui décrit le spectre de basse énergie, au voisinage des points de Dirac  $\mathbf{K}$  et  $\mathbf{K}'$ . Pour cela, on note qu'à basse énergie,

$$\lambda_{\tilde{A}} \sim -\frac{f^*}{\Delta} \lambda_A \quad , \quad \lambda_B \sim -\frac{f}{\Delta} \lambda_{\tilde{B}} \quad (18)$$

4 - On applique un champ magnétique  $B$  dans la direction perpendiculaire à la bicouche. Utiliser la jauge de Landau pour écrire l'hamiltonien de basse énergie sous champ magnétique. Diagonaliser cet hamiltonien et montrer que les niveaux d'énergie quantifiés sont de la forme

$$\varepsilon_n(B) = \pm \hbar \omega_c \sqrt{n(n-1)} \quad (19)$$

Donner l'expression de la pulsation cyclotron  $\omega_c$ . On pourra introduire les quantités sans dimension  $\hat{P} = \frac{\hat{p}}{\sqrt{\hbar e B}}$  et  $\hat{X} = \hat{x} \sqrt{\frac{eB}{\hbar}}$ , où  $\hat{p}$  et  $\hat{x}$  sont les opérateurs impulsion et position. On a ainsi  $[\hat{X}, \hat{P}] = i$  et  $[\hat{P} - i\hat{X}, \hat{P} + i\hat{X}] = 2$ .

5 - La figure (4) montre la position des niveaux de Landau pour un gaz d'électrons libres, pour le graphène monocouche et bicouche. Commenter. Que se passe-t-il en  $\varepsilon = 0$  ?

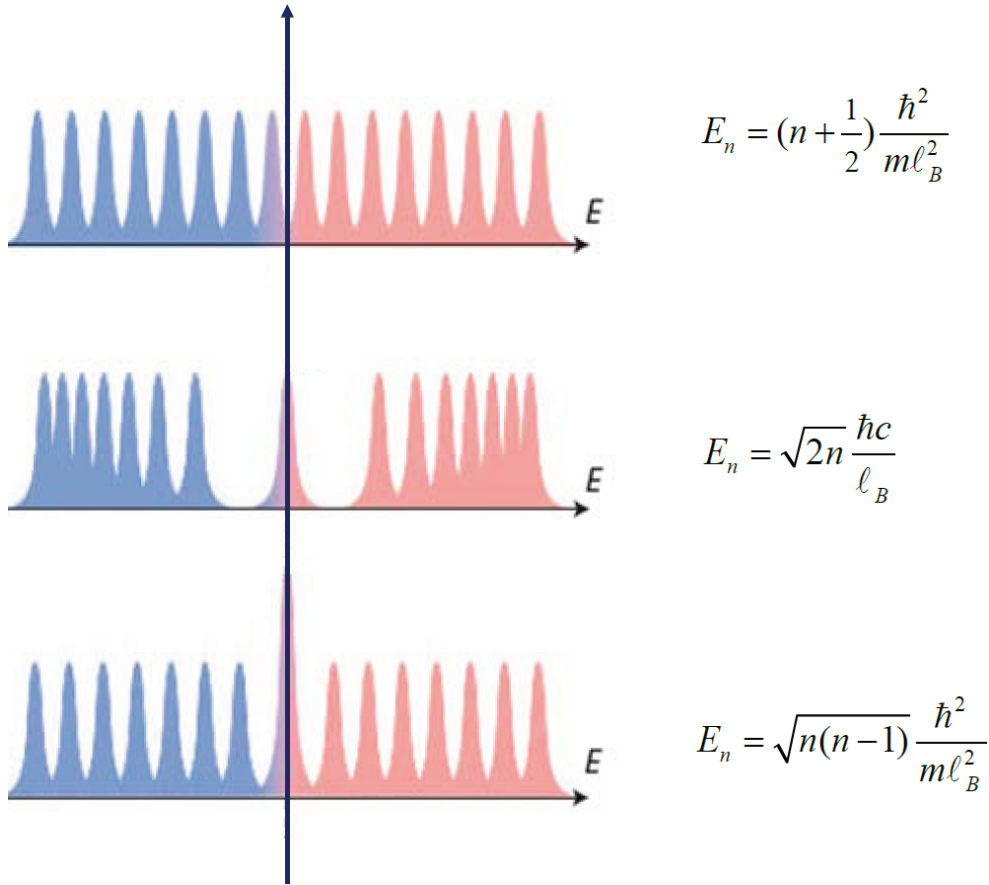


Figure 4: *Niveaux de Landau.*