

1 TEORIA A BUCIA PARASSA EFFICACE NEL TRASPORTO ELETTRONICO IN UN CRISTALLO

CASO SEMPLIFICATO A BUCIA PARTICOLARE ETEROGENA

$$H_0 = \frac{P^2}{2m} \Rightarrow \text{CORRISPONDE L'EQUAZIONE DIFF.} \rightarrow \frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Phi_0(\underline{r}) = E_0 \Phi_0(\underline{r})$$

DUOTE $\Phi_0(\underline{r}, \underline{k}) \propto e^{i \underline{k} \cdot \underline{r}}$ ONDA PIANA

APPLICANDO IL LAPLACIANO $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Phi_0 = \underbrace{\frac{\hbar^2 k^2}{2m}}_{E_0} \Phi_0$

$$H_0 \rightarrow E_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (\text{SE } \underline{p} = \hbar \underline{k} \quad E_0 \rightarrow \frac{p^2}{2m})$$

MA IN REALTA' ABBIAMO UN POTENZIALE RETICOLARE $V(\underline{r})$

DUOTE AGLI IONI RETICOLARI DEL CRISTALLO

DA CUI

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(\underline{r}) \Rightarrow \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\underline{r}) \right] \Phi_p(\underline{r}, \underline{k}) = \epsilon_p(\underline{k}) \Phi_p(\underline{r}, \underline{k})$$

$\epsilon_p(\underline{k})$ E' "ENERGIA DELLA BANDA ELETTRICA p VALUTATA A PARTIRE DA UN FONDO VALLE (ENERGIA AL PUNTO ZERO) $E_p^{(0)}$ "

$$\epsilon_p(\underline{k}) = E_p(\underline{k}) - E_p^{(0)}$$

SE \underline{k}_0 E' IL VETTORE D'ONDA CORRISPONDENTE ALLA POSIZIONE ESTREMA $E_p^{(0)}$ DELLA BANDA p . SVILUPPANDO IN POTENZE $(\underline{q} = \underline{k} - \underline{k}_0)$

$$E_p(\underline{k}) = E_p^{(0)} + \frac{1}{2} \sum_{\mu, \nu=1}^3 \frac{\Delta^2 E_p(\underline{k})}{\Delta q_\mu \Delta q_\nu} \Big|_{q_\mu=q_\nu=0} q_\mu q_\nu$$

DEFINIAMO IL TENSORE DI "MASSA EFFICACE INVERSA"

$$\frac{1}{m_{np}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\Delta^2 E_p(\underline{k})}{\Delta q_\mu \Delta q_\nu} \Big|_{q_\mu=q_\nu=0}$$

DA QUI:

$$E_p(\omega) = E_p(\hbar\omega) - E_p^0 = \sum_{i,j,k} \frac{\hbar^2 q_{ij} q_{jk}}{2 m_{ij}^*}$$

$\frac{1}{m_{ij}^*}$ è un tenore simmetrico che nei rif. degli assi principali del cristallo è diagonale

$$\frac{1}{m_{ij}^*} = \begin{pmatrix} \frac{1}{m_1^*} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{m_2^*} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{m_3^*} \end{pmatrix}$$

$$E_p(\omega) = \sum_p \frac{\hbar^2 q_p^2}{2 m_p^*}$$

NEL CASO SEMPLIFICATO DI ISOTROPIA DEL CRIStALLO $\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{m^*}$

$$E_p(\omega) = \frac{\hbar^2 q^2}{2 m^*}$$

ALLORA SE SIAMO IN PROSSIMITA' A UNA POSIZIONE ESTREMA DELLA BRAGLIA (A ALCUNO UN FONDO VALE MINIMO DELLA BRAGLIA)

$$\left\{ \begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_p \frac{\Delta^2}{\Delta x_p \Delta x_p} + V(\underline{r}) &\Rightarrow \left\{ \begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2} \sum_p \frac{1}{m_p^*} \frac{\Delta^2}{\Delta x_p \Delta x_p} \\ \Phi_p^{(0)} \propto e^{i(\underline{u}-\underline{u}_0) \cdot \underline{r}} \end{aligned} \right. \\ \Phi_p(\underline{u}, \underline{r}) &\Rightarrow \end{aligned} \right.$$

FA OTTENERE

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \sum_p \frac{1}{m_p^*} \frac{\Delta^2}{\Delta x_p \Delta x_p} \right\} \Phi_p^{(0)}(\underline{u}, \underline{r}) = \left\{ \sum_{p=1}^3 \frac{\hbar^2 q_p^2}{2 m_p^*} \right\} \Phi_p^{(0)}(\underline{u}, \underline{r})$$

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(\underline{r}) \Rightarrow H_{eff} = \sum_p \frac{P_p^2}{2 m_p^*} + E_p(\omega)$$

LIMITE DI QUESTA DESCRIZIONE:

(3)

1) VALE SOLO IN PROSSIMITA' DI UNA POSIZIONE ESTREMA

$$2) \frac{q}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left. \frac{\partial^2 E_p(u)}{\partial q^2 \partial p^2} \right|_{q_N = q_{P=0}} = \text{CONSTANTE}$$

3) SE L'ENERGIA NON E' QUADRATICA IN u NON SI FA A DEFINIRLA
 NECESSARIO ISTROPLO SI PARLA DI "BANDA PARABOLICA"

$$E_p(u) = \frac{\hbar^2 q^2}{2 m^*} = \frac{p^2}{2 m^*}$$

"BANDA NON PARABOLICA"

QUANDO SI DESCRIVE LA BANDA NON PARABOLICA (LONTANO DAL FONDO VALLE) SI USA LA RELAZIONE DI KANE

$$E_p = E_p(u) - E^0$$

" α " PARAMETRO DI NON PARABOLICITA'
 $[\alpha] = [E_p(u)]^{-1}$

$$E(1 + \alpha E) = \frac{\hbar^2 u^2}{2 m^*} = \chi(u)$$

DA CUI RISOLVENDO (FA SCELTA DI SOLUZIONI POSITIVE O NEGATIVE)

$$E_p(u) = \frac{-1 + \sqrt{1 + \alpha \chi(u)}}{2\alpha}$$

SE DEFINIAMO LA VELOCITA' DI GRUPPO

$$v(u) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial u} = \frac{\hbar u}{m^*(1 + \alpha E)} = \frac{\hbar u}{\tilde{m}}$$

ALLORA $\tilde{m} = m^*(1 + \alpha E)$ VIENE INTESA COME UNA "NUOVA MASSA EFFICACE"
 $\tilde{m} = \tilde{m}(E)$ IN MODO CHE $\underline{p} = \hbar \underline{u} = \tilde{m}(E) \underline{v}(u)$

ABBIAMO DEFINITO, ALLA TEORIA DI DE BROGLIE, UNA PARTICELLA MICROSCOPICA TRAMITE UN PACCHETTO D'ONDA DI FREQUENZA ω E LUNGHEZZA D'ONDA λ (IN QUESTO CASO POSSIAMO ASSIEME

$\omega = 2\pi\nu$ e $\lambda = \frac{2\pi}{k}$) DETERMINANDO LA CORRELAZIONE TRA L'ENERGIA E ED IL VETTORE D'ONDA \underline{k} E L'IMPULSO \underline{p}

$$(1) \quad \begin{cases} E = \hbar\omega \\ \underline{p} = \hbar\underline{k} \end{cases}$$

DA CUI POSSIAMO INTRODURRE LA VELOCITA' DI GRUPPO E LA VELOCITA' DI FASE DEL PACCHETTO TRAMITE LE RELAZIONI

$$v_g = \frac{\omega}{k} \quad v_p = \frac{1}{\hbar} \frac{\Delta E}{\Delta k_i} \quad \text{ESSENDO } E = E(\underline{k})$$

IN PARTICOLARE ASSUMENDO CHE E SIA UNA FUNZIONE ISOTROPA DI $|\underline{k}|$ AVREMO

$$v_i^{(g)} = \frac{1}{\hbar} \frac{\Delta E}{\Delta k_i} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \frac{\Delta k}{\Delta k_i} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk} \frac{k_i}{\sqrt{k_i^2 + k_j^2}} = \frac{dE}{dp} \frac{k_i}{|\underline{k}|}$$

ESSENDO $k_i = |\underline{k}| m_i$ (m_i VETTORE UNITARIO)

$$(2) \quad v_i^{(g)} = \frac{dE}{dp} m_i$$

ESSO' $v_i^{(g)} \uparrow \uparrow k_i$ ESSENDO m_i IL LORO VETTORE

DEFINIAMO IN UNO DEL TUTTO GENERALE LA "EFFECTIVE CONDUCTIVITY MASS" (MASSA EFFICACE) LA FUNZIONE \tilde{m} TRAMITE LA RELAZIONE

$$(3) \quad \tilde{m} v_i^{(g)} = \hbar k_i \quad (\text{ADORA IN AVANTI TRALCORRENDO L'IMPULSO (G)})$$

DA QUI $\tilde{m} \psi n_i = t k n_i$ O EQUIVALENTEMENTE LA (4)

RELAZIONE TRA I MODULI

$$\tilde{m} \psi = t k \quad (3bis)$$

ASSUMENDO CHE \tilde{m} SIA UNA FUNZIONE CRESCENTE DI ϵ (ALMENO LINEARE IN ϵ) , DA CUI (2) AVREMO

$$\tilde{m} = \frac{t k}{\frac{d\epsilon}{dP}} \Rightarrow \tilde{m}(\epsilon) \frac{d\epsilon}{dP} = P$$

CIO' AVREMO IN FORMA DIFFERENZIALE

$$\tilde{m}(\epsilon) d\epsilon = P dP \quad (4)$$

O EQUIVALENTEMENTE IN FORMA INTEGRALE

$$\int_{\epsilon_0}^{\epsilon} \tilde{m}(\xi) d\xi = \int_0^P z dz = \frac{P^2}{2} \quad (5)$$

ESSENDO ϵ_0 L'ENERGIA DELLO STATO FONDAMENTALE, CORRISPONDENTE AL VETTORE $\underline{k} = 0$ (O EQUIVALENTEMENTE $\underline{P} = 0$).

"TEORIA LINEARE"

ASSUMIAMO CHE \tilde{m} SIA (ALMENO) UNA FUNZIONE LINEARE (CRESCENTE) DELLA ENERGIA (CIO' ASSUMIAMO 270)

$$\tilde{m} = m^* [2\epsilon + 2\epsilon(\epsilon - \epsilon_0)] \quad (6)$$

DOVE m^* HA LE DIMENSIONI DI UNA MASSA E QUIVALE

d_0 È UN PARAMETRO ADIMENSIONALE NON TÈE d HA LE

(5)

DIMENSIONI FISICHE DI UNA (ENERGIA)⁻²

NOTA: POSSIAMO ELIMINARE m^+ RILABORANDO I DUE NUOVI PARAMETRI

$$\tilde{d}_0 = m^+ d_0 \quad \tilde{d} = d m^+$$

IL PROBLEMA LA (6) NELLA (5) È DA INTEGRARE AURORA

$$\int_{\tilde{e}_0}^{\tilde{e}} m^+ [d_0 + 2d(\xi - \tilde{e}_0)] d\xi = \frac{P^2}{2}$$

$$d_0(\tilde{e} - \tilde{e}_0) + d(\tilde{e} - \tilde{e}_0)^2 = \frac{P^2}{2m^+}$$

RISOLVENDO QUEST'ULTIMA RISPETTO AD $x = \tilde{e} - \tilde{e}_0$ AURORA

$$\tilde{e} - \tilde{e}_0 = \frac{-d_0 \pm \sqrt{d_0^2 + 4d \cdot \frac{P^2}{2m^+}}}{2d} \quad (7)$$

DA CUI LA RELAZIONE

$$\pm \sqrt{d_0^2 + \frac{2d}{m^+} (\hbar k)^2} = d_0 + 2d(\tilde{e} - \tilde{e}_0) \quad (8)$$

IN PARTICOLARE SE RICALCOLIAMO LA VELOCITA' DI GRUPPO

$$v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \tilde{e}}{\partial k_i} = \frac{\hbar k_i / m^+}{\pm \sqrt{d_0^2 + \frac{2d}{m^+} (\hbar k)^2}} = \frac{\hbar k_i}{m^+ [d_0 + 2d(\tilde{e} - \tilde{e}_0)]} \quad (9)$$

E' DA RITROVARE CHE

$$\tilde{m} = m^+ [d_0 + 2d(\tilde{e} - \tilde{e}_0)] \quad (10)$$

RI SCRIVIAMO QUINDI LE RELAZIONI

(6)

$$\left\{ \begin{aligned} \varepsilon &= \left(\varepsilon_0 - \frac{\alpha_0}{2\alpha} \right) + \frac{1}{2\alpha} \sqrt{\alpha_0^2 + \frac{2\alpha}{m^*} (\hbar k)^2} & (1^*) \\ \hat{m} &= m^* \left[\alpha_0 + 2\alpha (\varepsilon - \varepsilon_0) \right] & (2^*) \\ \hat{m} v_i &= \hbar k_i & (3^*) \end{aligned} \right.$$

SE ADESSO QUADRINAMO LA (2)

$$(m^* v)^2 \left[\alpha_0 + 2\alpha (\varepsilon - \varepsilon_0) \right]^2 = (\hbar k)^2$$

GAUCCIAMO LA (8)

$$(m^* v)^2 \left[\alpha_0^2 + \frac{2\alpha}{m^*} (\hbar k)^2 \right] = \hbar k$$

OTTENIAMO LA RELAZIONE

$$(m^* \alpha_0 v)^2 = (\hbar k)^2 \left[1 - 2\alpha m^* v^2 \right]$$

DEFINIAMO ORA "VELOCITA' DI SATURAZIONE" c^* LA QUANTITA'

OTTENUTA TRAMITE LA RELAZIONE

$$2\alpha m^* = \frac{1}{(c^*)^2} > 0 \quad (10)$$

AUREMO:

$$(\alpha_0 m^* v)^2 = (\hbar k)^2 \left[1 - \frac{v^2}{(c^*)^2} \right] \geq 0 \quad (11)$$

DA CUI OTTIENIAMO:

$$1) \quad c^* \rightarrow \infty \quad \Leftrightarrow \text{(DALLA (10))} \quad \alpha \rightarrow 0$$

QUINDI QUANDO $\lambda \rightarrow 0$ NON AVREMO ALCUNA VELOCITA' DI RITORNAZIONE ϵ_0

$$\hat{m} = d_0 m^+ = \text{costante}$$

(E AVERA UNA RAMPA ENERGETICA AI TIPO PARABOLICA, CON UNA MASSA EFFICACE COSTANTE \hat{m} , CIOE' CHE NON SARA' UNA FUNZIONE CRESCENTE DELL'ENERGIA) INFATTI INTEGRANDO LA (5)

$$\hat{m} (\epsilon - \epsilon_0) = \frac{p^2}{2} \Rightarrow \boxed{\epsilon - \epsilon_0 = \frac{p^2}{2\hat{m}} = \frac{(\hbar \kappa)^2}{2\hat{m}}}$$

2) DALLA (11) $v \leq c^+$ CON LA CONDIZIONE CHE

$$v = c^+ \Leftrightarrow d_0 = 0$$

DE FINIAMO QUINDI UN FATTORE DI LORENTZ

$$M = \left[1 - \frac{v^2}{(c^+)^2} \right]^{-1/2} \quad (12)$$

E RISCRIVIAMO LA (11) NELLA FORMA

$$(\hbar \kappa)^2 = (d_0 m^+ v)^2 M^2 \quad (13)$$

SE AGLI UTILIZZIAMO LA (13) POSSIAMO RISCRIVERE LE RELAZIONI (1+) E (2+) IN TERMINI DELLA VELOCITA' AI GRUPPO. INFATTI; SE CALCOLIAMO IL FATTORE

$$\sqrt{d_0^2 + \frac{2d_0}{m^+} (\hbar \kappa)^2} = \sqrt{d_0^2 + \frac{2d_0 m^+}{(m^+)^2} (d_0 m^+ v)^2 M^2} =$$

$$= |d_0| \sqrt{1 + \underbrace{2d m^+ v^2 M^2}_{\pm/(c^+)^2}} = |d_0| \sqrt{1 + \frac{v^2}{(c^+)^2} M^2} =$$

$$= |d_0| \sqrt{1 + \left(\frac{v}{c^+}\right)^2 \frac{1}{\left[1 - \left(\frac{v}{c^+}\right)^2\right]}} = |d_0| \sqrt{\frac{1 + \frac{v^2}{(c^+)^2}}{(c^+)^2 - v^2}} =$$

$$= |d_0| \sqrt{\frac{(c^+)^2}{(c^+)^2 - v^2}} = d_0 \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{(c^+)^2}}} = |d_0| \gamma$$

Però:

$$\sqrt{d_0^2 + \frac{2d}{m^+} (h\nu)^2} = |d_0| \gamma \quad (14)$$

Da cui:

$$d_0 + 2d(\epsilon - \epsilon'_0) = \pm \sqrt{d_0^2 + \frac{2d}{m^+} (h\nu)^2} = \pm |d_0| \gamma$$

in questo caso posso scrivere le (1+) e (2+)

DELLA FORMA:

$$\begin{cases} \epsilon = \left(\epsilon_0 - \frac{d_0}{2d} \right) \pm \frac{|d_0|}{2d} M & (1^+) \\ \tilde{m} = \pm |d_0| m^+ \gamma & (2^+) \end{cases}$$

$$\text{con } \begin{cases} M = \left[1 - \left(\frac{v}{c^+}\right)^2 \right]^{-1/2} \\ \tilde{m} v_i = h k_i \end{cases}$$

"CASI FISICI SIGNIFICATIVI"

(9)

CASO N°1: Sia $E_0 = \frac{d_0}{2d}$ (con $d \neq 0$) (15)

DALLI (1^*) , (1^*) O (2^*) , (2^*)

$$\begin{cases} E = \pm \sqrt{P^2 c^2 + (d_0 m^+ c^2)^2} = \pm \frac{|d_0|}{2d} M \\ \tilde{M} = \frac{E}{(c^*)^2} = \pm |d| m^+ M \end{cases} \quad (16)$$

SOTTOCASO 1-A Sia $d_0 = 1$ $c^+ = c$ (VELOCITÀ DELLA LUCE)

"PARTICELLA RELATIVISTICA" CON

$$\begin{cases} E = \pm \sqrt{P^2 c^2 + (m^+ c^2)^2} = \pm m^+ c^2 M \\ \tilde{M} = \frac{E}{c^2} = \pm m^+ M \end{cases}$$

LA PRIMA SI DICE RELAZIONE AI MASS-SHELL

OSSERVANDO CHE $P = \tilde{M} u = \pm \frac{m^+ u}{\sqrt{1 - (\frac{u}{c})^2}}$ $E = \pm \frac{m^+ c^2}{\sqrt{1 - (\frac{u}{c})^2}}$

DAL 4-VETTORE $P_\mu = [P_i, i \frac{E}{c}]$

$$P_\mu P_\mu = P^2 - \frac{E^2}{c^2} = +m^{+2} u_\mu u_\mu = -(m^+)^2 c^2$$

DACUI $E^2 = P^2 c^2 + (m^+)^2 c^4 \Rightarrow E = \pm \sqrt{P^2 c^2 + (m^+ c^2)^2}$

(DOVE GLI STATI A ENERGIA NEGATIVA SONO RIFERITI ALLE ANTIPARTICELLE)

$$d_0 = 0 \quad c^+ = v_F \Rightarrow E_0 = 0$$

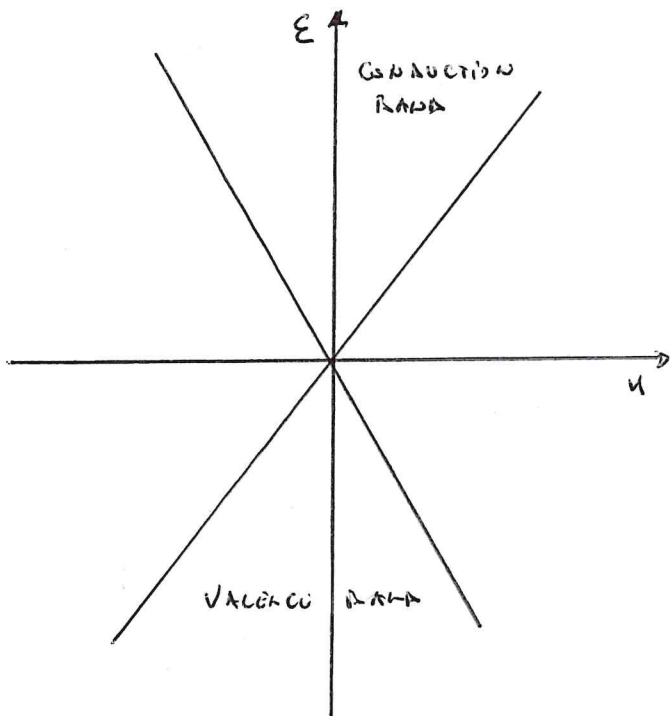
IN QUESTO CASO ESSENDO $d_0 = 0$ TUTTE LE PARTICELLE SI SPOSTANO CON VELOCITA' DI MODULO COSTANTE PARI ALLA VELOCITA' AI FERNI CHE COINCIDE CON LA VELOCITA' DI SATURAZIONE

$$\begin{cases} E = \pm \hbar v_F k \\ \tilde{m} = \frac{E}{v_F^2} \end{cases}$$

OSSERVIAMO CHE PER $d \rightarrow 0 \quad v = v_F \Rightarrow m \rightarrow +\infty$ MA LA QUANTITA

$$\pm |d_0| m m^+ \rightarrow \frac{E}{v_F^2} = \pm \frac{\hbar k}{v_F}$$

LE PARTICELLE SI MUOVONO SUI "CONI DI DIRAC" E IN QUESTO CASO



DOVEMMO ESSERE OBBLIGATORIAMENTE $E_0 = 0$ NON ABBIAMO GAP TRA LA BANDA DI VALENZA E LA BANDA DI CONDIZIONE

CASO N° 2

$\epsilon_0 \neq \frac{d_0}{2d}$

SOTTOCASO N° 2 A

POSIAMO $\frac{d_0}{d} = \gamma_1$ $C^+ = v_F$ VELOCITA' DI SATURAZIONE DEL MONOLAYER GRAPHENE.

$$\epsilon = \epsilon_0 - \frac{\gamma_1}{2} \pm \frac{|\gamma_1|}{2} \sqrt{1 + \frac{4 v_F^2}{\gamma_1^2} p^2}$$

DA CUI PUNCIAMO $\epsilon_0 = \begin{cases} 0 \\ \gamma_1 \end{cases}$

OTTENIAMO LE 4 BRANCHE IN PRIMA APPROSSIMAZIONE DEL BILAYER GRAPHENE CHE IN FORMA COMPATTA POSSONO ESSERE SCRITTE NELLA FORMA

$$\epsilon_{M,s}(p) = s \left\{ M \frac{\gamma_1}{2} + \frac{|\gamma_1|}{2} \sqrt{1 + \frac{4 v_F^2}{\gamma_1^2} p^2} \right\}$$

$$\tilde{M} = s \frac{\gamma_1}{2 v_F^2} \sqrt{1 + \frac{4 v_F^2}{\gamma_1^2} p^2}$$

DOVE PER OGNI COPPIA I VALORI $s=1$ E $s=-1$ RAPPRESENTANO LE BRANCHE DEGLI ELETTRONI D'AGLI CARICHI.

L'INDICE $M=-1$ DA UNA COPPIA DI BRANCHE VICINI ALLA ORIGINIA NELLA

L'INDICE $M=+1$ LA 2° COPPIA DI BRANCHE.

SE UTILIZZIAMO LA VELOCITA' DI GRUPPO AVREMO

$$\begin{cases} \epsilon_{M,s} = s \frac{\gamma_1}{2} \{ M + \tilde{M} \} \\ \tilde{M} = s \frac{\gamma_1}{2 v_F^2} M = s \frac{|\gamma_1|}{2 v_F^2} \left[1 - \frac{v^2}{v_F^2} \right]^{-1/2} \end{cases}$$

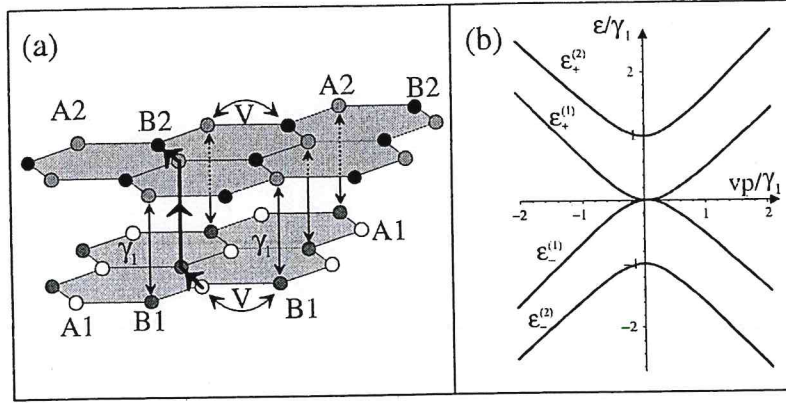


Fig. 1. (a) Schematic of the bilayer lattice containing four sites in the unit cell: A1 (white circles) and B1 (grey) in the bottom layer, and A2 (grey) and B2 (black) in the top layer. (b) Schematic of the low energy bands near the K point obtained by taking into account intralayer hopping with velocity v , $B1A2$ interlayer coupling γ_1 , $A1B2$ interlayer coupling γ_3 [with $v_3/v = 0.1$] and zero layer asymmetry Δ .

2 The tight binding model of bilayer graphene

We consider bilayer graphene to consist of two coupled hexagonal lattices with inequivalent sites $A1, B1$ and $A2, B2$ on the bottom and top graphene sheets, respectively, arranged according to Bernal ($A2$ - $B1$) stacking: as shown in figure 1(a), every $B1$ site in the bottom layer lies directly below an $A2$ site in the upper layer, but sites $A1$ and $B2$ do not lie directly below or above a site in the other layer. We employ the tight-binding model of graphite [20] by adapting the Slonczewski–Weiss–McClure parametrization [21, 22] of relevant couplings in order to model bilayer graphene. In-plane hopping is parametrized by coupling $\gamma_{A1B1} = \gamma_{A2B2} \equiv \gamma_0$ and it leads to the in-plane velocity $v = (\sqrt{3}/2)a\gamma_0/\hbar$ where a is the lattice constant. In addition, we take into account the strongest inter-layer coupling, $\gamma_{A2B1} \equiv \gamma_1$, between pairs of $A2$ - $B1$ orbitals that lie directly below and above each other. Such strong coupling produces dimers from these pairs of $A2$ - $B1$ orbitals, leading to the formation of high energy bands. We also include weaker $A1$ - $B2$ coupling $\gamma_{A1B2} \equiv \gamma_3$ that leads to an effective velocity $v_3 = (\sqrt{3}/2)a\gamma_3/\hbar$ where $v_3 \ll v$. Here, we write the Hamiltonian [7] near the centres of the valleys in a basis corresponding to wave functions $\Psi = (\psi_{A1}, \psi_{B2}, \psi_{A2}, \psi_{B1})$ in the valley K [23] and of $\Psi = (\psi_{B2}, \psi_{A1}, \psi_{B1}, \psi_{A2})$ in the valley \bar{K} :

$$\mathcal{H} = \xi \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\Delta & v_3\pi & 0 & v\pi^\dagger \\ v_3\pi^\dagger & \frac{1}{2}\Delta & v\pi & 0 \\ 0 & v\pi^\dagger & \frac{1}{2}\Delta & \xi\gamma_1 \\ v\pi & 0 & \xi\gamma_1 & -\frac{1}{2}\Delta \end{pmatrix}, \quad (1)$$

where $\pi = p_x + ip_y$, $\pi^\dagger = p_x - ip_y$, $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$ is the momentum measured with respect to the K point, $\xi = +1(-1)$ labels valley K (\bar{K}). The Hamiltonian takes into account asymmetry $\Delta = \epsilon_2 - \epsilon_1$ between on-site energies in the two layers, $\epsilon_2 = \frac{1}{2}\Delta$, $\epsilon_1 = -\frac{1}{2}\Delta$.

At zero magnetic field, the Hamiltonian \mathcal{H} has four valley-degenerate bands [7], $\epsilon_\pm^{(\alpha)}(\mathbf{p})$, $\alpha = 1, 2$, with

$$\begin{aligned} \epsilon^{(\alpha)2} &= \frac{\gamma_1^2}{2} + \frac{\Delta^2}{4} + \left(v^2 + \frac{v_3^2}{2}\right)p^2 \\ &+ (-1)^\alpha \left[\frac{(\gamma_1^2 - v_3^2 p^2)^2}{4} + v^2 p^2 [\gamma_1^2 + \Delta^2 + v_3^2 p^2] + 2\xi\gamma_1 v_3 v^2 p^3 \cos 3\phi \right]^{1/2}, \quad (2) \end{aligned}$$

where $\mathbf{p} = p(\cos \phi, \sin \phi)$ is the momentum near the K point. They are plotted in figure 1(b) for $\Delta = 0$ and $v_3/v = 0.1$. The dispersion $\epsilon_\pm^{(2)}$ describes two bands with energies $\epsilon_+^{(2)} \geq \gamma_1$ and

$\epsilon_-^{(2)} \leq \gamma_1$: they do not touch at the K point. These bands are the result of strong interlayer coupling $\gamma_{A2B1} \equiv \gamma_1$ which forms 'dimers' from pairs of $A2-B1$ orbitals that lie directly below and above each other [7].

The dispersion $\epsilon_1(p)$ describes low energy bands that touch at the K point in the absence of layer asymmetry $\Delta = 0$. In the intermediate energy range, $\frac{1}{4}\gamma_1(v_3/v)^2, |\Delta| < |\epsilon_1| < \gamma_1$, it can be approximated [7] with

$$\epsilon_{\pm}^{(1)} \approx \pm \frac{1}{2}\gamma_1 \left[\sqrt{1 + 4v^2 p^2 / \gamma_1^2} - 1 \right]. \quad (3)$$

This corresponds to the effective mass for electrons near the Fermi energy in a 2D gas with density n ,

$$m_c = p / (\partial \epsilon^{(1)} / \partial p) = (\gamma_1 / 2v^2) \sqrt{1 + 4\pi \hbar^2 v^2 n / \gamma_1^2}. \quad (4)$$

Equation (3) interpolates between a linear spectrum $\epsilon^{(1)} \approx vp$ at high momenta and a quadratic spectrum $\epsilon^{(1)} \approx p^2 / 2m$, where $m = \gamma_1 / 2v^2$. Such a crossover happens at $p \approx \gamma_1 / 2v$, which corresponds to the carrier density $n^* \approx \gamma_1^2 / (4\pi \hbar^2 v^2)$. This is lower than the density at which the higher energy band $\epsilon^{(2)}$ becomes occupied $n^{(2)} \approx 2\gamma_1^2 / (\pi \hbar^2 v^2) \approx 8n^*$. Using experimental graphite values [22] gives $n^* \approx 4.36 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ and $n^{(2)} \approx 3.49 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$. The estimated effective mass m is light: $m = \gamma_1 / 2v^2 \approx 0.054m_e$.

3 Optical absorption of bilayer graphene

The electromagnetic (EM) field absorption in graphene at zero magnetic field has already been studied [18, 24–26]. While the DC conductivity of monolayer graphene increases linearly with the carrier density [1, 2, 27], the real part of its high-frequency conductivity [24, 25] is independent of the electron density in a wide spectral range above the threshold $\hbar\omega > 2|\epsilon_F|$, which determines a featureless absorption coefficient $g_1 = \pi e^2 / \hbar c$. In contrast, we show that the bilayer absorption coefficient,

$$g_2 = (2\pi e^2 / \hbar c) f_2(\omega), \quad (5)$$

reflects the presence and dispersion of two pairs of bands [18, 19] as described in section 2.

In a 2D electron gas with conductivity $\sigma(\omega) \ll c/2\pi$, absorption of an EM field $\mathbf{E}_\omega = \ell \mathbf{E} e^{-i\omega t}$ with polarisation ℓ [$\ell_\oplus = \sqrt{\frac{1}{2}}[\mathbf{1}_x - i\mathbf{1}_y]$, for right- and $\ell_\ominus = \sqrt{\frac{1}{2}}[\mathbf{1}_x + i\mathbf{1}_y]$ for left-hand circularly polarised light arriving along the direction antiparallel to a magnetic field] can be characterised by the absorption coefficient $g \equiv E_i E_j^* \sigma_{ij}(\omega) / S$: the ratio between Joule heating and the energy flux $\mathbf{S} = c\mathbf{E} \times \mathbf{H} / 4\pi = -S\mathbf{1}_z$ transported by the EM field. Using the Keldysh technique, we express

$$g = \frac{8e^2}{c\omega} \Re \int \frac{F d\epsilon}{N} \widehat{\text{Tr}} \left\{ \hat{v}_i \ell_i \hat{G}^R(\epsilon) \hat{v}_j \ell_j^* \hat{G}^A(\epsilon + \omega) \right\},$$

where $\hat{v} = \partial_{\mathbf{p}} \hat{H}$ is the velocity operator, $\widehat{\text{Tr}}$ includes the summation both over the sublattice indices "tr" and over single-particle orbital states, N is the normalisation area of the sample and $F = n_F(\epsilon) - n_F(\epsilon + \omega)$ takes into account the occupancy of the initial and final states. Here we have included spin and valley degeneracy.

For a 2D gas in a zero magnetic field, the electron states are weakly scattered plane waves. Using the plane wave basis and the matrix form of the bilayer Hamiltonian \mathcal{H} equation (1), we express the retarded/advanced Greens functions of electrons in the bilayer as $\hat{G}^{R/A}(\mathbf{p}, \epsilon) = [\epsilon \pm \frac{1}{2}i\hbar\tau^{-1} - \mathcal{H}(\mathbf{p})]^{-1}$ and $\widehat{\text{Tr}} = \int d^2\mathbf{p} \frac{N}{(2\pi\hbar)^2} \text{tr}$. After neglecting the renormalisation of the current operator by vertex corrections at $\omega\tau \gg 1$ and the momentum transfer from light (since $v/c \sim 3 \times 10^{-3}$), we reproduce [24, 25] the constant absorption coefficient $g_1^\parallel = \pi e^2 \hbar c$ ($f_1 = \frac{1}{2}$)

SOTTOCASO N° 2-B

$\alpha_0 = 1$ $E_0 = E_c$ "ENERGIA DI FONDAMENTO" DELLA BANDA DI CONDUZIONE
NEI SEMICONDUTTORI (RELAZIONE DI KANE)

" α " "PARAMETRO DI NON PARABOLICITÀ" (SI $\alpha = 0,5 \text{ eV}^{-1}$)

CONSIDERANDO LA BANDA DI CONDUZIONE

$$\begin{cases} E = E_c + \frac{1}{2\alpha} \left\{ -1 + \sqrt{1 + \frac{2\alpha}{m^+} (\hbar k)^2} \right\} \\ \tilde{m} = m^+ \left[1 + 2\alpha (E - E_c) \right] \end{cases}$$

PASSANDO ALLA VELOCITÀ DI GRUPPO

$$\begin{cases} E - E_c = m^+ v_g^2 (\pi - 1) \\ \tilde{m} = \frac{m^+}{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c^+}\right)^2}} \end{cases}$$

CON $c^+ \approx 22 m^+$



EFFETTI DELLA "BANDA D'EFFICACE NELLA GRAFENE MONOLAYERS".