

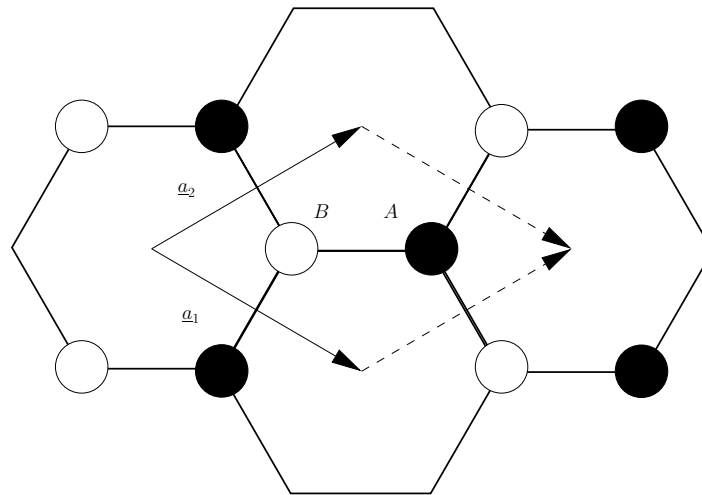
6. Übungsblatt zur Theoretischen Festkörperphysik

Abgabe: bis Dienstag 12.06.2007 10:15 Uhr in der Vorlesung.

Aufgabe 8 (10 Punkte): *Bandstruktur von Graphene*

*In dieser Aufgabe soll die erste Brillouin-Zone und die Bandstruktur einer zwei-dimensionalen Wa-
 benstruktur berechnet werden.*

(a) Konstruieren Sie aus der Elementarzelle von Graphen (eine einzelne Lage Graphit) die erste Brillouin-Zone. Eine Graphen-Elementarzelle, die von den Basisvektoren \underline{a}_1 und \underline{a}_2 aufgespannt



wird, enthält zwei Kohlenstoffatome A (am Ort $\frac{2}{3}(\underline{a}_1 + \underline{a}_2)$) und B (am Ort $\frac{1}{3}(\underline{a}_1 + \underline{a}_2)$). Dabei ist

$$\underline{a}_1 = \frac{3a_0}{2}\underline{e}_x + \frac{\sqrt{3}a_0}{2}\underline{e}_y \quad , \quad \underline{a}_2 = \frac{3a_0}{2}\underline{e}_x - \frac{\sqrt{3}a_0}{2}\underline{e}_y \quad \text{und} \quad \underline{a}_3 = c\underline{e}_z$$

mit $|a_1| = |a_2| = 0.2461 \text{ nm}$ und folglich $\angle(\underline{a}_1, \underline{a}_2) = 60^\circ$. Hier entspricht c der Länge der Einheitszelle in z -Richtung, was für die Bandstrukturrechnung aber nicht weiter relevant ist, da wir annehmen, dass verschiedene Graphenlagen im Graphit nicht miteinander koppeln.

(b) Um die Bandstruktur zu berechnen, stellen Sie zunächst die Matrix $[H]_{ij}$ (VL) auf. Die internen Summen laufen dabei über die ihre nächsten Nachbarn der Graphene Elementarzelle. Das heißt konkret, dass nur der Überlapp des p_z -Orbitals eines Kohlenstoffatomes $A(B)$ mit sich selbst $A(B)$ und zwischen sich und dem nächsten benachbarten Atomen $B(A)$ als relevant betrachtet wird. Machen Sie sich das anhand einer Skizze klar.

(c) Bestimmen Sie nun die \underline{k} -abhängigen Energieeigenwerte $\varepsilon(\underline{k})$ (siehe VL).

(d) Plotten Sie die Bandstruktur. Setzen Sie dazu als Parameter für den Überlapp von $H_{AA} = 0 \text{ eV}$ and $H_{AB} = -2.84 \text{ eV}$.

6. Übung TFKP SS 07

Aufgabe 9 (10 Punkte): Bandstruktur von GaAs

GaAs liegt in einer Zink-Blendstruktur vor. Wenn die Elementarzelle betrachtet wird, liegt das Galliumatom am Ursprung $((0\mathbf{e}_x + 0\mathbf{e}_y + 0\mathbf{e}_z)a)$ der Einheitszelle, die folgenden Arsenidatome als nächste Nachbarn liegen bei $\underline{r} = (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z)a/4, (-\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z)a/4, (\mathbf{e}_x - \mathbf{e}_y - \mathbf{e}_z)a/4, (-\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y - \mathbf{e}_z)a/4$.

(1) Ausgehend von dem Tight-Bindingansatz der Wellenfunktion für die Galliumatome(A):

$$\psi_{A,n}(\underline{k}, \underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\underline{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\underline{R}} b_A(\underline{r} - \underline{R}) \quad \text{mit } n = s, p_x, p_y, p_z, s^* \quad (1)$$

wobei s, p_x, p_y, p_z, s^* , das s- Orbital, die p-Orbitale und das erste angeregte s-Orbital bezeichnet. Der Ansatz für den Arsenidanteil(C) der Wellenfunktion lautet:

$$\psi_{C,n}(\underline{k}, \underline{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\underline{R}} e^{i\mathbf{k}\cdot\underline{R}} b_C(\underline{r} - \underline{R} - \underline{\tau}) \quad \text{mit } n = s, p_x, p_y, p_z, s^* \quad (2)$$

Zeigen sie dass die Matrixelemente des Hamiltonoperators die folgende Form haben:

A	A, s	C, s	A, p _x	A, p _y	A, p _z	C, p _x	C, p _y	C, p _z	A, s*	C, s*
A, s	E_{sa}	$4E_{ss}g_0$	0	0	0	$4E_{sapc}g_1$	$4E_{sapc}g_2$	$4E_{sapc}g_3$	0	0
C, s	$4E_{ss}g_0^*$	E_{sc}	$4E_{pasc}g_1^*$	$4E_{pasc}g_2^*$	$4E_{pasc}g_3^*$	0	0	0	0	0
A, p _x	0	$4E_{pasc}g_1$	E_{pa}	0	0	$4E_{xx}g_0$	$4E_{xy}g_3$	$4E_{xy}g_2$	0	$4E_{pas^*c}g_1$
A, p _y	0	$4E_{pasc}g_2$	0	E_{pa}	0	$4E_{xy}g_3$	$4E_{xx}g_0$	$4E_{xy}g_1$	0	$4E_{pas^*c}g_2$
A, p _z	0	$4E_{pasc}g_3$	0	0	E_{pa}	$4E_{xy}g_2$	$4E_{xy}g_1$	$4E_{xx}g_0$	0	$4E_{pas^*c}g_3$
C, p _x	$4E_{sapc}g_1^*$	0	$4E_{xx}g_0^*$	$4E_{xy}g_3^*$	$4E_{xy}g_2^*$	E_{pc}	0	0	$4E_{s^*apc}g_1^*$	0
C, p _y	$4E_{sapc}g_2^*$	0	$4E_{xy}g_3^*$	$4E_{xx}g_0^*$	$4E_{xy}g_1^*$	0	E_{pc}	0	$4E_{s^*apc}g_2^*$	0
C, p _z	$4E_{sapc}g_3^*$	0	$4E_{xy}g_2^*$	$4E_{xy}g_1^*$	$4E_{xx}g_0^*$	0	0	E_{pc}	$4E_{s^*apc}g_3^*$	0
A, s*	0	0	0	0	0	$4E_{s^*apc}g_1$	$4E_{s^*apc}g_2$	$4E_{s^*apc}g_3$	E_{s^*a}	0
C, s*	0	0	$4E_{pas^*c}g_1^*$	$4E_{pas^*c}g_2^*$	$4E_{pas^*c}g_3^*$	0	0	0	0	E_{s^*c}

mit

$$4g_0 = 1 + e^{-i\mathbf{k}\cdot\underline{d}_1} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\underline{d}_2} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\underline{d}_3} \quad (4)$$

$$4g_1 = 1 + e^{-i\mathbf{k}\cdot\underline{d}_1} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\underline{d}_2} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\underline{d}_3} \quad (5)$$

$$4g_2 = 1 - e^{-i\mathbf{k}\cdot\underline{d}_1} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\underline{d}_2} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\underline{d}_3} \quad (6)$$

$$4g_3 = 1 - e^{-i\mathbf{k}\cdot\underline{d}_1} - e^{-i\mathbf{k}\cdot\underline{d}_2} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\underline{d}_3} \quad (7)$$

$$\underline{d}_1 = (\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z)a/2 \quad \underline{d}_2 = (\mathbf{e}_z + \mathbf{e}_x)a/2 \quad \underline{d}_3 = (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y)a/2 \quad (8)$$

Es reicht dabei aus, wenn Sie von jedem Typ von Matrixelement nur eines exemplarisch betrachten, also für die Fälle gleiches Basisatom vs. anderes Basisatom, s vs p-Orbital, zwei p-Orbitale gleicher Orientierung vs. zwei p-Orbitale nicht gleicher Orientierung. Insgesamt sollten dies 10 Matrixelemente sein.

Tipp: Beachten sie dass das p-Orbital sein Vorzeichen entlang der einen Achse wechselt.

(2) Nehmen Sie nun diese Matrix und bestimmen Sie für \underline{k} -Punkte von $\underline{k} = 0 \dots \mathbf{e}_x 2\pi/a$ und von $\underline{k} = 0 \dots (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z)\pi/a$ die Energieeigenwerte(die Energiebänder) Verwenden Sie dazu einen Computer z.B. mit Mathematica, Lapack. Fügen Sie ihrer Abgabe den Quellcode bei(ausgedruckt!). Folgende Parameter können für GaAs verwendet werden:

$$E_{sa} = -8.3431\text{eV} \quad E_{pa} = 1.0414\text{eV} \quad E_{s^*a} = 8.5914\text{eV} \quad (9)$$

$$E_{sc} = -2.6569\text{eV} \quad E_{pc} = 3.6686\text{eV} \quad E_{s^*c} = 6.7386\text{eV} \quad (10)$$

$$4E_{ss} = -6.4513\text{eV} \quad 4E_{pasc} = -5.7839\text{eV} \quad 4E_{pas^*c} = -4.8077\text{eV} \quad (11)$$

$$4E_{sapc} = 4.48\text{eV} \quad 4E_{s^*apc} = 4.8422\text{eV} \quad (12)$$

$$4E_{xx} = 1.9546\text{eV} \quad 4E_{xy} = 5.0779\text{eV} \quad (13)$$