

## 1. Übungsblatt zur Theoretische Festkörperphysik

**Abgabe:** bis Dienstag 30.04.2009 10:15 Uhr in der Vorlesung.

**Aufgabe 1 (10 Punkte):** *Bandstruktur von Graphene und Carbon Nanotubes*

In dieser Aufgabe soll ausgehend von der VL die Bandstruktur von Graphene wiederholt und weiterführend die einer Nanotube 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  $\mathbf{a}_1$  und  $\mathbf{a}_2$  aufgespannt wird, enthält zwei Kohlenstoffatome  $A$  (am Ort  $\frac{2}{3}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)$ ) und  $B$  (am Ort  $\frac{1}{3}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)$ ). Dabei ist

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

mit  $|a_1| = |a_2| = 0.2461 \text{ nm}$  und folglich  $\angle(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2) = 60^\circ$ . Hier entspricht  $l_z$  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.

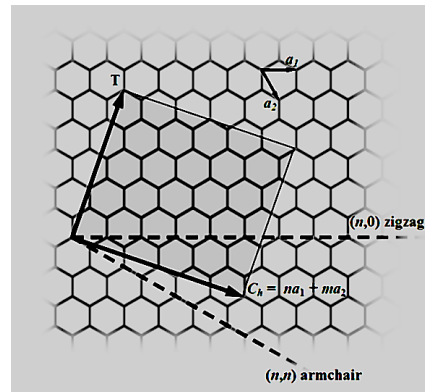
(b) Um die Bandstruktur zu berechnen, stellen Sie zunächst die Matrix  $[H]_{ij}$  (VL) auf und wenden Sie die nächste-Nachbarn-Näherung an.

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

(d) Betrachten Sie nun eine eindimensionale Nanotube (aufgerolltes Stück Graphene). Wir wechseln von der nicht-orthogonalen Basis  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$  ( $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ ) zur orthogonalen Basis aus Umfangsvektor  $\mathbf{c}$  ( $\mathbf{k}_\perp$ ) und Translationsvektor  $\mathbf{a}$  ( $\mathbf{k}_z$ ):

$$\mathbf{c} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2$$

$$\mathbf{a} = -\frac{2n_2 + n_1}{nR} \mathbf{a}_1 + \frac{2n_1 + n_2}{nR} \mathbf{a}_2$$



Dabei ist  $n$  der größte gemeinsame Teiler von  $n_1$  und  $n_2$ .  $R = 3$  wenn  $(n_1 - n_2)$  ein Vielfaches von  $3n$  ist und  $R = 1$  sonst. Bestimmen Sie aus  $\mathbf{c}$  und  $\mathbf{a}$  die orthogonale Basis im reziproken Raum  $\mathbf{k}_\perp$  und  $\mathbf{k}_z$  (TIPP: Um die nötigen Randbedingungen zu bekommen, nutzen Sie das Blochtheorem für die Zustände entlang des Umfangsvektors).

(e) Benutzen Sie das Ergebnis  $\varepsilon(\mathbf{k})$  aus (c) mit der Darstellung aus (d) um die Bandstruktur von Nanotubes zu erhalten:

$$E_{v,c}(k_z, m) = \pm \gamma_0 \left[ 3 + 2 \cos \left( 2\pi m \frac{2n_1 + n_2}{2N} - 2\pi \frac{n_2}{q} k_z \right) + 2 \cos \left( 2\pi m \frac{2n_2 + n_1}{2N} - 2\pi \frac{n_1}{q} k_z \right) + 2 \cos \left( 2\pi m \frac{n_1 - n_2}{2N} - 2\pi \frac{n_1 + n_2}{q} k_z \right) \right]^{1/2}$$

1. Übung TFP SS 09

Dabei ist  $N = n_1^2 + n_1 n_2 + n_2^2$  und  $q = 2N/(nR)$  ist die Anzahl der Graphenehexagone in der Nanotubelementarzelle. Die diskrete Quantenzahl  $m \in [-q/2, q/2]$ .

**(f)** Plotten Sie die Bandstruktur von Graphene und einer (6,6) Nanotube. Setzen Sie dazu als Parameter für den Überlapp von  $H_{AA} = \langle \phi_A | H | \phi_A \rangle = 0$  eV,  $H_{AB} = \langle \phi_A | H | \phi_B \rangle = \gamma_0 = -2.84$  eV,  $S_{AA} = \langle \phi_A | \phi_A \rangle = 1$  eV und  $S_{AB} = \langle \phi_A | \phi_B \rangle = 0.07$  eV.

**Aufgabe 2 (10 Punkte):** *Lagrangeformalismus für semiklassische Felder*

Betrachten Sie ein System aus  $N$  verschiedenen elementaren Feldern  $\psi_k$  ( $k \in [1, N]$ ) (z.B. Elektronen und Ionen) mit Ladung  $q_k$ , die mit dem elektromagnetischen Feld wechselwirken. Leiten Sie ausgehend von der Lagrangedichte

$$\mathcal{L}(\mathbf{r}, t) = \sum_{k=1}^N \left\{ -\frac{1}{2m_k} \left( \frac{\hbar}{i} \nabla \psi_k - q_k \mathbf{A} \psi_k \right) \left( -\frac{\hbar}{i} \nabla \psi_k^* - q_k \mathbf{A} \psi_k^* \right) - \frac{\hbar}{2i} (\psi_k^* \partial_t \psi_k - (\partial_t \psi_k^*) \psi_k) - \psi_k^* V \psi_k \right\} \\ + \frac{\epsilon_0}{2} |\mathbf{E}|^2 - \frac{1}{2\mu_0} |\mathbf{B}|^2 - \sum_{k=1}^N \{ \psi_k^* q_k \phi \psi_k \}$$

die inhomogenen Maxwellgleichungen, als auch die Schrödingergleichung her.

**Bitte Rückseite beachten! →**

### Termine:

- **Vorlesung:** Dienstag und Freitags 10 - 12 Uhr im PN 203
- **Übung:** Mittwoch 14 - 16 Uhr im PN 224

### Scheinkriterien:

- Mindestens 50% der Übungspunkte (Abgabe in Dreiergruppen).
- Regelmäßige und aktive Teilnahme an der Übung und den Tutorien.

### Literatur zur Lehrveranstaltung:

- Czycholl, Theoretische Festkörperphysik (Springer)
- Haken, Quantenfeldtheorie des Festkörpers (Teubner)
- Jäger, Valenta, Festkörpertheorie (Wiley)
- U. Rössler, Solid State Theory (Springer)
- Haug, Koch, Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors, (World Scientific)
- Scherz, Quantenmechanik (Teubner)
- Scheck, Theoretische Physik (Springer), alle Bände

### Hinweise:

Die **Anmeldung** für die Lehrveranstaltung erfolgt **online**: Hierzu kann der Link auf der WWW-Seite <http://www.itp.tu-berlin.de/menue/lehre/lv/ss09/wpfv/TFP/> benutzt werden.

**Anmeldeschluss** für die Registrierung ist Freitag der **17.04.07 um 17:59 Uhr**

Die Übungsblätter werden am Freitag in der Vorlesung ausgegeben. Abgabe erfolgt dann (12 Tage später) am Dienstag in der Vorlesung. Später abgegebene Übungsblätter können nicht mehr berücksichtigt werden!! Es wird voraussichtlich insgesamt 9 bis 10 reguläre Übungsblätter geben.

Bitte bearbeiten Sie die Übungszettel in 3er Gruppen und schreiben Sie Ihre Namen und Ihre Matrikelnummer auf die Zettel.

Es existiert in der Abteilungsbibliothek Physik ein Semesterapparat zu dieser Vorlesung.