

Prof. Dr. Eckehard Schöll, Dr. Kathy Lüdge
Dr. Carsten Weber

5. Übungsblatt – Theoretische Festkörperphysik I,II

Abgabe: Mo. 23.05.2011 bis 17:00 Uhr, Briefkasten ER-Gebäude

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.

Aufgabe 12 (12 Punkte): Bandstruktur von Graphen

In Aufgabe 6 wurde, ausgehend von der Elementarzelle von Graphen, die erste Brillouin-Zone konstruiert. Dabei enthielt die Elementarzelle, aufgespannt in der Ebene durch die Basisvektoren

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

zwei Kohlenstoffatome an den Orten $\mathbf{r}_A = \frac{1}{3}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)$ (Atom A) und $\mathbf{r}_B = \frac{2}{3}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)$ (Atom B). Im Folgenden soll nun die elektronische Bandstruktur von Graphen berechnet werden.

- (a) Benutzen Sie zunächst die Schrödingergleichung, um die Bestimmungsgleichung für die Entwicklungskoeffizient c_A, c_B der Wellenfunktion $\psi_{\mathbf{k}} = c_A\phi_A(\mathbf{k}) + c_B\phi_B(\mathbf{k})$ zu erhalten. Benutzen Sie dabei die Abkürzungen für die Matrixelemente

$$H_{ij} = \langle \phi_i | H | \phi_j \rangle, \quad S_{ij} = \langle \phi_i | \phi_j \rangle.$$

- (b) Bestimmen Sie daraus die \mathbf{k} -abhängigen Energieeigenwerte $E(\mathbf{k})$.
- (c) Berechnen Sie nun die Überlappenelemente H_{ij} und S_{ij} . Wenden Sie dabei die nächste-Nachbarn-Näherung an, d.h. nehmen Sie nur die Beiträge der nächsten Nachbarn mit. Zeigen Sie, dass mit den Abkürzungen $H_{AB} = \gamma_0 e(\mathbf{k})$, $H_{AA} = \varepsilon_0$, $S_{AB} = s_0 e(\mathbf{k})$ und $e(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^3 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_i}$ (\mathbf{b}_i : Verbindungsvektoren zwischen einem Atom A und seinen drei nächsten Nachbarn) die Energieeigenwerte als

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\varepsilon_0 \pm \gamma_0 |e(\mathbf{k})|}{1 \pm s_0 |e(\mathbf{k})|}$$

dargestellt werden können.

- (d) Plotten Sie die Bandstruktur von Graphen. Werten Sie dazu $e(\mathbf{k})$ explizit aus und setzen Sie als Parameter für den Überlapp $\varepsilon_0 = 0$ eV, $\gamma_0 = -2.84$ eV, $s_0 = 0.07$. $a_0 = 0.142$ nm.

Aufgabe 13 (8 Punkte): Quasi-freie Elektronen

Gegeben sei ein eindimensionales Gitter aus Ionenrümpfen mit dem Abstand a und dem effektiven Potential $V(x) = 2V_1 \cos(\frac{2\pi x}{a})$. Untersuchen Sie die Aufhebung der Entartung zwischen dem ersten und zweiten Band am Zonenrand $k \approx \pi/a$. Benutzen Sie im Folgenden $\delta k := k - \frac{\pi}{a}$.

- (a) Leiten Sie unter Annahme eines schwachen Potentials ($|V_1| \ll \frac{\hbar^2}{2m} (\frac{\pi}{a})^2$) die Energie-Blochvektor-Beziehung für kleine δk ab.
- (b) Berechnen Sie die Gruppengeschwindigkeit $v_g = \frac{1}{\hbar} \frac{dE(k)}{dk}$.
- (c) Berechnen Sie die effektive Masse bei $\delta k = 0$ für beide Bänder.
- (d) Geben Sie die Blochfunktionen $\psi_k(x)$ für beide Bänder an.
- (e) Berechnen Sie aus den Blochfunktionen den Impulsmittelwert in linearer Näherung von δk und vergleichen Sie mit den Ergebnissen aus (b) und (c).
- (f) Skizzieren Sie für $\delta k = 0$ das Potential und die Aufenthaltswahrscheinlichkeitsdichten der beiden Blochfunktionen als Funktion des Ortes.