

Prof. Dr. Andreas Knorr
 Dr. Alexander Carmele
 Dr. Florian Wendler

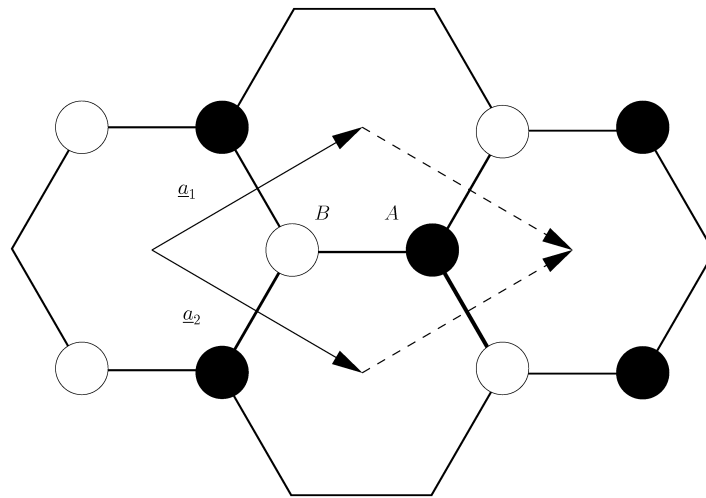
4. Übungsblatt – Theoretische Festkörperphysik I,II

Abgabe: Mo. 30.05.2016 bis 10:00 Uhr in der Übung

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

Aufgabe 4 (20 Punkte): Bandstruktur von Graphen

1. Konstruieren Sie zunächst aus der Elementarzelle von Graphen (eine einzelne Lage Graphit) die erste Brillouin-Zone. Die Graphen-Elementarzelle wird von den Basisvektoren \vec{a}_1 und \vec{a}_2



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

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

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

2. Um die Bandstruktur zu berechnen, stellen Sie zunächst die Matrix H_{ij} (Siehe VL+ÜB) des Hamiltonoperators bezüglich der Atomorbitalfunktionen auf. Die internen Summen laufen dabei nur über die nächsten Nachbarn der Graphen-Elementarzelle (Nächste-Nachbar-Näherung). Das heißt konkret, dass nur der Überlapp des p_z -Orbitals eines Kohlenstoffatoms $A(B)$ 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.
3. Bestimmen Sie nun die \vec{k} -abhängigen Energieeigenwerte $\varepsilon(\vec{k})$ (siehe VL).
4. Plotten Sie die Bandstruktur mithilfe eines Plotprogramms (Gnuplot, Mathematica, etc.). Setzen Sie dazu als Parameter für den Überlapp von $H_{AA} = 0 \text{ eV}$ and $H_{AB} = -2.84 \text{ eV}$.

4. Übung TPVI SS2016

Vorlesung:	<ul style="list-style-type: none">• Dienstag 8:15 Uhr – 10:00 Uhr im EW 203• Donnerstag 8:15 Uhr – 10:00 Uhr im EW 203
Übung:	<ul style="list-style-type: none">• Mo 10:15-11:45 EW 731
Scheinkriterien:	<ul style="list-style-type: none">• Mindestens 60% der Übungspunkte.
Zettel:	<ul style="list-style-type: none">• Ausgabe: Montags in der Übung.• Abgabe: 14 Tage später in der Übung .• Abgabe der Übungszettel in 2- oder 3-er Gruppen!
Sprechzeiten:	<ul style="list-style-type: none">• Prof. Dr. Andreas Knorr: Di, 13–14 Uhr im EW 742• Dr. Alexander Carmele : Fr, 10–11 Uhr im EW 704• Dr. Florian Wendler : Mo, 12–13 Uhr im ER 221
Literatur	<ul style="list-style-type: none">• Ashcroft, Mermin: Festkörperphysik (Oldenbourg)• Czycholl: Theoretische Festkörperphysik (Springer)• Haken: Quantenfeldtheorie des Festkörpers (Teubner)• Haug, Koch: Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors (World Scientific)• Ibach, Lüth: Festkörperphysik (Springer)• Jäger, Valenta: Festkörpertheorie (Wiley)• Kittel: Quantenfeldtheorie des Festkörpers (Oldenbourg)• Rössler: Solid State Theory (Springer)• Scherz: Quantenmechanik (Teubner)• Ziman: Prinzipien der Festkörpertheorie (Deutsch)