

Dr. Marten Richter  
Dr. Julia Kabuß

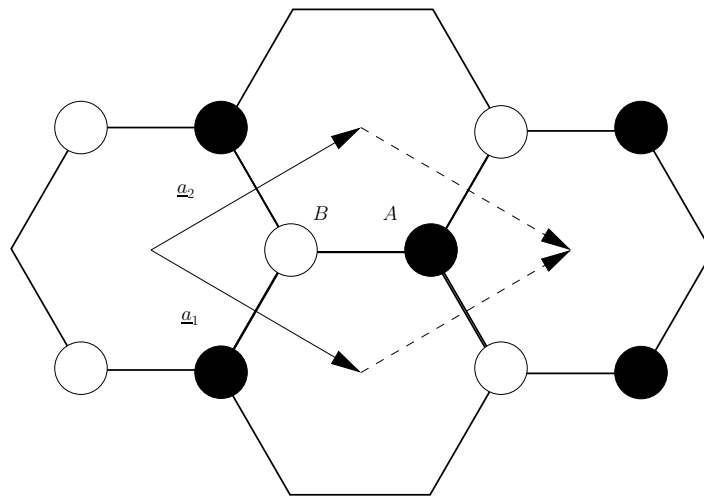
## 2. Übungsblatt – Theoretische Festkörperphysik I+II

**Abgabe: Mo. 04.05.2015 vor Beginn der Übung im EW 226**

Bei den schriftlichen Ausarbeitungen werden ausführliche Kommentare zum Vorgehen erwartet. Dafür gibt es auch Punkte! Bitte Matrikelnummer auf dem Aufgabenzettel angeben! Die Abgabe soll in Dreiergruppen erfolgen.

**Aufgabe 3 (15 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 wird 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

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

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 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 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. Benutzen Sie die Abkürzungen:

$$\varepsilon_{2p_z} \equiv \langle \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A) | H | \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A) \rangle, \quad \gamma_0 \equiv \langle \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A^0) | H | \varphi_B(\vec{r} - \vec{R}_B^i) \rangle \quad \text{und} \quad S_0 \equiv \langle \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A) | \varphi_B(\vec{r} - \vec{R}_B) \rangle$$

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  $\varepsilon_{2p_z} = 0 \text{ eV}$ ,  $\gamma_0 = -2.84 \text{ eV}$  und  $S_0 = 0.07$ .

**Bitte Rückseite beachten! →**

## 2. Übung TFKP SS15

**Vorlesung:**

- Dienstag 10:15 Uhr – 11:45 Uhr im EW 203.
- Mittwoch 10:15 Uhr – 11:45 Uhr im EW 203.

**Webseite:**

- Details zur Vorlesung, Vorlesungsmitschrift und aktuelle Informationen sowie Sprechzeiten auf der Webseite unter [http://www.itp.tu-berlin.de/menue/lehre/lv/ss\\_2015/pflichtveranstaltungen\\_-\\_masterstudium/theoretische\\_physik\\_vi\\_vertiefung\\_theoretische\\_festkoerperphysik\\_i\\_ii/](http://www.itp.tu-berlin.de/menue/lehre/lv/ss_2015/pflichtveranstaltungen_-_masterstudium/theoretische_physik_vi_vertiefung_theoretische_festkoerperphysik_i_ii/)

**Scheinkriterien:**

- Mindestens 60% der Übungspunkte.
- Regelmäßige und aktive Teilnahme in den Tutorien.

**Bemerkung:** Bei den Übungsaufgaben werden nur dokumentenechte, handschriftliche Originale akzeptiert. Es werden keine Kopien oder elektronischen Abgaben akzeptiert. Abgabe erfolgt in Dreiergruppen.

### Literatur zur Lehrveranstaltung:

Alle Bücher stehen der Physikbibliothek zur Verfügung.

- 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)