

PD Dr. Gernot Schaller  
Dr. Javier Cerrillo

## 5. Übungsblatt – Theoretische Festkörperphysik I,II

**Abgabe: Di. 05.06.2018 um 14:00 Uhr beim Tutorium.**

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

### Aufgabe 11 (8 Punkte): Bloch-Oszillationen

Der tight-binding Hamiltonoperator in der Basis der Wannier-Zustände  $|n\rangle$  lautet

$$(1) \quad H = -\frac{\Delta}{4} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|) + dF \sum_{n=-\infty}^{\infty} n|n\rangle\langle n|.$$

Zeigen Sie, dass dieser Hamiltonian in der Basis der Bloch-Zustände  $|k\rangle = \sqrt{\frac{d}{2\pi}} \sum_{n=-\infty}^{\infty} |n\rangle e^{inkd}$  als  $\langle k'|H|k\rangle = \delta(k-k')H(k)$  mit

$$H(k) = -\frac{\Delta}{2} \cos kd + iF \frac{d}{dk},$$

ausgedrückt werden kann. Zeigen Sie, dass die Energiewerten  $E_m = mdF$ , mit  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  (die Wannier-Stark Leiter) sind, und auch, dass die Eigenvektoren in Bloch-Darstellung

$$\Psi_m(k) = \langle k|\Psi_m\rangle = \sqrt{\frac{d}{2\pi}} e^{-i[mkd + \gamma \sin kd]}, \quad \gamma = \Delta/2dF,$$

und in Wannier-Basis  $\Psi_m(n) = \langle n|\Psi_m\rangle = J_{n-m}(\gamma)$ , (mit  $J$  Bessel-Funktion) sind. Mit Hilfe der Rekursion-Eigenschaften der Bessel-Funktionen, beweisen Sie explizit, dass die Wellenfunktionen  $|\Psi_m\rangle = \sum_n J_{n-m}(\gamma)|n\rangle$  Eigenzustände vom tight-binding Hamiltonian Eq. (1) sind. Finden Sie den Zeit-abhängigen Zustand  $|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n\rangle$  für ein Elektron, der zunächst in einem Bloch-Zustand  $|k\rangle$  vorbereitet wird, und zeigen Sie, dass  $c_n(t)$  eine laufende Welle darstellt, die wechselnde Propagationsrichtung besitzt.

### Aufgabe 12 (12 Punkte): Bandstruktur von Graphen

Als Folge zur Aufgabe 2 berechnen wir hier die Bandstruktur vom Graphen.

1. Stellen Sie zunächst die Matrix  $H_{ij}$  (Siehe ÜB) des Hamiltonoperators bezüglich der Atomorbitalfunktionen auf. Die internen Summen laufen dabei über die nächsten Nachbarn der Graphene Elementarzelle. 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. Benutzen Sie die Abkürzungen:

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

2. Bestimmen Sie nun die  $\vec{k}$ -abhängigen Energieeigenwerte  $\varepsilon(\vec{k})$  (siehe ÜB).
3. Plotten Sie die Bandstruktur mithilfe eines Plotprogramms (Gnuplot, Mathematica, etc.). Setzen Sie dazu als Parameter für den Überlapp von  $\varepsilon_{2p_z} = 0$  eV,  $\gamma_0 = -2.84$  eV und  $S_0 = 0.07$ .