

Prof. Dr. Kathy Lüdge
Dr. Alexander Carmele

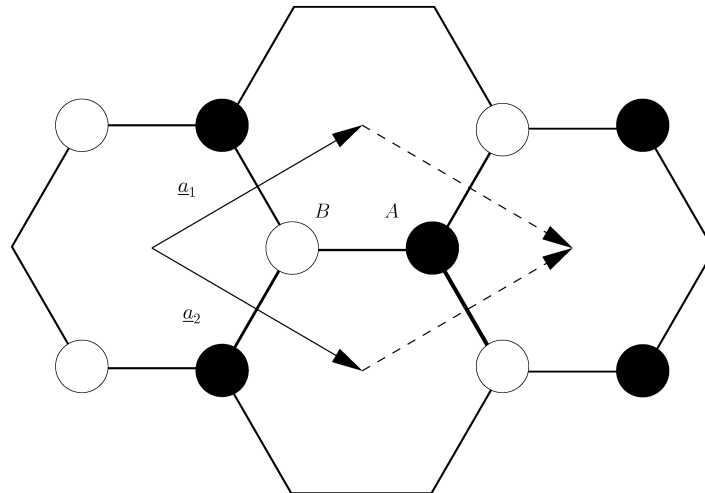
6. Übungsblatt – Theoretische Festkörperphysik I,II

Abgabe: Mo. 03.06.2019 zum Vorlesungsbeginn

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

Aufgabe 10 (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

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

mit $|a_1| = |a_2| = 0.2461 \text{ nm}$ und folglich $\angle(\vec{a}_1, \vec{a}_2) = 60^\circ$. Wie groß ist der Abstand zwischen zwei Kohlenstoffatomen? 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} des Hamiltonoperators bezüglich der Atomorbitalfunktionen auf: $\langle \psi | H | \psi \rangle = E \langle \psi | \psi \rangle$. Der Ansatz der Wellenfunktion lautet $|\psi\rangle = c_A|A\rangle + c_B|B\rangle$. Beachten Sie, dass $|A\rangle, |B\rangle$ im Allgemeinen kein Orthonormalsystem bilden. Lösen Sie das Eigenwertproblem. Werten Sie nun die internen Summen nur über die nächsten Nachbarn der Graphen-Elementarzelle (Nächste-Nachbar-Näherung) aus. 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. Benutzen Sie die Abkürzungen: $\varepsilon_{2p_z} \equiv \langle \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A) | H | \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A) \rangle$, $\gamma_0 \equiv \langle \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A^0) | H | \varphi_B(\vec{r} - \vec{R}_B^i) \rangle$ und $S_0 \equiv \langle \varphi_A(\vec{r} - \vec{R}_A) | \varphi_B(\vec{r} - \vec{R}_B) \rangle$
3. Bestimmen Sie nun die \vec{k} -abhängigen Energieeigenwerte $\varepsilon(\vec{k})$.
4. Plotten Sie die Bandstruktur mit Hilfe eines Plotprogramms (bspw. Gnuplot oder Mathematica). Setzen Sie dazu als Parameter für den Überlapp von $\varepsilon_{2p_z} = 0 \text{ eV}$, $\gamma_0 = -2.84 \text{ eV}$ und $S_0 = 0.07$.