

Theorie der Kondensierten Materie I WS 2017/2018

Prof. Dr. A. Mirlin, PD Dr. I. Gornyi
Dr. N. Kainaris, Dr. S. Rex, J. KlierBlatt 4
Besprechung: 16.11.2017

1. LCAO-Näherung für Wannier-Funktionen

(10 + 10 = 20 Punkte)

- (a) Betrachten Sie ein quadratisches Gitter (in zwei Raumdimensionen) mit Gitterkonstante a . Das atomare Potential $U_a(\mathbf{r})$ sei isotrop. Für Elektronen steht nur ein einziges atomares s -Orbital zur Verfügung. Ausgehend von der LCAO-Näherung, bestimmen Sie das Spektrum $E_{\mathbf{k}}$ für den Fall, dass in Überlappintegralen Tunneln zwischen nächsten Nachbarn ($|\mathbf{R}| = a$) sowie zwischen die übernächsten Nachbarn ($|\mathbf{R}| = \sqrt{2}a$) berücksichtigt wird.
- (b) Das Gitter sei nun einfach kubisch in drei Raumdimensionen und es sollen nur Überlappintegralen zwischen nächsten Nachbarn berücksichtigt werden; $U_a(\mathbf{r})$ sei isotrop. Betrachten Sie ein dreifach entartetes p -Orbital, $E_n = E_p$, $n = 1; 2; 3$, wobei als atomare p -Wellenfunktionen des Elektrons die Funktionen

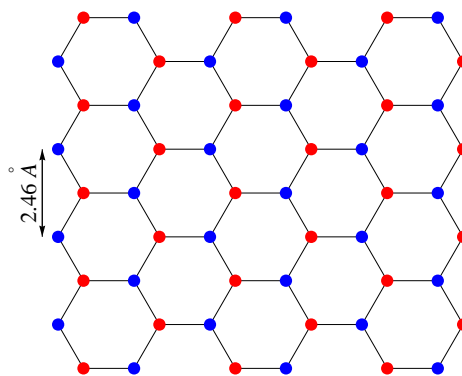
$$\phi_1(\mathbf{r}) = x\varphi(|\mathbf{r}|), \quad \phi_2(\mathbf{r}) = y\varphi(|\mathbf{r}|), \quad \phi_3(\mathbf{r}) = z\varphi(|\mathbf{r}|),$$

gewählt werden können; $\varphi(|\mathbf{r}|)$ sei bekannt. Zeigen Sie nun, dass, allein aufgrund der Invarianz des atomaren Potentials unter bestimmten Symmetrietransformationen des Gitters, die Gleichung für das Spektrum in drei ungekoppelte Gleichungen zerfällt. Bestimmen Sie $E_{\mathbf{k}}$.

2. Bandstruktur von Graphen

(10 + 10 + 10 = 30 Punkte)

Die grundlegenden physikalischen Eigenschaften von Graphen können in der einfachsten "Tight-Binding"-Näherung beschrieben werden, in der Elektronen jeweils nur zwischen nächsten Nachbarn hin- und herspringen. Die Einheitszelle von Graphen beinhaltet 2 Atome, die aus Symmetriegründen komplett äquivalent sind. Diese Atome (rote und blaue Punkte in der Abbildung) bilden auch die nächsten Nachbarn im Graphen-Gitter.



- (a) Bestimmen Sie den Hamiltonoperator von Graphen in der "Tight-Binding"-Näherung. Finden Sie die Bloch-Funktionen, die periodisch im reziproken Bravais-Gitter sind, und drücken sie den Hamiltonoperator in der Basis dieser Bloch-Funktionen aus. Das Ergebnis lässt sich dann als 2×2 -Matrix schreiben.

- (b) Ausgehend von der “Tight-Binding”-Näherung, finden Sie die Bandstruktur von Graphen. Zeigen Sie, dass die Bandlücke an besonderen Punkten der 1. Brillouin-Zone verschwindet, und das Spektrum dort als linear genähert werden kann.
- (c) Bestimmen Sie nun die Bandstruktur für den Fall, dass in Überlappintegralen auch die übernächsten Nachbarn berücksichtigt werden.

Hinweis:

A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim,
 “The electronic properties of graphene”, Review of Modern Physics **81**, 109 (2009);
<http://arxiv.org/pdf/0709.1163v2.pdf>

3. Bonusaufgabe: Graphen-Doppelschicht

(10 Bonuspunkte)

Bestimmen Sie die Bandstruktur der Doppelschicht von Graphen mit “Bernal-Stapelung”. Die Geometrie dieser Stapelung impliziert, dass in führender Ordnung auch Tunnelmatrixelemente zwischen roten (A1) Atomen der ersten und blauen (B2) Atomen der zweiten Graphenschicht berücksichtigt werden müssen (s. Abbildung).

