

Theorie der Kondensierten Materie I WS 2012/2013

Prof. Dr. J. Schmalian
Dr. P. Orth, Dr. S.V. SyzranovBlatt 5
Besprechung 19.11.2012

1. Bandstruktur von wechselwirkungsfreiem Graphen (10+5+5+10 = 30 Punkte)

Wir wollen die Bandstruktur von Graphen berechnen. Graphen ist ein zweidimensionales Material aus Kohlenstoffatomen, die in einer 'Honeycomb'-Gitterstruktur angeordnet sind (siehe Fig. 1). Nehmen Sie in dieser Aufgabe an, dass die Elektronen in Graphen nicht miteinander wechselwirken. In Aufgabe 2 werden wir den Effekt der Coulomb Wechselwirkung untersuchen. Der Hamiltonian lautet

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\sigma} (c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + \text{h.c.}). \quad (1)$$

Der Operator $c_{j,\sigma}^{\dagger}$ erzeugt ein Elektron mit Spin $\sigma = \pm 1$ am Gitterpunkt j . Die Summe $\langle i,j \rangle$ geht genau einmal über alle nächsten Nachbarpaare. Das Gitter wird aufgespannt von den Bravaisgittervektoren $\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(1, \sqrt{3})$ und $\mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(-1, \sqrt{3})$ mit Gitterkonstante a . Die Basis besteht aus zwei Atomen (A und B), die sich in der Einheitszelle an den Plätzen $\mathbf{b}_A = (0, 0)$ und $\mathbf{b}_B = (0, a/\sqrt{3})$ befinden.

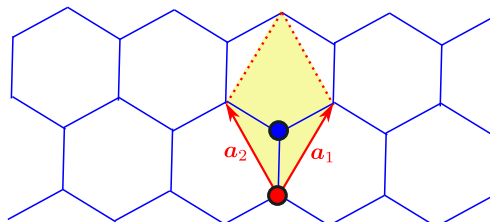


Abbildung 1: 'Honeycomb'-Gitterstruktur von Graphen

- Bestimmen Sie die 1. Brillouinzone (BZ) und die Bandstruktur von Graphen $\epsilon(\mathbf{k})$.
- Zeigen Sie, dass $\epsilon(\mathbf{k})$ an den Ecken der 1. BZ, den sogenannten K und K' Punkten, verschwindet. Wieviele Eckpunkte sind äquivalent in der 1. BZ und warum? Bestimmen Sie $\epsilon(\mathbf{k})$ nahe des K und K' Punktes.
- Bestimmen Sie die Zustandsdichte

$$\rho(\epsilon_0) = \frac{L^d}{(2\pi)^d} \int d^d k \delta(\epsilon_0 - \epsilon(\mathbf{k})) \quad (2)$$

nahe des K Punktes, d.h. verwenden Sie den Taylorgenäherten Ausdruck von $\epsilon(\mathbf{k})$ nahe K , um $\rho(\epsilon_0)$ zu berechnen.

- Wir haben bereits auf Blatt 4 gesehen, dass die Zustandsdichte eine sogenannte van-Hove Singularität zeigen kann. Leiten Sie die allgemeine Bedingung für das Auftreten einer solchen Singularität startend vom Ausdruck in Gleichung (2) her.

Finden Sie die van-Hove Singularität in Graphen, d.h. die Energie ϵ_0 bei der die Singularität auftritt, und berechnen Sie die Zustandsdichte nahe der Singularität indem Sie $\epsilon(\mathbf{k})$ durch eine Taylorentwicklung nähern.

2. Dielektrizitätskonstante in Graphen (10 Punkte)

Betrachten Sie eine einzelne Graphenlage zwischen zwei Isolatoren mit Dielektrizitätskonstanten ϵ_1 und ϵ_2 . Zeigen Sie mit Hilfe der Maxwell Gleichungen und Randbedingungen für das elektrische Feld an Grenzflächen, dass die Coulomb-Wechselwirkung zwischen zwei Elektronen von der Form

$$U(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \frac{e^2}{\epsilon|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \quad (3)$$

ist. Hier haben wir Gaussche Einheiten verwendet. Bestimmen Sie ϵ als Funktion von ϵ_1 und ϵ_2 .

3. Coulomb Wechselwirkung in Graphen: Hartree-Fock Näherung (10 + 5 + 10 + 35 = 60 Punkte)

Nahe des K Punktes ist die Dispersion von Graphen linear $\epsilon(\mathbf{p}) = \pm v_F |\mathbf{p}|$ mit $\mathbf{p} = K - \mathbf{k}$. Sie haben v_F in Aufgabe 1 bestimmt. Der Hamiltonian nahe des K und K' Punkts in der $\{A, B\}$ Basis hat die Form

$$H_0 = v_F \begin{pmatrix} 0 & p_x + ip_y \\ p_x - ip_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Diese Form gilt nur für Impulse $|\mathbf{p}| < \Lambda \sim 1/a$ mit Impuls-Cutoff Λ (siehe Bandstruktur aus Aufgabe 1).

- Bestimmen Sie die Eigenwerte und Eigenfunktionen von H . Vergleichen Sie mit der vollen Bandstruktur aus Aufgabe 1, um zu bestimmen wie oft die Eigenwerte in Graphen entartet sind. Schreiben Sie den elektronischen Ortsoperator $\psi_\sigma(\mathbf{x})$, der ein Elektron mit Spin σ an der Stelle \mathbf{x} vernichtet, in der Basis der Eigenfunktionen von H .
- Zeigen Sie dass man den Hamiltonian mit Hilfe einer Drehmatrix diagonalisieren kann und bestimmen Sie die Drehmatrix.
- Berechnen Sie die Matrixelemente der Coulombwechselwirkung in der Eigenbasis des Hamiltonian H_0 . Der Hamiltonian der Coulombwechselwirkung lautet

$$V = \frac{e^2}{2\epsilon} \sum_{\sigma=\{\uparrow,\downarrow\}} \sum_{\tau=\{K,K'\}} \int d^2\mathbf{x} d^2\mathbf{y} \frac{\rho_{\sigma\tau}(\mathbf{x})\rho_{\sigma\tau}(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \quad (5)$$

mit Dichteoperator $\rho_{\sigma,\tau}(\mathbf{x}) = \psi_{\sigma\tau}^\dagger(\mathbf{x})\psi_{\sigma\tau}(\mathbf{x})$ und einer Dielektrizitätskonstanten $\epsilon(\epsilon_1, \epsilon_2)$, die wie in Aufgabe 2 berechnet eine Funktion von ϵ_1 und ϵ_2 ist, den Dielektrizitätskonstanten der beiden Medien, die die Graphenschicht einschließen. Hier bezeichnet σ den elektronischen Spin und τ den Valley Pseudospin.

- Betrachten Sie die Coulombwechselwirkung in der Hartree-Fock Näherung und berechnen Sie die Korrektur zur Energie des Grundzustands des Systems. Zeigen Sie, dass die Energie der Elektronen mit der Hartree-Fock Korrektur von der Form

$$E_{\mathbf{p}}^{HF} = \pm v(|\mathbf{p}|)|\mathbf{p}|, \quad v(|\mathbf{p}|) = v_F \left(1 + \frac{e^2}{4\epsilon v_F} \ln \frac{\Lambda}{|\mathbf{p}|} \right) \quad (6)$$

ist. Was passiert nahe des sogenannten Dirac-Punkts bei $p \rightarrow 0$. Diese logarithmische Renormierung der Fermi-Geschwindigkeit durch Coulombwechselwirkung in Graphen wurde von Kurzem experimentell beobachtet von D.C. Elias *et al.*, Nature Physics **7**, 701 (2011).