

Theorie der Kondensierten Materie I WS 2018/2019

PROF. DR. A. SHNIRMAN  
PD DR. B. NAROZHNY, M.SC. T. LUDWIG

Blatt 2  
Lösungsvorschlag

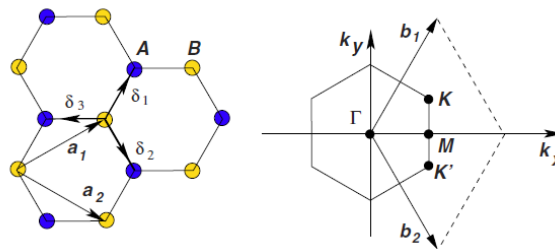
1. Bandstruktur von Graphene

Die grundlegenden physikalischen Eigenschaften von Graphene können in der einfachsten Tight-binding Näherung beschrieben werden, in der die Elektronen jeweils nur zwischen nächsten Nachbarn hin- und herspringen. Bestimmen Sie den Hamiltonoperator von Graphene in der Tight-binding Näherung. Hiervon ausgehend,

(a) finden Sie die Bandstruktur von Graphene

Die Gitterkonstante (Abstand zwischen den benachbarten A und B Atomen):

$$a = 1.$$



Tight-binding Modell:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle} \hat{a}_i^\dagger \hat{b}_j + h.c.$$

wobei die Summe nur über die nächsten Nachbarn läuft. Operatoren  $\hat{a}_i^\dagger$  und  $\hat{b}_i^\dagger$  erzeugen Elektronen auf den Untergittern A und B in der Einheitszelle mit der Koordinate  $\mathbf{R}_i$  ( $\mathbf{R}_i$  sind Vektoren des Bravais-Gitters). Wir ignorieren hier den Spin des Elektrons. Wir nehmen an  $t$  ist reell.

Fourier-Transformation lautet

$$\hat{a}_i^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger,$$

$$\hat{b}_i^\dagger = \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger.$$

Dann:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \hat{a}_{\mathbf{k}_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}_2} \sum_{\langle ij \rangle} e^{-i\mathbf{k}_1[\mathbf{R}_i + \mathbf{R}(\delta_j)]} e^{i\mathbf{k}_2 \mathbf{R}_i} + h.c.,$$

wobei  $\mathbf{R}(\boldsymbol{\delta}_j)$  ist der Bravais-Vektor der dem Hüpfen  $\boldsymbol{\delta}_j$  entspricht (sehen Sie bitte die Abbildung):

$$\mathbf{R}(\boldsymbol{\delta}_1) = \mathbf{a}_1 = \frac{a}{2} (3, \sqrt{3}), \quad \mathbf{R}(\boldsymbol{\delta}_2) = \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2} (3, -\sqrt{3}), \quad \mathbf{R}(\boldsymbol{\delta}_3) = 0.$$

Hier ist  $a$  der Abstand zwischen den nächsten Nachbarn, d.h.,  $a = |\boldsymbol{\delta}_j|$ . Wir definieren

$$\Delta_{\mathbf{k}} = \sum_j e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}(\boldsymbol{\delta}_j)} = 1 + e^{-ia(3k_x + \sqrt{3}k_y)/2} + e^{-ia(3k_x - \sqrt{3}k_y)/2} = \left[ 1 + 2e^{-3iak_x/2} \cos(\sqrt{3}ak_y/2) \right],$$

und benutzen

$$\sum_i e^{-i\mathbf{k}_1\mathbf{R}_i} e^{i\mathbf{k}_2\mathbf{R}_i} = \delta_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2},$$

Das ergibt den Hamilton-Operator

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\sigma} \sum_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{k}} + h.c.$$

In Matrixform:

$$\mathcal{H} = -t \begin{pmatrix} 0 & \Delta_{\mathbf{k}} \\ \Delta_{\mathbf{k}}^* & 0 \end{pmatrix}.$$

Die Eigenwerte:

$$E_{\mathbf{k}} = \pm t |\Delta_{\mathbf{k}}|,$$

$$\begin{aligned} |\Delta_{\mathbf{k}}|^2 &= 1 + 4 \cos(3ak_x/2) \cos(\sqrt{3}ak_y/2) + 4 \cos^2(\sqrt{3}ak_y/2) \\ &= 3 + 4 \cos(3ak_x/2) \cos(\sqrt{3}ak_y/2) + 2 \cos(\sqrt{3}ak_y). \end{aligned}$$

- (b) zeigen Sie, dass die Bandlücke an den (Rändern) Ecken der 1. Brillouin Zone verschwindet, und das Spektrum dort als linear genähert werden kann.

Die Basisvektoren des reziproken Gitters sind

$$\mathbf{b}_{1/2} = \frac{2\pi}{3a} \left( 1, \pm\sqrt{3} \right)$$

Die 1. BZ ist hexagonal. Die 6 Ecken sind gegeben durch

$$\frac{2\pi}{3a} \left( 0, \pm\frac{2}{\sqrt{3}} \right), \quad \frac{2\pi}{3a} \left( \pm 1, \pm\frac{1}{\sqrt{3}} \right).$$

Für alle 6 Ecken gilt  $\Delta_{\mathbf{k}} = 0 \Rightarrow E_{\mathbf{k}} = 0$ .

Es gibt zwei "Familien" der Ecken. Der ersten "Familie" gehört der Punkt

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{3a} \left( 1, \frac{1}{\sqrt{3}} \right)$$

und die zwei anderen Punkte

$$\frac{2\pi}{3a} \left( 0, -\frac{2}{\sqrt{3}} \right) = \mathbf{K} - \mathbf{b}_1, \quad \frac{2\pi}{3a} \left( -1, \frac{1}{\sqrt{3}} \right) = \mathbf{K} - \mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2.$$

Die zweite Familie besteht aus

$$\mathbf{K}' = \frac{2\pi}{3a} \left( 1, -\frac{1}{\sqrt{3}} \right).$$

und

$$\frac{2\pi}{3a} \left( 0, \frac{2}{\sqrt{3}} \right) = \mathbf{K}' - \mathbf{b}_2, \quad \frac{2\pi}{3a} \left( -1, -\frac{1}{\sqrt{3}} \right) = \mathbf{K} - \mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_1.$$

Die drei Ecken innerhalb der Familie sind äquivalent.

Die Entwicklung in der Nähe des Punktes  $\mathbf{K}$  ergibt (für alle drei  $\mathbf{K}$ -Punkte):

$$\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{q},$$

$$\Delta_{\mathbf{k}} \approx \frac{3a}{2}(iq_x + q_y).$$

In der Nähe von  $\mathbf{K}$  der effektive Hamilton-Operator lautet

$$\mathcal{H} = v \begin{pmatrix} 0 & iq_x + q_y \\ -iq_x + q_y & 0 \end{pmatrix} = v(q_y\sigma_x - q_x\sigma_y), \quad v = -\frac{3ta}{2}.$$

Die Entwicklung in der Nähe des Punktes  $\mathbf{K}'$  ergibt (für alle drei  $\mathbf{K}'$ -Punkte):

$$\mathbf{k} = \mathbf{K}' + \mathbf{q},$$

$$\Delta_{\mathbf{k}} \approx \frac{3a}{2}(iq_x - q_y).$$

In der Nähe von  $\mathbf{K}'$  der effektive Hamilton-Operator lautet

$$\mathcal{H} = v \begin{pmatrix} 0 & iq_x - q_y \\ -iq_x - q_y & 0 \end{pmatrix} = v(-q_y\sigma_x - q_x\sigma_y), \quad v = -\frac{3ta}{2}.$$

Insgesamt gilt

$$\mathcal{H} = v(\tau_z q_y \sigma_x - q_x \sigma_y), \quad (1)$$

wobei  $\tau_z = 1$  im Tal (valley) von  $\mathbf{K}$  und  $\tau_z = -1$  im Tal (valley) von  $\mathbf{K}'$ .

**Zeitumkehr:** Der Hamilton-Operator (1) ist explizit Zeitumkehr-symmetrisch. Um das zu verstehen erinnern wir uns, dass wir den Spin ignoriert haben. Die Operatoren  $\sigma_x$  und  $\sigma_y$  sind keine echten Spin-Operatoren, sondern die Pseudo-Spins im Raum (A,B). Deswegen ist in unserem Fall die Zeitumkehr-Symmetrie äquivalent der komplexen Konjugation im  $r$ -Raum,  $T\Psi(r) = \Psi^*(r)$ ,  $T = K$ ,  $T^2 = 1$ . Für die Pseudo-Spin Operatoren bedeutet das  $T\sigma_x T^{-1} = \sigma_x$  und  $T\sigma_y T^{-1} = -\sigma_y$ . Im  $k$ -Raum entspricht die komplexe Konjugation der Transformation  $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ . Denn in der Nähe von einem  $\mathbf{K}$ -Punkt gilt  $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \mathbf{q}$ , müssen wir beschließen, dass  $\mathbf{K} \rightarrow -\mathbf{K} = \mathbf{K}'$  und  $\mathbf{q} \rightarrow -\mathbf{q}$ . D.h., die Zeitumkehr-Transformation wachelt das Tal (Valley) und  $T\tau_z T^{-1} = -\tau_z$ . Wir sehen jetzt, dass  $T\mathcal{H}T^{-1} = \mathcal{H}$ :

$$T\mathcal{H}T^{-1} = v((-\tau_z)(-q_y)(+\sigma_x) - (-q_x)(-\sigma_y)) = \mathcal{H}.$$

In der Literatur existieren mehrere Formen des Hamilton-Operators (1) die durch verschiedene Basisanderungen erreicht werden. Z.B., die folgende haufig benutzte Form

$$\mathcal{H}' = v(\tau_z q_x \sigma_x + q_y \sigma_y),$$

bekommen wir wenn wir im Tal von  $\mathbf{K}$  die folgende unitare Transformation durchfuhren:

$$\mathcal{H}' = U\mathcal{H}U^\dagger,$$

mit

$$U = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

und im Tal von  $\mathbf{K}'$  benutzen wir die Transformationsmatrix

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}.$$

## 2. Van Hove-Singularität: quadratisches Gitter.

Betrachten Sie stark gebundene Elektronen - das "tight-binding" Modell auf dem quadratischen Gitter. Berücksichtigen Sie ausschließlich das Hüpfen über benachbarte Gitterplätze.

(a) Finden Sie das Energiespektrum des Modells.

Das Energiespektrum:

$$E(\mathbf{k}) = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$$

(b) Bestimmen Sie die Zustandsdichte des Modells exakt (d.h. ohne jegliche Näherung).

Die Zustandsdichte:

$$\nu(\epsilon) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(\epsilon - E(\mathbf{k})) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \int_{-\pi}^{\pi} dk_y \delta(\epsilon - E(\mathbf{k})).$$

Die Variablensubstitution:

$$z_1 = \cos k_x, \quad \Rightarrow \quad dz_1 = -\sin k_x dk_x, \quad \Rightarrow \quad dk_x = -\frac{dz_1}{\sqrt{1-z_1^2}}.$$

Dann:

$$\int_{-\pi}^{\pi} dk_x f(\cos k_x) = 2 \int_0^{\pi} dk_x f(\cos k_x) = 2 \int_{-1}^1 \frac{dz_1}{\sqrt{1-z_1^2}} f(z_1).$$

Deswegen:

$$\nu(\epsilon) = \frac{1}{\pi^2} \int_{-1}^1 \frac{dz_1}{\sqrt{1-z_1^2}} \int_{-1}^1 \frac{dz_2}{\sqrt{1-z_2^2}} \delta(\epsilon + 2t(z_1 + z_2)),$$

$$\nu(\epsilon) = \frac{1}{2\pi^2 t} \int_{-1}^1 \frac{dz_1}{\sqrt{1-z_1^2}} \int_{-1}^1 \frac{dz_2}{\sqrt{1-z_2^2}} \delta(\tilde{\epsilon} + z_1 + z_2), \quad \tilde{\epsilon} = \frac{\epsilon}{2t}.$$

Der Variablenbereich:  $\nu(\epsilon) \neq 0$  wenn  $\tilde{\epsilon} \in (-2, 2)$ . Das Spektrum ist symmetrisch. Wir betrachten  $\tilde{\epsilon} \in (0, 2)$ .

Die exakte Zustandsdichte:

$$\nu(\epsilon) = \frac{1}{2\pi^2 t} \int_{-1}^{1-\tilde{\epsilon}} \frac{dz_1}{\sqrt{1-z_1^2} \sqrt{1-(z_1+\tilde{\epsilon})^2}} = \frac{1}{2\pi^2 t} K \left( \sqrt{1 - \frac{\epsilon^2}{16t^2}} \right),$$

wo  $K(k)$  das vollständige elliptische Integral erster Art.

Die letzte Gleichheit erreicht man folgenderweise. Betrachten Sie das Integral

$$I = \int_{\gamma}^{\beta} \frac{dz}{\sqrt{R(z)}}, \quad R(z) = (z - \alpha)(z - \beta)(z - \gamma)(z - \delta), \quad \alpha > \beta > \gamma > \delta.$$

Hier kann man die folgende Variablensubstitution benutzen:

$$z = \frac{\gamma(\beta - \delta) - \delta(\beta - \gamma)t}{\beta - \delta - (\beta - \gamma)t}.$$

Es folgt

$$I = \frac{1}{\sqrt{(\alpha - \gamma)(\beta - \delta)}} \int_0^1 \frac{dt}{\sqrt{t(1-t)(1-mt)}}, \quad m = \frac{(\alpha - \delta)(\beta - \gamma)}{(\alpha - \gamma)(\beta - \delta)}.$$

Für unseres Problem:

$$\alpha = 1, \quad \beta = 1 - \tilde{\epsilon}, \quad \gamma = -1, \quad \delta = -1 - \tilde{\epsilon}, \quad \Rightarrow \quad (\alpha - \gamma)(\beta - \delta) = 4, \quad m = 1 - \frac{\tilde{\epsilon}^2}{4}.$$

Dann mithilfe einer weiteren Variablensubstitution

$$t = \sin^2 \varphi,$$

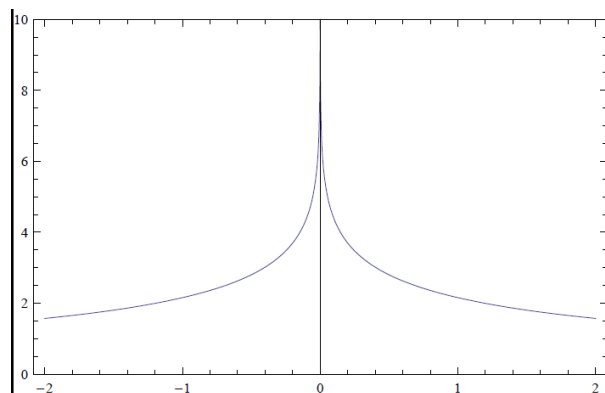
erreichen wir

$$I = \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi}{\sqrt{1 - m \sin^2 \varphi}}.$$

Das ist die kanonische Form des elliptischen Integrals.

(c) Zeichnen Sie die Zustandsdichte auf.

Die exakte Zustandsdichte: sehen Sie die Abbildung.



- (d) Finden Sie die Singularität der Zustandsdichte und bestimmen Sie das asymptotische Verhalten der Zustandsdichte in der Nähe der Singularität. Benutzen Sie den exakten Ausdruck für die Zustandsdichte.

Die Singularität:  $\nu(\epsilon = 0) = \infty$ :

$$K(k \rightarrow 1) \approx \ln \frac{4}{k'}, \quad k' = \sqrt{1 - k^2} \quad \Rightarrow \quad \nu(\epsilon \rightarrow 0) = \frac{1}{2\pi^2 t} \ln \frac{16t}{\epsilon}.$$

- (e) Berechnen Sie das asymptotische Verhalten der Zustandsdichte noch einmal, aber jetzt entwickeln Sie das Energiespektrum in der Region der Brillouin-Zone, die für die Singularität verantwortlich ist.

Der Singularitätspunkt:  $k_x = 0, k_y = \pi, E(0, \pi) = 0$ .

Das Energiespektrum:

$$E(\mathbf{k}) \approx t(k_x^2 - \tilde{k}_y^2), \quad \tilde{k}_y = k_y - \pi.$$

Die Zustandsdichte (logarithmische Genauigkeit):

$$\nu(\epsilon) \approx \frac{1}{(2\pi)^2} \int dk_x d\tilde{k}_y \delta(\epsilon - tk_x^2 + t\tilde{k}_y^2) = \frac{1}{2\pi^2 t} \int \frac{d\tilde{k}_y}{\sqrt{2\tilde{\epsilon} + \tilde{k}_y^2}} \rightarrow \frac{1}{2\pi^2 t} \ln \frac{t}{\epsilon}.$$

- (f) Welche Eigenschaften hat das Energiespektrum in der obengenannten Region der Brillouin-Zone?

Die Eigenschaft des Spektrums

$$\left. \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial k_x} \right|_{k_x=0} = \left. \frac{\partial E(\mathbf{k})}{\partial k_y} \right|_{k_y=\pi} = 0 \quad \Rightarrow \quad \left. \nabla_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \right|_{(0,\pi)} = 0.$$