Karlsruher Institut für Technologie — Institut für Theoretische Festkörperphysik

Übungen zur Theorie der Kondensierten Materie WS 13/14

Prof. Dr. G. Schön
Dr. M. Marthaler

Lösungsvorschlag zu Blatt 12
10.02.2014

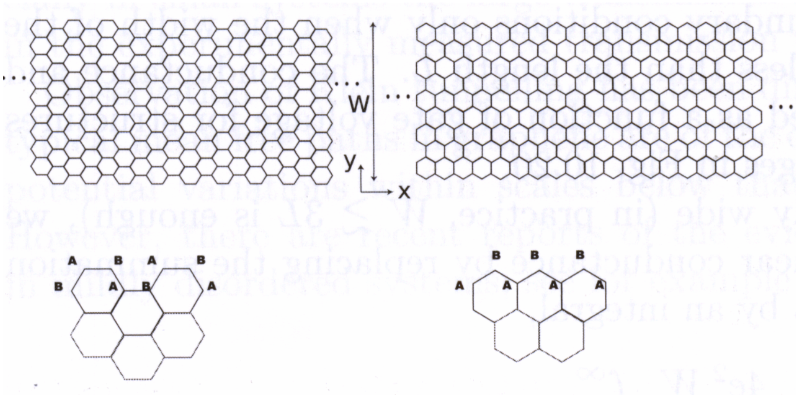
---

1. Graphenstreifen (20 Punkte)

Die zeitunabhänigige Schrödingergleichung für Elektronen in Graphen ist gegeben durch,

$$\begin{pmatrix} 0 & \hbar v_F(\pm i\partial_x - \partial y) \\ \hbar v_F(\pm i\partial_x + \partial_y) & 0 \end{pmatrix} \psi = E\psi \tag{1}$$

Hierbei stehen die beiden Vorzeichen für die beiden Energieminima $\vec{K}$ und $\vec{K}'$ um die wir entwickelt haben. In der Vorlesung wurde bereits die Lösung der Schrödingergleichung für unendlich ausgedehntes Graphen diskutiert. Wir betrachten nun einen Graphenstreifen der in y-Richtung endlich ist. Damit ergeben sich zwei mögliche Randbedingungen die als 'Zigzag' und 'Armchair' bezeichnet werden



Links ist hier die Armchair Konfiguration zu sehen und rechts sieht man Zigzag.

(a) Wir versuchen nun die Wellenfunktionen und Eigenenergien für die Zigzag-Konfiguration zu finden. Wir verwenden dazu den Ansatz

$$\psi(x,y) = e^{ikx} \begin{pmatrix} \chi_A(y) \\ \chi_B(y) \end{pmatrix} . \tag{2}$$

Für die Zigzag-Konfiguration ergeben sich die Randbedingungen

$$\chi_A(0) = \chi_B(W) = 0 . \tag{3}$$

Für χ_i verwenden wir den Ansatz

$$\chi_i(y) = c_i e^{iqy} + d_i e^{-iqy} . \tag{4}$$

Wir verwenden nun die Schrödingergleichung. Damit ergeben sich die beiden Gleichungen,

$$\mp k(c_B e^{iqy} + d_B e^{-iqy}) - iq(c_B e^{iqy} - d_B e^{-iqy}) = \frac{E}{\hbar v_F}(c_A e^{iqy} + d_A e^{-iqy}) \tag{5}$$

$$\mp k(c_A e^{iqy} + d_A e^{-iqy}) + iq(c_A e^{iqy} - d_A e^{-iqy}) = \frac{E}{\hbar v_F}(c_B e^{iqy} + d_B e^{-iqy}) \tag{6}$$

und damit

$$
\begin{aligned}
(\mp k - iq)c_B &= \frac{E}{\hbar v_F} c_A && (7)\\
(\mp k + iq)c_A &= \frac{E}{\hbar v_F} c_B && (8)\\
(\mp k + iq)d_B &= \frac{E}{\hbar v_F} d_A && (9)\\
(\mp k - iq)d_A &= \frac{E}{\hbar v_F} d_B && (10)
\end{aligned}
$$

Nun ist es mglich mit den ersten beiden Gleichungen c_A und c_B zu eliminieren. Damit ergibt sich

$$\epsilon^2 = k^2 + q^2 \tag{11}$$

Nun verwenden wir die Randbedingungen $\xi_A(0) = 0$ und erhalten $c_A = -d_A$. Mit der Randbedingung $\xi_B(W) = 0$ erhalten wir

$$c_B e^{iqW} + d_B e^{-iqW} = 0 \;\Rightarrow\; \frac{c_B}{d_B} = -e^{-2iqW} \tag{12}$$

Zusammen mit den vier Gleichungen oben erhalten wir

$$
\begin{aligned}
\epsilon c_A &= (\mp k - iq)c_B = -\epsilon d_A && (13)\\
\Rightarrow \epsilon d_A &= (\mp k + iq)d_B = -(\mp k - iq)c_B && (14)
\end{aligned}
$$

$$\Rightarrow \frac{\mp k + iq}{\mp k - iq} = -\frac{c_B}{d_B} = e^{-2iqW} \tag{15}$$

Wir nehmen nun an, dass q reel ist,

$$\log \frac{\mp k + iq}{\mp k - iq} = i \arctan \frac{\pm q}{k} = -2iqW \tag{16}$$

und damit erhalten wir eine Gleichung für k,

$$k = \mp \frac{q}{\tan 2qW} \tag{17}$$

(b) Zur Berechnung der Wellenfunktionen und Eigenenergien in der Armchair-Konfiguration verwenden wir den Ansatz,

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}\psi_1(\vec{r}) + e^{i\vec{K}'\cdot\vec{r}}\psi_2(\vec{r})\,. \tag{18}$$

Hierbei ist es sinnvoll die Gittervektoren $\vec{K} = (0, K)$ und $\vec{K}' = (0, -K)$ mit $K = 4\pi/3a$ zu verwenden, wobei a die Gitterkonstante ist. Die Randbedingungen sind gegeben durch

$$\psi(x, y = 0) = \psi(x, y = W) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{19}$$

Wir verwenden zudem wieder,

$$\psi_i(x, y) = e^{ikx} \begin{pmatrix} \chi_{A_i}(y) \\ \chi_{B_i}(y) \end{pmatrix}. \tag{20}$$

Damit ergibt sich aus den Randbedingungen

$$\chi_{A_1/B_1}(0) + \chi_{A_2/B_2}(0) = 0 \tag{21}$$
$$e^{iKW}\chi_{A_1/B_1}(W) + e^{-iKW}\chi_{A_2/B_2}(W) = 0 \tag{22}$$

Da die Randbedingungen für χ_{A_i} und χ_{B_i} gleich sind lösen sie nun exemplarisch für einen Fall,

$$\chi_{A_1}(y) = Ae^{iqy} + Be^{-iqy} \quad \chi_{A_2}(y) = Ce^{iqy} + De^{-iqy} \tag{23}$$

Damit ergibt sich,

$$A + B + C + D = 0 \tag{24}$$
$$Ae^{i(q+K)W} + De^{-i(q+K)W} + Be^{-i(q-K)W} + Ce^{i(q-K)W} = 0 \tag{25}$$

Wir lösen diese Gleichungen durch die Wahl $C = B = 0$ und $A = -D$. Die erste Gleichung ist damit automatisch gelöst und die zweite Gleichung ist gegeben durch

$$\sin[(q + K)W] = 0 \tag{26}$$

Damit erhalten wir,

$$q = \frac{n\pi}{W} - \frac{4\pi}{3a} \tag{27}$$

Für die Eigenenergien gilt dasselbe wie im vorherigen Aufgaben teil,

$$\epsilon = \sqrt{k^2 + q^2} \tag{28}$$