Karlsruher Institut für Technologie | Institut für Theoretische Festkörperphysik

Übungen zur Theorie der Kondensierten Materie WS 13/14

Prof. Dr. G. Schön
Dr. M. Marthaler

Blatt 12
Besprechung, 10.02.14

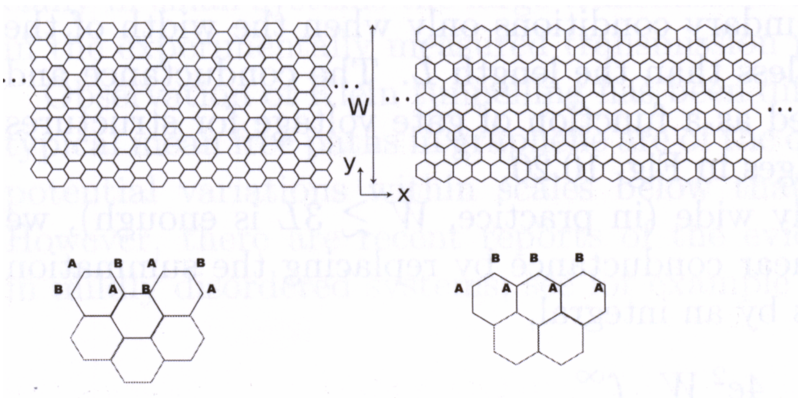
---

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) (7 Punkt) Wir versuchen nun die Wellenfunktionen und Eigenenergien für die Zigzag-Konfiguration zu finden. Verwenden sie 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

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

Wählen sie für χ_i den Ansatz

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

und finden sie eine Gleichung zur Bestimmung von q. Bestimmen sie dann auch die Eigenenergie $E(q)$ der Wellenfunktion.

(b) (13 Punkte) Zur Berechnung der Wellenfunktionen und Eigenenergien in der Armchair-Konfiguration verwenden wir den Ansatz,

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{K}\cdot\vec{r}}\psi_1(\vec{r}) + e^{i\vec{K}'\cdot\vec{r}}\psi_2(\vec{r}) . \tag{5}$$

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

$$\psi(x, y = 0) = \psi(x, y = W) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} . \tag{6}$$

Beachten sie das $\psi(x,y)$ ein zweikomponentiger Vektor ist. Bestimmen sie die Wellenfunktionen die diese Randbedingungen erfüllen und berechnen sie deren Eigenenergien.