

Theorie der Kondensierten Materie I WS 2014/2015

Prof. Dr. A. Mirlin, Dr. I. Gornyi
U. Briskot, N. Kainaris, Dr. E. König

Blatt 3: Lösungen
Besprechung 13.11.2014

1. LCAO-Näherung für Wannier-Funktionen (6 + 6 = 12 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.

Lösung:

Vorlesung (LCAO-Modell): Anzahl der Bänder $N_b = 1$, ein s -Zustand $\phi(\mathbf{r}) = \phi(|\mathbf{r}|)$,

$$E_{\mathbf{k}} = E_a + \frac{\sum_{\mathbf{R}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} h(\mathbf{R})}{1 + \sum_{\mathbf{R} \neq 0} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} I(\mathbf{R})},$$

wobei

$$h(\mathbf{R}) = \int d^3r \phi^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}),$$

$$\Delta U(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = U(\mathbf{R}) - U_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}) = \sum_{\mathbf{R}' \neq \mathbf{R}} U_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}')$$

und

$$I(\mathbf{R}) = \int d^3r \phi^*(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}).$$

Quadratisches Gitter:

$$\mathbf{R} \in \{\text{n. N.}\} = \{\pm a\mathbf{e}_x, 0\}, \{0, \pm a\mathbf{e}_y\}, \quad |\mathbf{R}| = a,$$

$$\mathbf{R} \in \{\text{ü.-n. N.}\} = \{\pm a\mathbf{e}_x, \pm a\mathbf{e}_y\}, \quad |\mathbf{R}| = \sqrt{2}a.$$

Beschränkung der Summe auf nächsten Nachbarn sowie übernächsten Nachbarn:

$$E_{\mathbf{k}} = E_a + \frac{h(0) + \sum_{\mathbf{R} \in \{\text{n. N.}\}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} h(a) + \sum_{\mathbf{R} \in \{\text{ü.-n. N.}\}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} h(\sqrt{2}a)}{1 + \sum_{\mathbf{R} \in \{\text{n. N.}\}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} I(a) + \sum_{\mathbf{R} \in \{\text{ü.-n. N.}\}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} I(\sqrt{2}a)}, \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{R} \in \{\text{n. N.}\}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} &= e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{-ik_y a} = 2 [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)], \\ \sum_{\mathbf{R} \in \{\text{ü.-n. N.}\}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} &= e^{ik_x a + ik_y a} + e^{ik_x a - ik_y a} + e^{-ik_x a + ik_y a} + e^{-ik_x a - ik_y a} \\ &= 4 \cos(k_x a) \cos(k_y a). \end{aligned}$$

Damit folgt:

$$E_{\mathbf{k}} = E_a + \frac{h(0) + 2h(a) [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] + 4h(\sqrt{2}a) \cos(k_x a) \cos(k_y a)}{1 + 2I(a) [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] + 4I(\sqrt{2}a) \cos(k_x a) \cos(k_y a)}. \quad (2)$$

Weitere Näherung: $h(a), h(\sqrt{2}a) \ll h(0)$, $I(a), I(\sqrt{2}a) \ll 1$. Die Entwicklung:

$$E_{\mathbf{k}} \simeq E_a + h(0) + 2h(a) [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] + 4h(\sqrt{2}a) \cos(k_x a) \cos(k_y a) - h(0) \left\{ 2I(a) [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] + 4I(\sqrt{2}a) \cos(k_x a) \cos(k_y a) \right\},$$

$$E_{\mathbf{k}} \simeq E_0 - 2W_1 [\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] - 4W_2 \cos(k_x a) \cos(k_y a),$$

wobei

$$E_0 = E_a + h(0), \quad W_1 = h(0)I(a) - h(a), \quad W_2 = h(0)I(\sqrt{2}a) - h(\sqrt{2}a).$$

- (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 $E_{\mathbf{k}}$.

Lösung:

Einfach kubisches Gitter, nächste Nachbarn:

$$\mathbf{R} \in \{\text{n. N.}\} = \{\pm a\mathbf{e}_x, 0, 0\}, \quad \{0, \pm a\mathbf{e}_y, 0\}, \quad \{0, 0, \pm a\mathbf{e}_z\}, \quad |\mathbf{R}| = a,$$

Ein dreifach entartetes p -Orbital:

$$E_{a,l} = E_p, \quad \phi_l(\mathbf{r}) = x_l \varphi(|\mathbf{r}|), \quad l = 1, 2, 3, \quad x_1 = x, \quad x_2 = y, \quad x_3 = z.$$

$$h_{lm}(0) = \int d^3r \phi_l^*(\mathbf{r}) \Delta U(\mathbf{r}, 0) \phi_m(\mathbf{r}) = \int d^3r x_l x_m \Delta U(\mathbf{r}, 0) |\varphi(r)|^2.$$

Die Symmetrieoperationen des Gitters / des Potentials $U(\mathbf{r})$ (bzw. Kombinationen davon), die im Folgenden nützlich sind, lauten

- (S) Spiegelung an der xy - oder xz - oder yz -Ebene \Leftrightarrow Inversion der Koordinaten $x \rightarrow -x, y \rightarrow -y, z \rightarrow -z$, unabhängig voneinander.
 (R) Rotation um $2\pi/3$ um die Achse $(0, 0, 0) - (a, a, a) \Leftrightarrow$ Zyklische Vertauschung der Koordinaten: $(x, y, z) \rightarrow (z, x, y) \rightarrow (y, z, x)$.

Symmetrieoperationen (S) und (R) kann man jetzt auf $h_{lm}(0)$ anwenden (d.h., die Integrationsvariablen x_l entsprechend transformieren, die Jacobi-Determinante ist

ja 1). Da $U(\mathbf{r})$, $U_a(\mathbf{r})$ und $\varphi(r)$ mit $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ invariant sind unter (S) und (R), kommt es nur auf die x_l an:

$$l \neq m : (\text{S}) \text{ auf } x_l \text{ oder } x_m \Rightarrow h_{lm}(0) = -h_{lm}(0) \Rightarrow h_{lm}(0) = 0$$

also

$$h_{12}(0) = h_{21}(0) = h_{13}(0) = h_{31}(0) = h_{23}(0) = h_{32}(0) = 0,$$

$$h_{lm}(0) = \delta_{lm} \int d^3r x_l x_m \Delta U(\mathbf{r}, 0) |\varphi(r)|^2$$

Jetzt noch

$$(\text{R}) \Rightarrow h_{11}(0) = h_{22}(0) = h_{33}(0) = h(0).$$

Analog für das Überlappintegral:

$$h_{lm}(\mathbf{R}) = \int d^3r x_l (x_m - R_m) \Delta U(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \varphi(|\mathbf{r}|) \varphi(|\mathbf{r} - \mathbf{R}|).$$

mit

$$|\mathbf{r}| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \quad |\mathbf{r} - \mathbf{R}| = \sqrt{(x - R_x)^2 + (y - R_y)^2 + (z - R_z)^2}.$$

Wir betrachten zum Beispiel

$$h_{12}(\mathbf{R}) = \int d^3r x (y - R_y) [U(\mathbf{r}) - U_a(|\mathbf{r} - \mathbf{R}|)] \varphi(|\mathbf{r}|) \varphi(|\mathbf{r} - \mathbf{R}|).$$

Entscheidend ist nun, dass die nächsten Nachbarn auf den Koordinatenachsen liegen, und man daher mit (S) das $h_{xy}(\mathbf{R})$ immer zu null machen kann:

$$\mathbf{R} = (\pm a, 0, 0) : (\text{S}) : y \rightarrow (-y) :$$

$$U(\mathbf{r}) \rightarrow U(\mathbf{r}), \quad |\mathbf{r} - \mathbf{R}| = \sqrt{(x \pm a)^2 + y^2 + z^2} \rightarrow \sqrt{(x \pm a)^2 + y^2 + z^2}$$

$$\Rightarrow h_{12}(\mathbf{R}) = 0.$$

Analog:

$$\mathbf{R} = (0, \pm a, 0) : (\text{S}) : x \rightarrow (-x) \Rightarrow h_{12}(\mathbf{R}) = 0,$$

$$\mathbf{R} = (0, 0, \pm a) : (\text{S}) : x \rightarrow (-x) \Rightarrow h_{12}(\mathbf{R}) = 0.$$

Genauso für die anderen nichtdiagonalen $h_{lm}(\mathbf{R})$, $l \neq m$ und $I_{lm}(\mathbf{R})$, $l \neq m$. Wir können also unsere Überlappintegrale reduzieren auf

$$h_{ij}(0) = \delta_{ij} \cdot h, \tag{3}$$

$$h_{ij}(\vec{a}_k) = \delta_{ij} h_{ii}(\vec{a}_k) = \delta_{ij} [h_{\parallel} \delta_{ik} + h_{\perp} (1 - \delta_{ik})], \quad \vec{a}_k = a \vec{e}_k. \tag{4}$$

und dasselbe mit den I -Integralen. Explizit:

$$h_{xx}(a \vec{e}_x) = \int d^3r x (x - a) \left[U(\mathbf{r}) - U_a(\sqrt{(x - a)^2 + y^2 + z^2}) \right]$$

$$\times \varphi(|\mathbf{r}|) \varphi(\sqrt{(x - a)^2 + y^2 + z^2}) = h_{\parallel}, \tag{5}$$

$$h_{xx}(-a \vec{e}_x) = \int d^3r x (x + a) \left[U(\mathbf{r}) - U_a(\sqrt{(x + a)^2 + y^2 + z^2}) \right]$$

$$\times \varphi(|\mathbf{r}|) \varphi(\sqrt{(x + a)^2 + y^2 + z^2}) \stackrel{(\text{S})}{=} h_{xx}(a \vec{e}_x) = h_{\parallel}, \tag{6}$$

$$h_{xx}(a\vec{e}_y) = \int d^3r x^2 \left[U(\mathbf{r}) - U_a(\sqrt{x^2 + (y-a)^2 + z^2}) \right] \\ \times \varphi(|\mathbf{r}|) \varphi(\sqrt{x^2 + (y-a)^2 + z^2}) = h_{\perp} \neq h_{\parallel}, \quad (7)$$

$$h_{yy}(a\vec{e}_y) = \int d^3r y(y-a) \left[U(\mathbf{r}) - U_a(\sqrt{x^2 + (y-a)^2 + z^2}) \right] \\ \times \varphi(|\mathbf{r}|) \varphi(\sqrt{x^2 + (y-a)^2 + z^2}) \stackrel{(R)}{=} h_{\parallel}, \quad (8)$$

usw.

Damit zerfällt die Gleichung für das Spektrum in der nächsten-Nachbarn-Näherung

$$(E_{\mathbf{k}} - E_{a,l})b_l + \sum_m b_m (E_{\mathbf{k}} - E_{a,m}) \sum_{\mathbf{R} \in \{n.N\}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} I_{lm}(\mathbf{R}) \\ = \sum_m b_m \left[h_{lm}(0) + \sum_{\mathbf{R} \in \{n.N\}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} h_{lm}(\mathbf{R}) \right] \quad (9)$$

in drei ungekoppelte Gleichungen

$$(E_{\mathbf{k}} - E_p)b_l + b_l(E_{\mathbf{k}} - E_p) \sum_{\mathbf{R} \in \{n.N\}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} I_{ll}(\mathbf{R}) \\ = b_l \left[h + \sum_{\mathbf{R} \in \{n.N\}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} h_{ll}(\mathbf{R}) \right], \quad l = 1, 2, 3. \quad (10)$$

Damit folgt:

$$E_{\mathbf{k},l} = E_p + \frac{h + \sum_{\mathbf{R} \in \{n.N\}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} h_{ll}(\mathbf{R})}{1 + \sum_{\mathbf{R} \in \{n.N\}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}} I_{ll}(\mathbf{R})} \quad (11)$$

Für die x -Komponente ($l = 1$) ist dies

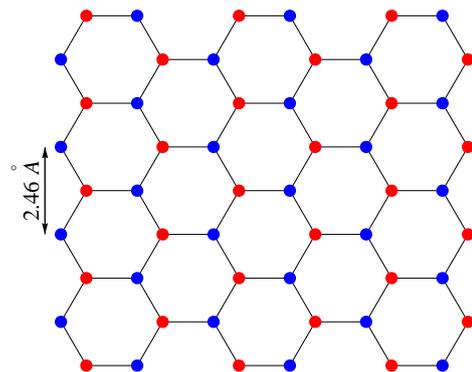
$$E_{\mathbf{k},1} = E_p + \frac{h + 2h_{\parallel} \cos(k_x a) + 2h_{\perp} [\cos(k_y a) + \cos(k_z a)]}{1 + 2I_{\parallel} \cos(k_x a) + 2I_{\perp} [\cos(k_y a) + \cos(k_z a)]} \quad (12)$$

Die y, z -Dispersionen lassen sich dann einfach durch zyklische Permutation erzeugen.

2. Bandstruktur von Graphen

(6 + 6 + 6 = 18 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.



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>

P. R. Wallace, Physical Review **71**, 622 (1947).

- (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.

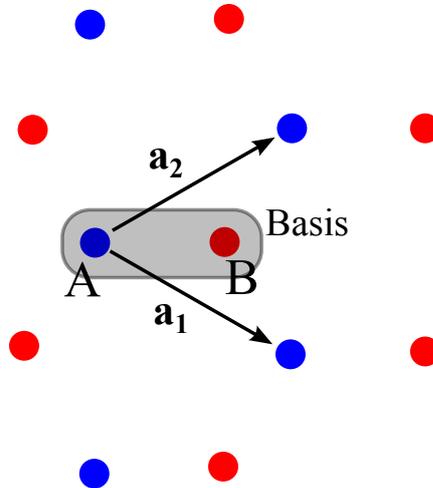
Lösung:

In dieser Lösung ist der Abstand zwischen zwei benachbarten Kohlenstoffatomen $a = 1$. (Vorsicht: Dies ist hier nicht die Gitterkonstante).

“Tight-Binding”-Modell:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \hat{a}_{\sigma, i}^\dagger \hat{b}_{\sigma, j} + h.c. \\ &= -t \sum_i \left[\hat{a}_{\sigma, \vec{R}_i}^\dagger \hat{b}_{\sigma, \vec{R}_i} + \hat{a}_{\sigma, \vec{R}_i + \vec{a}_1}^\dagger \hat{b}_{\sigma, \vec{R}_i} + \hat{a}_{\sigma, \vec{R}_i + \vec{a}_2}^\dagger \hat{b}_{\sigma, \vec{R}_i} + h.c. \right] \end{aligned} \quad (13)$$

wobei die Summe nur über die nächsten Nachbarn läuft. Operatoren $\hat{a}_{\sigma, \vec{R}_i}^\dagger$ und $\hat{b}_{\sigma, \vec{R}_i}^\dagger$ erzeugen Elektronen auf den Untergittern A und B in der Einheitszelle mit der Koordinate \vec{R}_i .



Die Bravais-Vektoren des Gitters sind gegeben durch

$$\mathbf{a}_1 = \frac{\sqrt{3}}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{\sqrt{3}}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (14)$$

Fourier-Transformation:

$$\hat{a}_{\sigma, \vec{R}_i}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\vec{R}_i} \hat{a}_{\sigma, \mathbf{k}}^\dagger \quad (15)$$

$$\hat{b}_{\sigma, \vec{R}_i}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\vec{R}_i} \hat{b}_{\sigma, \mathbf{k}}^\dagger \quad (16)$$

gibt uns

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= -t \sum_i \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \left[e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\mathbf{R}_i} \hat{a}_{\sigma, \mathbf{p}}^\dagger \hat{b}_{\sigma, \mathbf{k}} + e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{a}_1} \hat{a}_{\sigma, \mathbf{p}}^\dagger \hat{b}_{\sigma, \mathbf{k}} + e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\mathbf{R}_i} e^{-i\mathbf{p}\mathbf{a}_2} \hat{a}_{\sigma, \mathbf{p}}^\dagger \hat{b}_{\sigma, \mathbf{k}} + \text{h.c.} \right] \\
&= -t \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{p}} \left[\left(\hat{a}_{\sigma, \mathbf{p}}^\dagger \hat{b}_{\sigma, \mathbf{k}} + e^{-i\mathbf{p}\mathbf{a}_1} \hat{a}_{\sigma, \mathbf{p}}^\dagger \hat{b}_{\sigma, \mathbf{k}} + e^{-i\mathbf{p}\mathbf{a}_2} \hat{a}_{\sigma, \mathbf{p}}^\dagger \hat{b}_{\sigma, \mathbf{k}} \right) \underbrace{\frac{1}{N} \sum_i e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{p})\mathbf{R}_i}}_{\delta_{\mathbf{k}, \mathbf{p}}} + \text{h.c.} \right] \\
&= -t \sum_{\mathbf{k}} [1 + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_2}] \hat{a}_{\sigma, \mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\sigma, \mathbf{k}} + \text{h.c.} \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \hat{a}_{\sigma, \mathbf{k}} \\ \hat{b}_{\sigma, \mathbf{k}} \end{pmatrix}^\dagger h_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \hat{a}_{\sigma, \mathbf{k}} \\ \hat{b}_{\sigma, \mathbf{k}} \end{pmatrix} \tag{17}
\end{aligned}$$

wobei

$$\Delta_{\mathbf{k}} = 1 + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_2} \quad \text{und} \quad h_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} 0 & -t\Delta_{\mathbf{k}} \\ -t\Delta_{\mathbf{k}}^* & 0 \end{pmatrix}. \tag{18}$$

Die Blochfunktionen $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{x}) = \mathbf{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} \mathbf{u}_{\mathbf{k}}$ sind durch folgende Eigenfunktionen des erstquantisierten Hamiltonoperators $h_{\mathbf{k}}$ gegeben:

$$u_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}|\Delta|} \begin{pmatrix} \sqrt{\Delta_{\mathbf{k}}} \\ \mp \sqrt{\Delta_{\mathbf{k}}^*} \end{pmatrix}. \tag{19}$$

- (b) Ausgehend von der ‘‘Tight-Binding’’-Naherung, finden Sie die Bandstruktur von Graphen. Zeigen Sie, dass die Bandlucke an besonderen Punkten der 1. Brillouin-Zone verschwindet, und das Spektrum dort als linear genahert werden kann.

Losung:

Die Eigenwerte zu obigen Eigenfunktionen sind:

$$E_{\mathbf{k}} = \pm t \sqrt{\Delta_{\mathbf{k}} \Delta_{\mathbf{k}}^*},$$

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

Die Energienullpunkte liegen an den BZ Ecken

$$E_{\mathbf{k}} = 0 \quad \Rightarrow \quad \Delta_{\mathbf{k}} = 0,$$

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{K}' = \frac{2\pi}{3} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ -\sqrt{3} \end{pmatrix}.$$

Die anderen Ecken sind auf Grund der Symmetrie aquivalent.

Die Entwicklung in der Naher der \mathbf{K} -Ecke liefert:

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

$$\Delta_{\mathbf{k}} \approx -i \frac{3}{2} e^{-iK_x} (q_x + iq_y).$$

Der konstante Phasenfaktor $-ie^{-iKx}$ ist nicht wichtig. Daher ergibt sich für der Niederenergie-Hamiltonoperator in der Nähe von \mathbf{K}

$$\mathcal{H} = v \begin{pmatrix} 0 & q_x + iq_y \\ q_x - iq_y & 0 \end{pmatrix}, \quad v = \frac{3t}{2}.$$

Der Hamiltonoperator in der Nähe von \mathbf{K}' folgt analog.

- (c) Bestimmen Sie nun die Bandstruktur für den Fall, dass in Überlappintegralen auch die übernächsten Nachbarn berücksichtigt werden.

Lösung:

Wieder ist der Startpunkt das “Tight-Binding”-Modell:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \left(\hat{a}_{\sigma,i}^\dagger \hat{b}_{\sigma,j} + \text{h.c.} \right) - t' \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} \left(\hat{a}_{\sigma,i}^\dagger \hat{a}_{\sigma,j} + \hat{b}_{\sigma,i}^\dagger \hat{b}_{\sigma,j} + \text{h.c.} \right),$$

Das Spektrum lässt sich ähnlich wie die Aufgabe 1b) herleiten:

$$E_{\mathbf{k}} = \pm t \sqrt{3 + f_{\mathbf{k}}} - t' f_{\mathbf{k}},$$

$$f_{\mathbf{k}} = 2 \cos(\sqrt{3}k_y) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right) \cos\left(\frac{3}{2}k_x\right),$$

Die Entwicklung in der Nähe der Ecken liefert ($\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{K}$):

$$E_{\mathbf{q}}^\pm \simeq 3t' \pm v_F |\mathbf{q}| - \left[\frac{9t'a^2}{4} \pm \frac{3ta^2}{8} \sin(3\theta_{\mathbf{q}}) \right] |\mathbf{q}|^2, \quad (20)$$

wobei

$$\theta_{\mathbf{q}} = \arctan\left(\frac{q_x}{q_y}\right). \quad (21)$$

3. Bonusaufgabe: Graphen-Doppelschicht

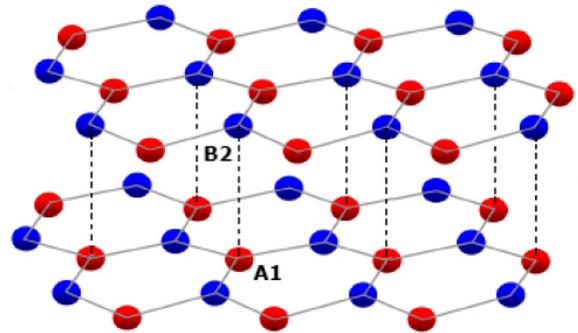
(5 Bonuspunkte)

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).

Lösung:

Der zweit quantisierte Hamiltonoperator für den Fall der Bernal-Stapelung ist:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \left(\hat{a}_{\sigma,i}^\dagger \hat{b}_{\sigma,j} + \tilde{a}_{\sigma,i}^\dagger \tilde{b}_{\sigma,j} \right) - 2\gamma_1 \sum_i \tilde{a}_{\sigma,i}^\dagger \hat{b}_{\sigma,i} + \text{h.c.}$$



Somit ist der erstquantisierte Hamiltonoperator in Matrixform und in der Nähe der Brillouinzonenecken (ähnlich wie die Aufgabe 2)

$$h_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} 0 & v(q_x + iq_y) & 0 & 0 \\ v(q_x - iq_y) & 0 & 2\gamma_1 & 0 \\ 0 & 2\gamma_1 & 0 & v(q_x + iq_y) \\ 0 & 0 & v(q_x - iq_y) & 0 \end{pmatrix}.$$

Es folgen die Eigenwerte:

$$E_{\mathbf{k}} = \pm \left(\gamma_1 \pm \sqrt{v^2|\mathbf{q}|^2 + \gamma_1^2} \right).$$

Es gibt zwei Bänder mit der Energielücke

$$\pm \left(\gamma_1 + \sqrt{v^2|\mathbf{q}|^2 + \gamma_1^2} \right) \approx \pm \left(2\gamma_1 + \frac{v^2|\mathbf{q}|^2}{2\gamma_1} \right),$$

und zwei Bänder ohne Lücke:

$$\pm \left(\gamma_1 - \sqrt{v^2|\mathbf{q}|^2 + \gamma_1^2} \right) \approx \mp \frac{v^2|\mathbf{q}|^2}{2\gamma_1}.$$

