

Übungen zu Computational Nanoscience

– Blatt 8 –

Prof. Dr. Alexander Lichtenstein

zum 08.06.2016

Die Übung findet um 14:15 Uhr im PHYSnet-Pool 3 statt!

Aufgabe 1) Lineare 1D-Kette von Wasserstoffatomen

Verwende das Python-Skript "simple.py" (ZIP-TB), um mit Hilfe eines Tight-Binding-Modells das Banddiagramm einer eindimensionalen Kette von Wasserstoff-Atomen zu berechnen und zu visualisieren.

- a) Wo liegt das Fermi-Niveau?
- b) Welche Punkte in dem Banddiagramm entsprechen dem bindenden und dem antibindenden Fall?
- c) Wie kann man in dem Skript den Orbital-Überlapp vergrößern bzw. verkleinern? Wie wirkt sich das auf das Banddiagramm aus?

Aufgabe 2) Elektronische Struktur von Graphen

Verwende nun das Python-Skript "graphene.py", um das Tight-Binding-Modell für Graphen zu lösen.

- a) Ist Graphen metallisch oder ein Isolator? Was ist charakteristisch für die Dispersion um das Fermi-Niveau?
- b) Verändere nun den Parameter "delta". Welche Auswirkungen hat dies auf die Bänder?
- c) Wie wirkt sich eine Veränderung des Hopping-Parameters "t" auf die Bänder aus?
- d) Was passiert, wenn Du den Hopping-Parameter nur in eine Richtung veränderst? Was könnte ein anisotropes Hopping für ein reales System bedeuten bzw. wie könnte man eine solche Anisotropie im Experiment erzeugen?