ÜBUNGEN zur Theorie der kondensierten Materie I

Prof. A. Lichtenstein

Übungsblatt 4, 13 November 2017

1) Tight-binding Näherung in 2 Dimensionen

Berechnen Sie die Dispersion für Elektronen auf einem Quadratgitter in 2 Dimensionen in tight-binding Näherung. Berücksichtigen Sie dabei sowohl das Hüpfen zwischen nächsten Nachbarn (t) als auch übernächsten Nachbarn (t').

2) Elektronen im 2D tight binding Band

Betrachten Sie das Ergebnis aus Aufgabe 1).

a) Zeichnen Sie für den Fall, dass sich in diesem Kristall pro Gitterplatz ein Elektron befindet, die Fermifläche. Handelt es sich um ein Metall oder Isolator?

b) Zeichnen Sie die Fermifläche für zwei Elektronen pro Gitterplatz. Ist das System metallisch oder ein Isolator?

3) Graphen: Masselose Elektronen in 2 Dimensionen

Graphen besteht aus Kohlenstoffatomen auf einem 2-dimensionalem Sechseckgitter. Berechnen Sie in tight-binding Näherung dafür die Bandstruktur. Betrachten Sie die Einheitszelle bestehend aus zwei Atomen wie in Fig. 1 von Phys. Rev. Lett. 53, 2449 (1984) dargestellt. Um die Bandstruktur in der Nähe der Fermienergie zu erhalten, genügt es, die p_z Bänder wie in der o.g. Veröffentlichung zu berücksichtigen:

Starten Sie mit dem Hamiltonoperator

$$H = t \sum_{A,i} c_A^\dagger d_{A+b_i} + d_{A+b_i}^\dagger c_A,$$

wobei c_A und d_{A+b_i} die Fermioperatoren für Elektronen auf Untergitter 1 bzw. 2 an den Orten A bzw. $A + b_i$ sind. A und b_i sind wie in o.g. Veröffentlichung definiert.

Benutzen sie die fouriertransformierten Operatoren $c_A = \int_{\Omega_B} \frac{d^2k}{\Omega_B} e^{ikA} c(k)$ und $d_{A+b_i} = \int_{\Omega_B} \frac{d^2k}{\Omega_B} e^{ik(A+b_i)} d(k)$ um den Hamiltonoperator im k-Raum als 2×2 Matrix darzustellen. (Ω_B bezeichnet die 1. Brillouinzone.) Diagonalisieren Sie diese Matrix und erhalten Sie so die Bandstruktur.

Ohne Dotierung ist das p_z halb gefüllt. Finden Sie die zugehörige Fermienergie und zeigen Sie, dass es genau zwei Punkte gibt, an denen diese Energie angenommen wird. Führen Sie eine Taylorentwicklung obiger 2×2 Matrix um einen dieser Fermipunkte durch und zeigen Sie, dass der so erhaltene Hamiltonoperator die Form der relativistischen Dirac-Gleichung für masselose Teilchen in zwei Dimensionen hat.

Anmerkung: Das Auftreten von „ultrarelativischen“ Quasiteilchen in 2D hat ein komplett neues Forschungsfeld eröffnet. Eine sehr gute Zusammenstellung unter www.graphene.org - insbesondere die dort verlinkten Physics World, Physics Today und Nature Materials Artikel bieten einen interessanten Einblick.