

**Aufgabe 4.1 Freie Elektronen im hexagonalen Gitter**

Graphen besteht aus Kohlenstoffatomen, die in einem zweidimensionalen hexagonalen Gitter mit zweiatomiger Basis (A und B) angeordnet sind. Die Basisvektoren des Bravais-Gitters sind gegeben durch  $\mathbf{a}_1 = a(1,0)$  und  $\mathbf{a}_2 = a(-1, \sqrt{3})/2$ , mit der Gitterkonstanten  $a$ . Das reziproke

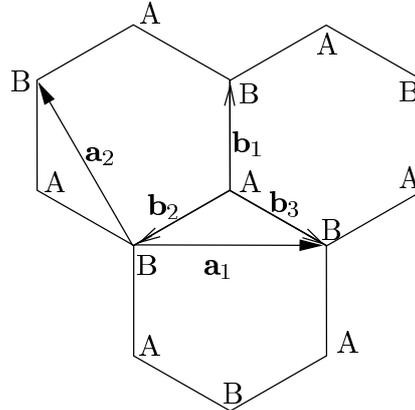


Abbildung 1: Das hexagonale Gitter mit zwei Dreiecksuntergittern (A und B) und den Einheitsvektoren  $\mathbf{a}_1$  und  $\mathbf{a}_2$ .

Gitter ist ein Dreiecksgitter mit einer hexagonalen Brillouin-Zone (Abb. 2).

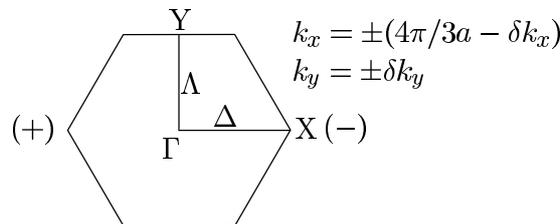


Abbildung 2: Erste Brillouin-Zone des hexagonalen Gitters.

Finde die Bandstruktur freier Elektronen entlang der  $\Delta$ - und  $\Lambda$ -Linien. Verwende die angefügten Charaktertabellen, Tabelle 1.

Die Kohlenstoffatome besitzen vier Valenzelektronen. Wegen der zweiatomigen Basis müssen acht Elektronen in der ersten Brillouin-Zone untergebracht werden. Identifiziere so das oberste Valenz- und das Leitungsband. Wie sieht die Bandstruktur an der Fermieenergie aus?

**Aufgabe 4.2 Stark gebundene Elektronen im hexagonalen Gitter**

1. Berechne die Dispersionsrelation,

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \pm t \left[ 1 + 4 \cos^2(k_x a/2) + 4 \cos(k_x a/2) \cos(\sqrt{3} k_y a/2) \right]^{1/2}, \quad (1)$$

im hexagonalen Gitter in der tight-binding Approximation mit Hüpfmatrixelement  $t$ , wobei nur das oberste atomare Orbital (die Elektronen im  $\pi$ -Orbital) berücksichtigt wird.

2. Berechne die Zustandsdichte

$$n(\varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{n}} \delta[\varepsilon - \varepsilon(\mathbf{k}_{\mathbf{n}})]$$

für das tight-binding Modell.

$C_{6v}$	$E$	$2C_6$	$2C_6^2$	$C_6^3$	$3\sigma_y$	$3\sigma_x$	$C_{3v}$	$E$	$2C_3$	$3\sigma_x$
$\Gamma_1$	1	1	1	1	1	1	$X_1$	1	1	1
$\Gamma_2$	1	1	1	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$X_2$	1	1	$\bar{1}$
$\Gamma_3$	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	$X_3$	2	$\bar{1}$	0
$\Gamma_4$	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1				
$\Gamma_5$	2	1	$\bar{1}$	$\bar{2}$	0	0				
$\Gamma_6$	2	$\bar{1}$	$\bar{1}$	2	0	0				

$C_{2v}$	$E$	$C_2$	$\sigma_y$	$\sigma_x$	$C_i$	$E$	$\sigma_v$
$Y_1$	1	1	1	1	$\Delta_1$	1	1
$Y_2$	1	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	$\Delta_2$	1	$\bar{1}$
$Y_3$	1	$\bar{1}$	1	$\bar{1}$			
$Y_4$	1	$\bar{1}$	$\bar{1}$	1			

Tabelle 1: Charaktertabellen der Punktgruppen  $C_{6v}$ ,  $C_{3v}$ ,  $C_{2v}$  und  $C_i$ .

*Hinweis:* Benutze

$$\int_c^b dx [(a-x)(b-x)(x-c)(x-d)]^{-1/2} = 2[(a-c)(b-d)]^{-1/2} K[(b-c)(a-d)/(a-c)(b-d)]^{1/2},$$

für  $a > b \geq c > d$  mit dem vollständigen elliptischen Integral

$$K(k) = \int_0^{\pi/2} d\varphi (1 - k^2 \sin^2 \varphi)^{-1/2} = \begin{cases} (\pi/2)[1 + k^2/4 + O(k^4)] & k^2 \ll 1 \\ [\log 16/(1 - k^2)][1 + O(1 - k^2)]/2 & 0 \ll k^2 < 1 \end{cases}$$

Wie sieht die Zustandsdichte für kleine Energien aus. Hat die Zustandsdichte eine Singularität? Wie verhält sich die Zustandsdichte in der Nähe der Singularität.

- An den Ecken der Brillouin-Zone berühren sich das Valenz- und das Leitungsband. Linearisiere den tight-binding Hamiltonian um die zwei inäquivalenten Ecken ( $\pm$ ). Bestimme den zweidimensionalen Dirac-Hamiltonian für masselose Fermionen,

$$\mathcal{H} = v_F \begin{pmatrix} p_x \sigma_x + p_y \sigma_y & 0 \\ 0 & p_x \sigma_x - p_y \sigma_y \end{pmatrix}, \quad (2)$$

mit  $p_k = \hbar \delta k_k$ , als Linearisierung um ( $\pm$ ). Der Hamiltonian wirkt auf den Pseudospinor  $(\Psi_{A,+}, \Psi_{B,+}, \Psi_{A,-}, \Psi_{B,-})$ , der Anregungen auf dem A(B)-Gitter um den  $+(-)$  Punkt der Brillouin-Zone beschreibt, vgl. Abb. 2.

### Aufgabe 4.3 Landau-Niveaus in Graphen

Ein Magnetfeld senkrecht zur Graphenschicht wird in der Landau-Eichung beschrieben durch das Vektorpotential  $\mathbf{A} = (0, Hx, 0)$ . Der freie Hamiltonian (2) ändert sich dann gemäss der Peierls-Substitution  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} + e\mathbf{A}/c$ . Löse die Schrödingergleichung im Magnetfeld und finde so die Landau-Niveaus. Vergleiche sie mit den Landau-Niveaus  $E_n = \hbar\omega_c(n + 1/2)$ ,  $\omega_c = eB/mc$ , für das freie Elektronengas.

### Aufgabe 4.4 (\*) Die Berry-Phase im linearen Spektrum

Berechne die Berry-Phase eines Eigenzustandes  $|\mathbf{k}\rangle$  des 2D-Dirac-Hamiltonians (2) zur Energie  $E$  und zum Pseudoimpuls  $\hbar\mathbf{k}$  für eine adiabatische Rotation des  $\mathbf{k}$ -Vektors um eine Ecke der ersten Brillouin-Zone gemäss der Formel

$$\gamma = i \int_0^{2\pi} d\alpha \langle \mathbf{k}(\alpha) | \partial_\alpha | \mathbf{k}(\alpha) \rangle.$$

Was ist der Zusammenhang zu den ungewöhnlichen Landau-Niveaus?

*Hinweis:* Diese Formel gilt nur, falls sich der Eigenzustand unter der gewählten Parametrisierung kontinuierlich verändert.