Vorbemerkung

Dies ist ein abgegebener Übungszettel aus dem Modul physik411.

Dieser Übungszettel wurde nicht korrigiert. Es handelt sich lediglich um meine Abgabe und keine Musterlösung.

Alle Übungszettel zu diesem Modul können auf http://martin-ueding.de/de/university/bsc_physics/physik411/ gefunden werden.

[disclaimer]

physik411 – Übung 10

Gruppe 2 – Florian Seidler

Martin Ueding *

2014-07-07

1. Dirac-Singularitäten in Graphen

1a. Hybridorbital

Die σ-Bindung liegt in der Ebene, die π-Bindung liegt senkrecht dazu. Die Bindungen mit * sind die Antibindenen.

1b. Hybridisierungstyp

Da noch ein π-Bindung übrig bleibt, und zwei p-Orbitale eine mit dem s-Orbital entartete Bindungsenergie haben, muss es sp^2 sein. Dieses Hybridorbital ist in Abb. 1 dargestellt.

1c. Besetzung

Kohlenstoff hat 4 Valenzelektronen. So kann jeweils ein Elektron in eines der Hybridorbitale und eins in das p_z-Orbital. Jedes der Hybridorbitale geht eine σ-Bindung mit einem benachbarten Atom ein, so kommt jeweils noch ein weiteres Elektron mit entgegengesetztem Spin dazu. Das Elektron im p_z-Orbital besetzt das π-Molekülorbital. Es geht mit allen Nachbarn gleichzeitig eine π-Bindung ein, jedoch nur eine Gleichzeitig. Dies führt zu einem delokalisierten π-Molekülorbital.

*mu@uni-bonn.de

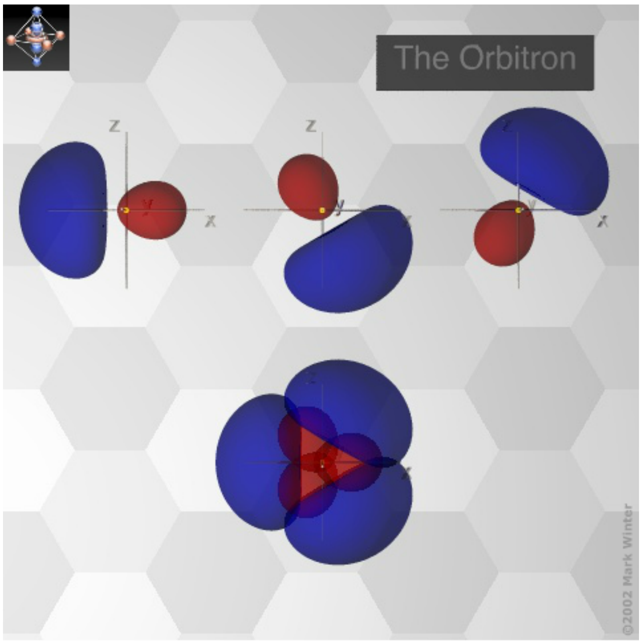
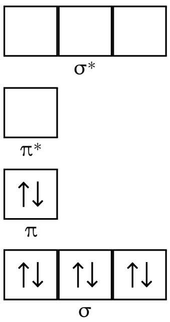


Abbildung 1: sp^2-Hybridorbital. Bild aus [**?**].

Die Besetzung ist dann also:



Also ist σ mit 6 Elektronen besetzt, und π mit 2, der Rest leer. Daher ist die Bindung auch maximal stark.

1d. Bloch-Funktionen

Die vier Symmetrieachsen sind schon in Abbildung (1a) auf dem Aufgabenzettel eingezeichnet. So sind die Spiegelungen an Achsen, die senkrecht zur z-Achse sind, die Achsen $C2'$, $C2''$ und $C2''$. Die Spiegelung an der x-y-Ebene ist wohl durch $C3$ gegeben, wobei das auch die Punktsymmetrie des Kristalls sein könnte.

Die drei Spiegelungen $C2$ sind wohl von gerader Parität und um 120° versetzt, so dass diese unterschiedlich sind. Die Spiegelung $C3$ ist von ungerader Parität, da das p_z Orbital selbst antisymmetrisch ist.

Die einzelnen Orbitale s und p haben andere Symmetrien, das s-Orbital ist kugelsymmetrisch und kann daher beliebig gespiegelt oder gedreht werden. Die p_i-Orbitale können an der i-Achse symmetrisch gespiegelt werden, an den anderen beiden Achsen jedoch nur antisymmetrisch.

Die σ und π Bahnen sind nicht gekoppelt, da sie getrennte Orbitale sind. Genauso wie schon s und p orthogonale Wellenfunktionen sind. Durch die Hybridisierung bleibt die Anzahl der Wellenfunktionen gleich, so dass diese weiterhin orthogonal sein können.

1e. Äquivalenz von Hochsymmetriepunkten

Die Punkte K_1 und K_5 sowie K_2 und K_4 lassen sich durch $\boldsymbol{g}_2$ aufeinander abbilden. $\boldsymbol{g}_1$ tut dies mit K_4 und K_6. Die Summe der beiden Gittervektoren lässt noch K_3 und K_5 äquivalent sein. Letztlich gilt:

$$K_i \sim K_j \iff |i-j| \mod 2 = 0$$

Damit gibt sich die eine Gruppe, in der i und j gerade sind, sowie eine andere Gruppe, in der beide ungerade sind.

1f. Punktgruppe D3h

Die Drehung C_3 um 120° funktioniert auch im reziproken Gitter, sie bildet gerade auf gerade Punkte ab. Die Rotationen C_2 bildet auch äquivalente K aufeinander ab, wenn die Rotationsachse genau gleich im Raum liegt. Dann bildet C_2''' K_6 auf K_4 ab, sowie K_1 auf K_3 ab.

1g. Überlagerung von Bloch-Funktionen

Das Bloch-Theorem besagt, dass die Wellenfunktionen aus einem periodischen Potential, das die gleiche Periodizität wie das Kristallgitter hat, und einer ebenen Welle besteht. Jede Überlagerung hat schon mal eine derartige ebene Welle:

$$\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r}) = \sum_{n_1,n_2} \left(c_1\psi_{p_z}(\boldsymbol{r}-n_1\boldsymbol{t}_1-n_2\boldsymbol{t}_2)+c_2\psi_{p_z}(\boldsymbol{r}-n_1\boldsymbol{t}_1-n_2\boldsymbol{t}_2-\boldsymbol{d})\right)\exp\left(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(n_1\boldsymbol{t}_1+n_2\boldsymbol{t}_2)\right)$$

Durch die Summation über die Basisvektoren $\boldsymbol{t}$ ist jeder Summand in der Klammer genauso periodisch wie das Gitter selbst. Auch wenn der zweite Summand zum ersten Verschoben ist, ist die Periodizität immer noch die gleiche, wie das Gitter. Daher erfüllt $\psi_{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})$ das Bloch-Theorem.

1h. Energieeigenwerte

Die Funktionen $\psi_{\boldsymbol{k},A}(\boldsymbol{r})$ und $\psi_{\boldsymbol{k},B}(\boldsymbol{r})$ bilden die Basis für den Hamiltonoperator $\hat{H}_k$. Die Eigenwerte dieses Operators sind die Energien, die im Leitungs- und Valenzband herauskommen. Daher brauche ich nur die

Eigenwerte λ dieser Matrix zu bestimmen.

$$\begin{aligned}
\det\begin{pmatrix} E_0-\lambda & J\cdot\left(1+\exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{t}_1)+\exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{t}_2)\right) \\ J\cdot\left(1+\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{t}_1)+\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{t}_2)\right) & E_0-\lambda \end{pmatrix} &= 0 \\
(E_0-\lambda)^2 - J^2\cdot\left(1+\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{t}_1)+\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{t}_2)\right)\left(1+\exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{t}_1)+\exp(-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\boldsymbol{t}_2)\right) &= 0 \\
\lambda^2-2E_0\lambda+E_0^2-J^2\cdot\left(3+2\cos(\boldsymbol{k}\boldsymbol{t}_1)+2\cos(\boldsymbol{k}\boldsymbol{t}_2)+2\cos\left(\boldsymbol{k}(\boldsymbol{t}_1-\boldsymbol{t}_2)\right)\right) &= 0
\end{aligned}$$

Die Lösung für die Eigenwerte, und damit für die Eigenenergien, ist:

$$\lambda = E_0 \pm J\sqrt{3+2\cos(\boldsymbol{k}\boldsymbol{t}_1)+2\cos(\boldsymbol{k}\boldsymbol{t}_2)+2\cos\left(\boldsymbol{k}(\boldsymbol{t}_1-\boldsymbol{t}_2)\right)}$$

1i. Entartung

Ich setze:

$$\boldsymbol{k} := \frac{\boldsymbol{g}_1-\boldsymbol{g}_2}{3}$$

Mit $\boldsymbol{g}_i\boldsymbol{t}_j = 2\pi\delta_{ij}$ folgt dann für λ:

$$\begin{aligned}
\lambda &= E_0 \pm J\sqrt{3+2\cos(2\pi/3)+2\cos(-2\pi/3)+2\cos(4\pi/3)} \\
&= E_0 \pm J\times 0 \\
&= E_0
\end{aligned}$$

Somit haben beide ($\pm$) Energien den gleichen Wert und sind entartet.

2. Zustandsdichte im zweidimensionalen Systemen

2a. Zustandsdichte

$$D(E) = \sum_{\boldsymbol{k},s}\delta\left(E-E_{\text{frei}}\left(|k|\right)\right)$$

Dies wandele ich mit der auf dem Aufgabenblatt gegebenen Formel in ein Integral um. Dabei ist die Dimension $m=1$.

$$= \frac{S}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}k\,\delta\left(E-E_{\text{frei}}\left(|k|\right)\right)$$

Die δ-Distribution hat nun die Eigenschaft bei Verkettung, dass eine Summe über alle Nullstellen entsteht. Daher formt sich der Ausdruck um zu:

$$= \frac{S}{2\pi} \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \, \frac{\delta(k - k_n)}{\frac{\mathrm{d}E_{\text{frei}}}{\mathrm{d}k}}$$

Die Dispersionsrelation ist streng monoton steigend, somit dann auf dem relevanten Intervall bijektiv. Daher gibt es nur eine Nullstelle der inneren Funktion, $k - k_0$. Die Summe entfällt.

$$= \frac{S}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}k \, \frac{\delta(k - k_0)}{\frac{\mathrm{d}E_{\text{frei}}}{\mathrm{d}k}}$$

Und da die Dispersionsrelation nur vom Betrag abhängt, kann die Integration auch von 0 begonnen werden. Allerdings sollte dann noch ein Faktor 2 dazu.

$$= \frac{S}{\pi} \int_{0}^{\infty} \mathrm{d}k \, \frac{\delta(k - k_0)}{\frac{\mathrm{d}E_{\text{frei}}}{\mathrm{d}k}}$$

2b. Explizite Formel

Ich setze ein:

$$E_{\text{frei}}(K) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Die Nullstelle der Funktion ist bei:

$$k_0 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Wenn ich diese auch noch in die $D(E)$ einsetze und integriere, erhalte ich:

$$D(E) = \frac{S}{\pi} \frac{\hbar\sqrt{2E}}{\sqrt{m}}$$

2c. Anzahl der Quantenzustände

Ich integriere die Dichte nach dem Wellenvektor von 0 bis E_{F} und erhalte dann die Gesamtzahl an Zuständen. Ich erhalte:

$$\frac{2S\hbar}{3\pi} \sqrt{\frac{2}{m}} E_{\text{F}}^{3/2}$$

Da die Teilchen Spin 1/2 haben, sind es Fermionen. Ich muss also den Rest der Teilaufgabe rechnen. Die gerade errechnete Anzahl setze ich gleich n und löse nach E_F auf. Ich erhalte:

$$E_\mathrm{F} = \left(\frac{3n\pi}{2S\hbar} \sqrt{\frac{m}{2}} \right)^{2/3}$$

Jedoch ist diese Energie gleich 0, wenn die Masse m gleich 0 ist.

2d. Masseloses Teilchen

Die Fermi-Geschwindigkeit ist:

$$v_\mathrm{F} = \sqrt{\frac{2E_\mathrm{F}}{m_\mathrm{e}}}$$

Wenn ich allerdings $m = 0$ in die Formel aus der vorherigen Teilaufgabe einsetze, erhalte ich einfach nur 0.