

## Vorbemerkung

Dies ist ein korrigierter Übungszettel aus dem Modul physik411.

Dieser Übungszettel wurde von einem Tutor korrigiert. *Dies bedeutet jedoch nicht, dass es sich um eine Musterlösung handelt. Weder ich, noch der Tutor implizieren, dass dieses Dokument keine Fehler enthält.*

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

Sofern im Dokuments nichts anderes angegeben ist: Dieses Werk von Martin Ueding ist lizenziert unter einer [Creative Commons Namensnennung - Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International Lizenz](#).

[disclaimer]

# physik411 – Übung 10

Gruppe 2 – Florian Seidler


Martin Ueding \* 

2013-07-01

Lizenz: [CC-BY-SA 3.0](#)   

## 1. Dirac-Singularitäten in Graphen

### 1a. Hybridorbital

Die  $\sigma$ -Bindung liegt in der Ebene, die  $\pi$ -Bindung liegt senkrecht dazu. Die Bindungen mit \* sind die Antibindungen. 

### 1b. Hybridisierungstyp

Da noch ein  $\pi$ -Bindung übrig bleibt, und zwei p-Orbitale eine mit dem s-Orbital entartete Bindungsenergie haben, muss es  $sp^2$  sein. Dieses Hybridorbital ist in Abbildung 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  $\sigma$ -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  $\pi$ -Molekülorbital. Es geht mit allen Nachbarn gleichzeitig eine  $\pi$ -Bindung ein, jedoch nur eine gleichzeitig. Dies führt zu einem delokalisierten  $\pi$ -Molekülorbital.

---

\*[mu@uni-bonn.de](mailto:mu@uni-bonn.de)

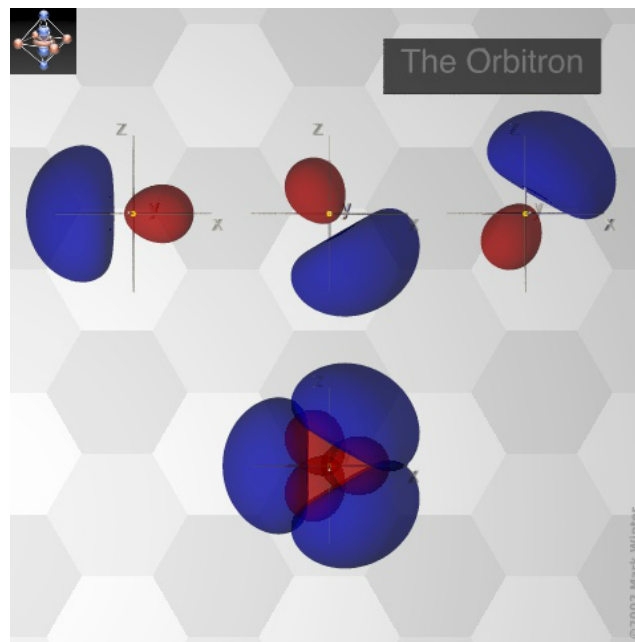
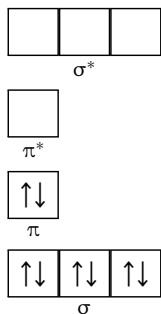


Abbildung 1:  $sp^2$ -Hybridorbital. Bild aus [Winter, 2002].

Die Besetzung ist dann also:




Also ist  $\sigma$  mit 6 Elektronen besetzt, und  $\pi$  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  $120^\circ$  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  $\sigma$  und  $\pi$  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  $\mathbf{g}_2$  aufeinander abbilden.  $\mathbf{g}_1$  tut dies mit  $K_4$  und  $K_6$ . Die Summe der beiden Gittervektoren lässt noch  $K_3$  und  $K_5$  äquivalent sein. Letztlich gilt:

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

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  $120^\circ$  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:

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

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

### 1h. Energieeigenwerte

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

Eigenwerte  $\lambda$  dieser Matrix zu bestimmen.

$$\det \begin{pmatrix} E_0 - \lambda & J \cdot (1 + \exp(-i\mathbf{k}t_1) + \exp(-i\mathbf{k}t_2)) \\ J \cdot (1 + \exp(i\mathbf{k}t_1) + \exp(i\mathbf{k}t_2)) & E_0 - \lambda \end{pmatrix} = 0$$

$$(E_0 - \lambda)^2 - J^2 \cdot (1 + \exp(i\mathbf{k}t_1) + \exp(i\mathbf{k}t_2)) (1 + \exp(-i\mathbf{k}t_1) + \exp(-i\mathbf{k}t_2)) = 0$$

$$\lambda^2 - 2E_0\lambda + E_0^2 - J^2 \cdot (3 + 2 \cos(\mathbf{k}t_1) + 2 \cos(\mathbf{k}t_2) + 2 \cos(\mathbf{k}(t_1 - t_2))) = 0$$

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

$$\lambda = E_0 \pm J \sqrt{3 + 2 \cos(\mathbf{k}t_1) + 2 \cos(\mathbf{k}t_2) + 2 \cos(\mathbf{k}(t_1 - t_2))}$$



### 1i. Entartung

Ich setze:

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

Mit  $\mathbf{g}_i t_j = 2\pi\delta_{ij}$  folgt dann für  $\lambda$ :

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

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



## 2. Zustandsdichte im zweidimensionalen Systemen

### 2a. Zustandsdichte

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

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

$$= \frac{S}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \delta(E - E_{\text{frei}}(|\mathbf{k}|))$$




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

$$= \frac{S}{2\pi} \sum_n \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\delta(k - k_n)}{\frac{dE_{\text{frei}}}{dk}}$$

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.

$$= \frac{S}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{\delta(k - k_0)}{\frac{dE_{\text{frei}}}{dk}}$$

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

$$= \frac{S}{\pi} \int_0^{\infty} dk \frac{\delta(k - k_0)}{\frac{dE_{\text{frei}}}{dk}}$$



### 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:

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

### 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:

$$\frac{2S\hbar}{3\pi} \sqrt{\frac{2}{m}} E_F^{3/2} \quad \text{$$

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:

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

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



## 2d. Masseloses Teilchen

Die Fermi-Geschwindigkeit ist:

$$v_F = \sqrt{\frac{2E_F}{m_e}}$$

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



## Literatur

[Winter, 2002] Winter, M. (2002). The Orbitron –  $sp^2$ . <http://winter.group.shef.ac.uk/orbitron/A0-hybrids/sp2/index.html>.