

Quantentheorie II

Übungsblatt 8

Abgabe: Mittwoch, 20.06.07

Besprechung: Donnerstag, 21.06.07, 14:00 in 26C402

Einführung in Graphene

Das Element Kohlenstoff kommt in verschiedenen Allotropen vor: 3-dimensionaler Graphit und Diamant, 1-dimensionale Carbon Nanotubes, und 0-dimensionale Fullereene. In 2004 wurde schliesslich die (verdächtigerweise) fehlende 2-dimensionale Erscheinungsform entdeckt, das sog. Graphene.

Graphene ist ein nur ein Atom dicker Film aus kristallinem Kohlenstoff, mit einem hexagonalen "honeycomb" Kristallgitter. Neben technisch sehr interessanten elektrischen Eigenschaften ist Graphene auch theoretisch aussergewöhnlich: die Elektronen an der Fermikante werden nicht durch eine Schrödigergleichung beschrieben, sondern durch die Dirac-ähnliche Gleichung

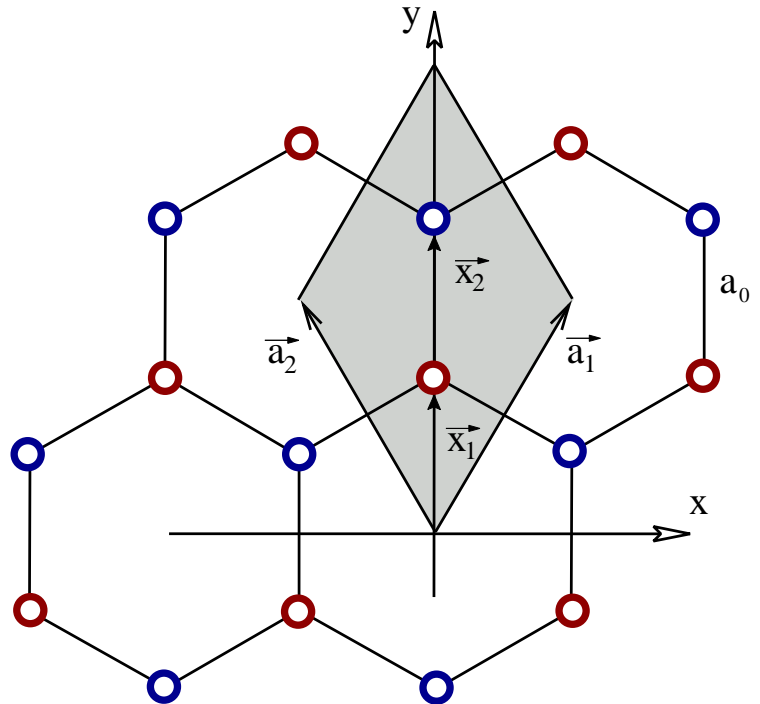


Abb.1: Kristallstruktur von Graphene

$$H\psi = -i\hbar v_F \sigma^i \partial_i \psi = -i\hbar v_F \begin{bmatrix} 0 & \partial_x - i\partial_y \\ \partial_x + i\partial_y & 0 \end{bmatrix} \psi = E\psi \quad (1)$$

wobei σ^i die Pauli-Matrizen bezeichnet. Diese Gleichung beschreibt masselose chirale Spin-1/2-Teilchen. Jedoch gibt es zwei wesentliche Unterschiede zur relativistischen Quantenmechanik. Die Lichtgeschwindigkeit c in der Diracgleichung wurde durch die Fermigeschwindigkeit $v_F \approx c/300$ ersetzt, und der Spin in Gleichung (1) kennzeichnet hier nicht den normalen Elektronenspin, sondern einen Pseudospin. Dieser Pseudospin beschreibt die Besetzung der zwei unterschiedlichen Gitterplätze in der Einheitszelle. Dies wird in der Bonusaufgabe näher diskutiert. Der eigentliche Spin der Elektronen kann vernachlässigt werden.

Bevor Sie die Übungsaufgabe beginnen sollten Sie den folgenden Artikel lesen

Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene

M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov and A. K. Geim, Nature Physics 2, 620 (2006)

Download: <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0604323>

Aufgabe 24: Chirales Tunneln und das Klein-Paradox in Graphene

(20 Punkte)

Betrachten Sie eine Potentialbarriere

$$V(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{für } x < 0 \\ V_0 & \text{für } 0 < x < D \\ 0 & \text{für } D < x \end{cases} \quad (2)$$

der Dicke D in der 2-dimensionalen Ebene des Graphene-Films. Untersucht werden soll das Streuverhalten der Elektronen an dieser Barriere.

- (a) Erklären Sie kurz, warum Gleichung (1) masselose chirale Teilchen beschreibt.
 (b) Zeigen Sie, dass die Eigenenergien des Hamiltonians gegeben sind durch

$$E = s\hbar v_F |\mathbf{k}| \quad \text{mit } s = \pm 1 \quad (3)$$

und die zugehörigen Eigenvektoren durch

$$\psi(x, y) = \begin{bmatrix} \psi_1(x, y) \\ \psi_2(x, y) \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2V}} e^{ik_x x} e^{ik_y y} \begin{bmatrix} 1 \\ s e^{i\phi} \end{bmatrix}, \quad (4)$$

Dabei bezeichnet V das Raumvolumen, und die Phase ϕ entspricht dem Auftreffwinkel der Elektronen auf die Barriere, sodass $k_x = |\mathbf{k}| \cos \phi$ und $k_y = |\mathbf{k}| \sin \phi$.

- (c) Berechnen Sie den Erwartungswert des (Pseudo-)Spins $\mathbf{s} = \langle \psi | \boldsymbol{\sigma} | \psi \rangle$. In welcher Orientierung steht der Spin zum Impuls für Lösungen der Diracgleichung mit positive und negative Energie?
 (d) Argumentieren Sie, warum Katsnelson *et al.* für das Streuprobblem den Lösungsansatz

$$\begin{aligned} \psi_1(x, y) &= \begin{cases} (e^{ik_x x} + r e^{-ik_x x}) e^{ik_y y}, & x < 0, \\ (a e^{iq_x x} + b e^{-iq_x x}) e^{ik_y y}, & 0 < x < D, \\ t e^{ik_x x + ik_y y}, & x > D, \end{cases} \\ \psi_2(x, y) &= \begin{cases} s (e^{ik_x x + i\phi} - r e^{-ik_x x - i\phi}) e^{ik_y y}, & x < 0, \\ s' (a e^{iq_x x + i\theta} - b e^{-iq_x x - i\theta}) e^{ik_y y}, & 0 < x < D, \\ s t e^{ik_x x + ik_y y + i\phi}, & x > D \end{cases} \end{aligned} \quad (5)$$

wählen, wobei der Impuls in der Barriere durch $q_x = \sqrt{(E - V_0)^2 / \hbar^2 v_F^2 - k_y^2}$ gegeben ist, der Refraktionswinkel $\theta = \tan^{-1}(k_y / q_x)$ ist, und $s = \text{sign}(E)$ sowie $s' = \text{sign}(E - V_0)$.

- (e) Bestimmen Sie die Anschlussbedingungen an den Grenzen $x = 0$ und $x = D$.
 (f) Lösen Sie das entstehende Gleichungssystem, gegebenenfalls mittels eines Computeralgebrasystems, und zeigen Sie damit, dass die Reflektionsamplitude gegeben ist durch

$$r = 2e^{i\phi} \sin(q_x D) \frac{\sin \phi - s s' \sin \theta}{s s' [e^{-iq_x D} \cos(\phi + \theta) + e^{iq_x D} \cos(\phi - \theta)] - 2i \sin(q_x D)}. \quad (6)$$

- (g) Plotten Sie den Transmissionskoeffizienten $|t|^2 = 1 - |r|^2$ in einem Polarplot als Funktion des Einfallswinkels ϕ für Elektronen mit der Fermi-energie $E = +84 \text{ meV}$. Die Barrierenhöhe sei 200 meV , und die Barrierenbreite sei 100 nm . Setzen Sie voraus, dass die Fermigeschwindigkeit $v_F = c/300$ beträgt.
 (h) Wie gross ist die Transmission für $\phi = 0$? Erklären Sie ihre Beobachtung mit dem Wissen, dass die Streuung elastisch ist, und dass eine Potentialstufe nicht an den (pseudo-)Spin koppelt, dieser also erhalten bleibt.

Bonusaufgabe

Aufgabe 25: Herleitung des Dirac-artigen Hamiltonian (0 Punkte)

Graphene ist ein nur eine Atomlage dicker Film aus Kohlenstoff mit einer hexagonalen Kristallstruktur. Eine solche "honeycomb"-Struktur besteht aus Einheitszellen des hexagonalen 2D-Bravais Gitters mit je zwei Atomen pro Einheitszelle, siehe Abbildung 1. Die Gittervektoren sind

$$\mathbf{a}_1 = a_0\sqrt{3} \left(1/2, \sqrt{3}/2 \right), \quad \mathbf{a}_2 = a_0\sqrt{3} \left(-1/2, \sqrt{3}/2 \right), \quad (7)$$

wobei $a_0 = 1.42\text{\AA}$ den Abstand benachbarter Atome bezeichnet. Die Transporteigenschaften eines Kristalls wird bestimmt durch die elektronische Bandstruktur. Um diese zu bestimmen muss der (1-Teilchen)Hamiltonian

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \sum_{\mathbf{R} \in G} [V(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1 - \mathbf{R}) + V(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2 - \mathbf{R})]. \quad (8)$$

gelöst werden. Dabei bezeichnet $V(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)$ das Potential, das ein einzelnes Atom am Gitterplatz \mathbf{x}_i erzeugt. Die Positionen der zwei Atome innerhalb der Einheitszelle sind mit $\mathbf{x}_{1/2}$ gekennzeichnet, und G bezeichnet die Menge aller Gittervektoren. (Also $\mathbf{R} = n \cdot \mathbf{a}_1 + m \cdot \mathbf{a}_2$ mit $n, m \in \mathbb{Z}$)

Der Lösungsansatz für ein periodisches Gitter ist eine Blochwellenfunktion

$$\psi_{\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{R} \in G} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} \phi(\mathbf{x} - \mathbf{R}), \quad (9)$$

Die sog. *Wannier-Funktion* $\phi(\mathbf{x})$ beschreibt die stark lokalisierte Wellenfunktion des Elektrons innerhalb der Einheitszelle. Da Graphene nun zwei Atome innerhalb der Einheitszelle besitzt, können wir annehmen, dass die Wannier-Funktion eine lineare Kombination der atomaren (p_z) Orbitale ist, die jeweils an einem Kohlenstoffatom lokalisiert sind. Die Wellenfunktionen der atomaren Orbitale ϕ_1 and ϕ_2 erfüllen die entsprechende Schrödingergleichung

$$\left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i) \right] \phi_i = \varepsilon \phi_i. \quad (10)$$

Mit diesen atomaren Wellenfunktionen ergibt sich die Wannier-Funktion

$$\phi(\mathbf{x}) = b_1 \phi_1(\mathbf{x}) + b_2 \phi_2(\mathbf{x}). \quad (11)$$

Die Hauptaufgabe besteht nun darin, die Parameter b_1 und b_2 so zu bestimmen, sodass

$$H\psi_{\mathbf{k}} = E(\mathbf{k})\psi_{\mathbf{k}}. \quad (12)$$

Die atomare Wellenfunktion ϕ_i erfüllt zwar die Schrödingergleichung mit einem einzelnen atomaren Potential, aber nicht den Hamiltonian des gesamten Gitters. Wenn man H auf ϕ_1 anwendet, erhält man deshalb

$$H\phi_1 = \varepsilon\phi_1 + \left[\sum_{\mathbf{R} \neq 0} (V(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1 - \mathbf{R}) + V(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2 - \mathbf{R})) + V(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2) \right] \phi_1, \quad (13)$$

und analog für ϕ_2 . Wir wählen einen Energienullpunkt, sodass $\varepsilon = 0$, und benennen den zweiten Energiebeitrag auf der rechten Seite von Gleichung (13) mit ΔU_1 und erhalten

$$H\phi_1 = \Delta U_1 \phi_1 \quad \text{und} \quad H\phi_2 = \Delta U_2 \phi_2. \quad (14)$$

Um die b_i zu bestimmen brauchen wir 2 Gleichungen. Diese erhalten wir, indem man Gleichung (12) auf die zwei Orbitalzustände ϕ_1 und ϕ_2 projiziert.

$$\langle \phi_{i,0} | H | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = E(\mathbf{k}) \langle \phi_{i,0} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = \langle \phi_{i,0} | \Delta U_i | \psi_{\mathbf{k}} \rangle. \quad (15)$$

Dabei bezeichnet der Bra $\langle \phi_{i,0} |$ das Orbital bei Atom 1 in der Einheitszelle $\mathbf{R} = \mathbf{0}$.

Um diese Gleichung auszuwerten benutzen wir eine *Nearest neighbour approximation*. Wir erwarten, dass die Wellenfunktion ϕ_i stark an ihrem jeweiligen Atom am Ort \mathbf{x}_i lokalisiert ist, dass ausschliesslich Überlappintegrale mit Orbitalen benachbarter Atome einen nicht-verschwindenden Beitrag leisten können, z.B. $\langle \phi_{1,0} | \phi_{2,0} \rangle = \int \phi_1^*(\mathbf{x}) \phi_2(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ oder $\langle \phi_{1,0} | \phi_{2,-\mathbf{a}_1} \rangle = \int \phi_1^*(\mathbf{x}) \phi_2(\mathbf{x} - \mathbf{a}_1) d\mathbf{x}$, siehe Abbildung 1.

(a) Leiten Sie die folgenden Gleichungen

$$\langle \phi_1 | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = b_1 + b_2 \gamma_0 \left[1 + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_2} \right] \quad (16)$$

$$\langle \phi_2 | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = b_2 + b_1 \gamma_0 \left[1 + e^{+i\mathbf{k}\mathbf{a}_1} + e^{+i\mathbf{k}\mathbf{a}_2} \right] \quad (17)$$

her, wobei wir annehmen, der Überlapp sei reell. Warum sind alle Überlappintegrale gleich?

(b) Zeigen Sie analog, dass mit $\gamma_1 = \int \phi_1^*(\mathbf{x}) \Delta U_1(\mathbf{x}) \phi_2(\mathbf{x}) d\mathbf{x} = \int \phi_2^*(\mathbf{x}) \Delta U_2(\mathbf{x}) \phi_1(\mathbf{x}) d\mathbf{x}$ folgt

$$\langle \phi_1 | \Delta U_1 | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = b_2 \gamma_1 \left[1 + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k}\mathbf{a}_2} \right] \quad (18)$$

$$\langle \phi_2 | \Delta U_2 | \psi_{\mathbf{k}} \rangle = b_1 \gamma_1 \left[1 + e^{+i\mathbf{k}\mathbf{a}_1} + e^{+i\mathbf{k}\mathbf{a}_2} \right] \quad (19)$$

Warum kann $\langle \phi_{i,0} | \Delta U_i | \phi_{i,0} \rangle$ vernachlässigt werden?

(c) Konstruieren Sie aus den Gleichungen (15)-(19) die Eigenwertgleichung

$$\begin{pmatrix} E(\mathbf{k}) & \alpha(\mathbf{k})(\gamma_0 E(\mathbf{k}) - \gamma_1) \\ \alpha(\mathbf{k})^*(\gamma_0 E(\mathbf{k}) - \gamma_1) & E(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (20)$$

für die Parameter b_i , wobei $\alpha(\mathbf{k}) = 1 + \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) + \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2)$. Im allgemeinen ist $\gamma_0 \ll \gamma_1$. Setzen Sie deshalb für die folgenden Aufgaben $\gamma_0 = 0$.

(d) Berechnen Sie die Dispersionsrelation $E(\mathbf{k})$.

(e) Zeigen Sie, dass für $\mathbf{K} = (k_x, k_y) = (4\pi/(3\sqrt{3}a_0), 0)$ die Energie verschwindet. (Anmerkung: Es gibt weitere \mathbf{K} -Werte, für die $E(\mathbf{K}) = 0$.)

(f) Was ist die Fermienergie?

(g) Betrachten Sie das Eigenwertproblem Eq. (20) nahe am Punkt \mathbf{K} . Schreiben Sie $\mathbf{k} = \mathbf{K} + \boldsymbol{\kappa}$ und linearisieren Sie $\alpha(\mathbf{k})$ in $\boldsymbol{\kappa}$. Zeigen Sie, dass man mit der Substitution $\boldsymbol{\kappa} \rightarrow -i\nabla$ (Wannier theorem), eine Dirac-ähnliche Gleichung erhält.