UNIVERSITÄT KONSTANZ
Fachbereich Physik
Prof. Dr. Guido Burkard

Vorlesung: Mo/Do 10-12 Uhr, R512
Übungen: Mo 14-16/16-18 Uhr, P601/P912

http://theorie.physik.uni-konstanz.de/burkard/teaching/08W-QM

Höhere Quantentheorie und Elektrodynamik
Wintersemester 2008/09

Übungsblatt 9

(Ausgabe: 11.12.2008, Abgabe: 08.01.2009, Besprechung: 12.01.+13.01.2009)

Aufgabe 30 : Chirales Tunneln und das Klein-Paradoxon (20 Bonus-Punkte)

Einführung in Graphen :

Das Element Kohlenstoff kommt in verschiedenen Allotropen vor: 3-dimensionaler Graphit und Diamant, 1-dimensionale *Carbon-Nanotubes*, und 0-dimensionale Fullerene. In 2004 wurde schliesslich die (verdächtigerweise) fehlende 2-dimensionale Erscheinungsform entdeckt, das sog. Graphen (englisch : *graphene*).
Graphen ist ein nur ein Atom dicker Film aus kristallinem Kohlenstoff, mit einem hexagonalen Bienenwaben-Kristallgitter (*honeycomb*). Neben technisch sehr interessanten elektrischen Eigenschaften ist Graphen auch theoretisch außergewöhlich: die Elektronen an der Fermikante werden nicht durch eine Schrödingergleichung beschrieben, sondern durch die Dirac-ähnliche Gleichung

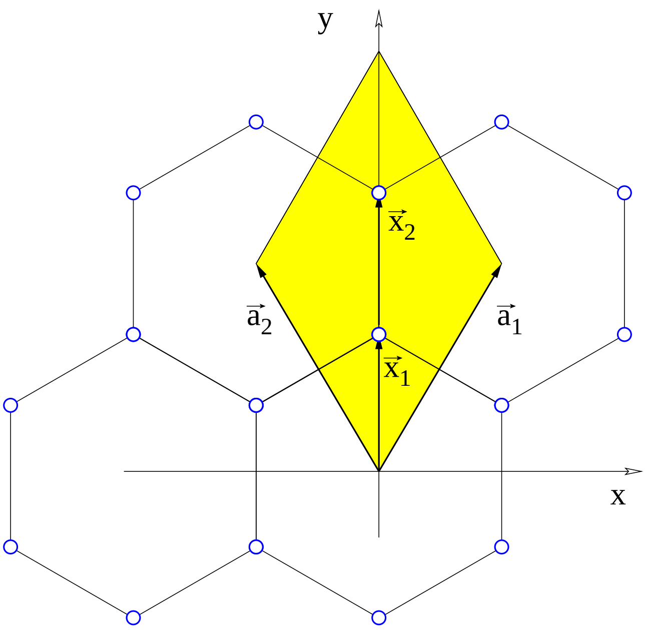

Abbildung 1: Kristallstruktur von Graphen

$$H_0\psi = -i\hbar v_{\mathrm{F}}\sigma^i\partial_i\psi = -i\hbar v_{\mathrm{F}}\begin{pmatrix} 0 & \partial_x - i\partial_y \\ \partial_x + i\partial_y & 0 \end{pmatrix}\psi = E\psi \tag{1}$$

wobei σ^i die Pauli-Matrizen sind. Diese Gleichung beschreibt masselose chirale Spin-1/2-Teilchen. Es gibt jedoch wesentliche Unterschiede zur relativistischen Quantenmechanik. Die Elektronen in Graphen "leben" in 2 Dimensionen, die Lichtgeschwindigkeit c wird durch die Fermigeschwindigkeit $v_{\mathrm{F}} \approx c/300$ ersetzt, und der Spin in Gleichung (1) kennzeichnet nicht den normalen Elektronenspin, sondern einen Pseudospin, der die Besetzung der zwei unterschiedlichen Gitterplätze in der Einheitszelle beschreibt. Der eigentliche Spin der Elektronen kann vernachlässigt werden.

Bevor Sie die Übungsaufgabe beginnen, sollten Sie den folgenden Artikel lesen :

Chiral tunneling 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*

Betrachten Sie eine Potentialbarriere

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

mit $V_0>0$ und der Dicke D in der 2-dimensionalen Ebene des Graphen-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 H_0 gegeben sind durch

$$E=s\hbar v_{\mathrm{F}}|\mathbf{k}|$$

mit $s=\pm 1$ und die zugehörigen Eigenvektoren durch

$$\psi(x,y)=\begin{pmatrix}\psi_1(x,y)\\ \psi_2(x,y)\end{pmatrix}=e^{ik_x x}e^{ik_y y}\begin{pmatrix}1\\ se^{i\phi}\end{pmatrix}.$$

Die Phase ϕ entspricht dem Auftreffwinkel der Elektronen auf die Barriere, so dass $k_x=|\mathbf{k}|\cos\phi$ 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 positiver und negativer Energie?

d) Argumentieren Sie, warum Katsnelson *et al.* für das Streuproblem, definiert durch den Hamiltonian $H=H_0+V$, den Lösungsansatz

$$\psi_1(x,y)=\begin{cases}\left(e^{ik_x x}+re^{-ik_x x}\right)e^{ik_y y} & x<0\\ \left(ae^{iq_x x}+be^{-iq_x x}\right)e^{ik_y y} & 0<x<D\\ te^{ik_x x+ik_y y} & x>D\end{cases}\tag{2}$$

$$\psi_2(x,y)=\begin{cases}s\left(e^{ik_x x+i\phi}-re^{-ik_x x-i\phi}\right)e^{ik_y y} & x<0\\ s'\left(ae^{iq_x x+i\theta}-be^{-iq_x x-i\theta}\right)e^{ik_y y} & 0<x<D\\ ste^{ik_x x+ik_y y+i\phi} & x>D\end{cases}\tag{3}$$

wählen, wobei der Impuls in der Barriere durch $q_x=\sqrt{[(E-V_0)^2/\hbar^2v_{\mathrm{F}}^2]-k_y^2}$ gegeben ist, der Refraktionswinkel $\tan\theta=k_y/q_x$ ist, und $s=\mathrm{sgn}(E)$ sowie $s'=\mathrm{sgn}(E-V_0)$.

e) Bestimmen Sie die Anschlussbedingungen an den Grenzen $x=0$ und $x=D$.

f) Lösen Sie das entstehende Gleichungssystem, gegebenenfalls mittels eines Computer-Algebra-Systems, und zeigen Sie damit, dass die Reflektionsamplitude gegeben ist durch

$$r=2e^{i\phi}\sin(q_xD)\frac{\sin\phi-ss'\sin\theta}{ss'[e^{-iq_xD}\cos(\phi+\theta)+e^{iq_xD}\cos(\phi-\theta)]-2i\sin(q_xD)}.$$

g) Plotten Sie den Transmissionskoeffizienten $|t|^2=1-|r|^2$ in einem Polarplot als Funktion des Einfallswinkels ϕ für Elektronen mit der Energie $E=80$ meV. Die Barrierenhöhe sei 200 meV und die Barrierenbreite 100 nm. Setzen Sie vorraus, dass die Fermigeschwindigkeit $v_{\mathrm{F}}=c/300$ 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.