

# **Das Tight-Binding-Modell für einlagiges Graphen**

Schriftliche Ausarbeitung zum Seminarvortrag

**Greta Huber**

Vortrag im Seminar

**Elektronische Eigenschaften von Graphen**  
gehalten am 27. 4. 2009

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>3</b>
1.1	Einleitung . . . . .	3
1.2	Das Sechseckgitter und seine Bravaisstruktur . . . . .	3
1.3	Reziprokes Gitter und Brillouin-Zone . . . . .	4
<b>2</b>	<b>LCAO</b>	<b>4</b>
2.1	Die LCAO-Methode . . . . .	4
<b>3</b>	<b>Berechnung der Bandstruktur von Graphen</b>	<b>5</b>
3.1	Die LCAO-Methode für Graphen . . . . .	5
3.2	LCAO-Ansatz für Graphen . . . . .	6
3.3	Benötigte Skalarprodukte . . . . .	6
3.4	Dispersionsrelation . . . . .	8
<b>4</b>	<b>Diskussion</b>	<b>10</b>
4.1	Diskussion . . . . .	10
4.2	Entwicklung um den Dirac-Punkt . . . . .	10
4.3	Die Helizität des Pseudospins . . . . .	12
<b>5</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>13</b>
<b>6</b>	<b>Literatur</b>	<b>13</b>

# 1 Einleitung

## 1.1 Einleitung

Graphen ist ein zweidimensionaler Festkörper aus Kohlenstoffatomen, die in einem Sechseckgitter zusammengefügt sind. In diesem Vortrag wird die Bandstruktur von Graphen aus dem sogenannten **Tight-Binding-Modell** hergeleitet. Hierfür wird zuerst das Gitter und das dazugehörige reziproke Gitter vorgestellt und die Tight-Binding-Methode vorgestellt, um schließlich die Bandstruktur von Graphen zu berechnen. Es wird sich zeigen, dass es sogenannte **Dirac-Punkte** gibt, in denen Leitungs- und Valenzband aufeinandertreffen. Im letzten Abschnitt wird eine Entwicklung um einen solchen Punkt gemacht werden und kurz auf die Begriffe Helizität und Chiralität eingegangen.

## 1.2 Das Sechseckgitter und seine Bravaisstruktur

Das zweidimensionale Sechseckgitter ist für sich genommen kein Translationsgitter oder **Bravaisgitter**. Deshalb wird die Elementarzelle so gewählt, dass in ihr zwei Atome, Atom 1 und Atom 2, liegen, wie in Abbildung 1 dargestellt. Diese beiden Atome repräsentieren jeweils die Untergitter 1 und 2. Diese Untergitter sind Bravaisgitter.

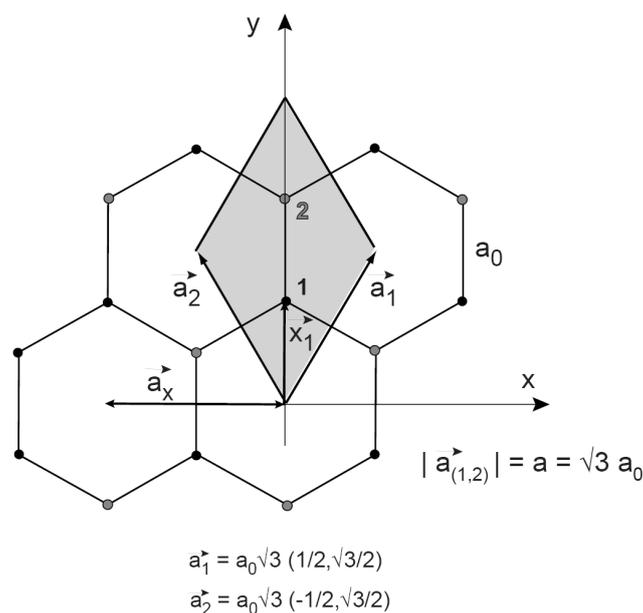


Abbildung 1: Die Wabenstruktur von Graphen; Untergitter 1 und 2 Quelle:[1]

## 1.3 Reziprokes Gitter und Brillouin-Zone

Als nächstes kann man aus der Beziehung zwischen realem und reziprokem Gitter das reziproke Gitter ausrechnen: Das Ergebnis ist in Abbildung 2 dargestellt.

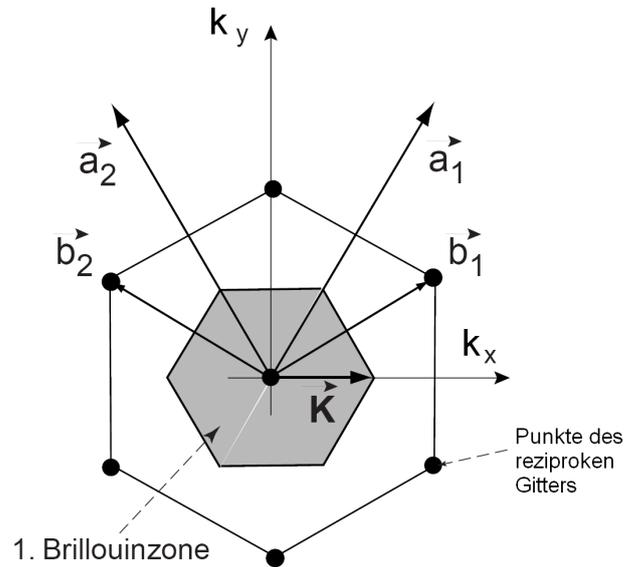


Abbildung 2: Das reziproke Gitter von Graphen; 1. Brillouinzone Quelle:[1]

$$|\vec{K}| = \frac{4\pi}{3a} = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0} \quad (1)$$

## 2 Die LCAO-Methode

### 2.1 Die LCAO-Methode

Die im nächsten Abschnitt zur Berechnung der Bandstruktur von Graphen verwendete Methode ist unter dem Namen **LCAO-Methode** oder Tight-Binding-Näherung bekannt. LCAO steht für Linear Combination of Atomic Orbitals. Das bedeutet, dass sich die Wannier-Funktion  $\phi$  als Linearkombination aus den Funktionen der einzelnen Orbitale zusammensetzt:

$$\phi(\vec{x}) = \sum_n b_n \phi_n = b_1 \phi_1(\vec{x}) + b_2 \phi_2(\vec{x})$$

Hierbei sind die  $\phi_n$  die Funktionen, die zu den einzelnen Orbitalen gehören.

Zu jeder solchen Wannier-Funktion gibt es eine Blochfunktion:

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

Die Vektoren  $\vec{R} \in G$  sind hierbei die Gittervektoren. In der Tight-Binding-Näherung werden nun die übernächsten Nachbarn vernachlässigt, das heißt die Vektoren, über die wir diese Summe im nächsten Abschnitt ausführen werden, sind die Gittervektoren zu den nächsten Nachbarn.

## 3 Berechnung der Bandstruktur von Graphen

### 3.1 Die LCAO-Methode für Graphen

Der Hamiltonoperator des Gitters sieht unter Vernachlässigung der Elektron-Elektron-Wechselwirkung folgendermaßen aus:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V_{\text{Kristall}}$$

Im Grunde geht es im Folgenden darum, die **Schrödingergleichung** zu lösen, um aus den Energieeigenwerten  $E_{\vec{k}}$  die Bandstruktur ablesen zu können:

$$H |\psi_{\vec{k}}\rangle = E_{\vec{k}} |\psi_{\vec{k}}\rangle$$

Die Eigenfunktionen  $\psi_{\vec{k}}$  setzen sich in der Tight-Binding-Näherung aus den  $\phi_n$  zusammen, deshalb interessiert uns die Wirkung des Hamiltonoperators auf eine solche Orbitalfunktion.

Es ist

$$\begin{aligned} H_{\text{Kristall}} \phi_1 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \phi_1 + V_{\text{Kristall}} \phi_1 \\ &= \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \phi_1 + V_{\text{atomar},1} \phi_1}_{H_{\text{atomar},1} \phi_1} + \underbrace{V_{\text{Kristall}} \phi_1 - V_{\text{atomar},1} \phi_1}_{\Delta U_1 \phi_1} \\ &= \varepsilon_1 \phi_1 + \Delta U_1 \phi_1 \end{aligned}$$

Hierbei ist  $\varepsilon_1$  der Eigenwert der Funktion  $\phi_1$ , und  $\Delta U_1$  ist die Potentialdifferenz zwischen dem Potential aller Atome des Gitters und dem Potential von dem Atom 1.

Und es gilt

$$\langle \phi_1 | H \psi_{\vec{k}} \rangle = E_{\vec{k}} \langle \phi_1 | \psi_{\vec{k}} \rangle$$

Andererseits ist der Hamiltonoperator selbstadjungiert, daher lässt sich das selbe Skalarprodukt auch wie folgt schreiben:

$$\langle \phi_1 | H \psi_{\vec{k}} \rangle = \langle H \phi_1 | \psi_{\vec{k}} \rangle = \varepsilon_1 \langle \phi_1 | \psi_{\vec{k}} \rangle + \langle \phi_1 | \Delta U_1 \psi_{\vec{k}} \rangle$$

Damit erhalten wir für die Energieeigenwerte folgende Gleichung

$$(E_{\vec{k}} - \varepsilon_1) \langle \phi_1 | \psi_{\vec{k}} \rangle - \langle \phi_1 | \Delta U_1 \psi_{\vec{k}} \rangle = 0 \quad (2)$$

### 3.2 LCAO-Ansatz für Graphen

Im Fall von Graphen ist es so, dass die beiden Orbitalfunktionen  $\phi_1$  und  $\phi_2$ , aus denen sich die Wannierfunktion in diesem Fall zusammensetzt, den  $p_z$ -Orbitalen der beiden Atome 1 und 2 entsprechen.

Der LCAO-Ansatz für Graphen sieht dann also folgendermaßen aus:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \sum_{\vec{R} \in G} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \left[ b_1 \phi_1(\vec{x} - \vec{R}) + b_2 \phi_2(\vec{x} - \vec{R}) \right] \quad (3)$$

Diesen Ansatz werden wir in die Gleichung 2 einsetzen, die für  $\phi_2$  mit  $\varepsilon_2$  als zugehörigem Eigenwert genauso gilt wie für  $\phi_1$ :

$$(E_{\vec{k}} - \varepsilon_{1,2}) \langle \phi_{1,2} | \psi_{\vec{k}} \rangle - \langle \phi_{1,2} | \Delta U_{1,2} \psi_{\vec{k}} \rangle = 0$$

Dafür benötigen wir die folgenden Skalarprodukte:

$$\langle \phi_1 | \psi_{\vec{k}} \rangle, \quad \langle \phi_2 | \psi_{\vec{k}} \rangle, \quad \langle \phi_1 | \Delta U_1 \psi_{\vec{k}} \rangle, \quad \langle \phi_2 | \Delta U_2 \psi_{\vec{k}} \rangle$$

### 3.3 Benötigte Skalarprodukte

Beim Berechnen des ersten dieser Skalarprodukte werden wir die Abkürzung  $\gamma_0$  für das Überlappintegral benötigen:

$$\begin{aligned} \langle \phi_1 | \psi_{\vec{k}} \rangle &= \sum_{\vec{R} \in G} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \int \phi_1^*(\vec{x}) \left[ b_1 \phi_1(\vec{x} - \vec{R}) + b_2 \phi_2(\vec{x} - \vec{R}) \right] d^3x \\ &= b_1 \int |\phi_1(\vec{x})|^2 d^3x + b_2 \underbrace{\int \phi_1^*(\vec{x}) \phi_2(\vec{x}) d^3x}_{=: \gamma_0} \quad \left. \vphantom{\int \phi_1^*(\vec{x}) \phi_2(\vec{x}) d^3x} \right\} \vec{R} = 0 \\ &+ e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} \left[ b_1 \underbrace{\int \phi_1^*(\vec{x}) \phi_1(\vec{x} + \vec{a}_1) d^3x}_{\approx 0 \text{ (keine n. N.)}} + b_2 \underbrace{\int \phi_1^*(\vec{x}) \phi_2(\vec{x} + \vec{a}_1) d^3x}_{=: \gamma_0 \text{ (Symmetrie)}} \right] \quad \left. \vphantom{\int \phi_1^*(\vec{x}) \phi_2(\vec{x} + \vec{a}_1) d^3x} \right\} \vec{R} = -\vec{a}_1 \\ &+ e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \left[ b_1 \underbrace{\int \phi_1^*(\vec{x}) \phi_1(\vec{x} + \vec{a}_2) d^3x}_{\approx 0 \text{ (keine n. N.)}} + b_2 \underbrace{\int \phi_1^*(\vec{x}) \phi_2(\vec{x} + \vec{a}_2) d^3x}_{=: \gamma_0 \text{ (Symmetrie)}} \right] \quad \left. \vphantom{\int \phi_1^*(\vec{x}) \phi_2(\vec{x} + \vec{a}_2) d^3x} \right\} \vec{R} = -\vec{a}_2 \\ &+ \text{übernächste Nachbarn} \end{aligned}$$

Und es ergibt sich unter Vernachlässigen der übernächsten Nachbarn folgende Näherung:

$$\langle \phi_1 | \psi_{\vec{k}} \rangle \approx b_1 + b_2 \gamma_0 \left( 1 + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \right) \quad (4)$$

Analog dazu erhält man

$$\langle \phi_2 | \psi_{\vec{k}} \rangle \approx b_2 + b_1 \gamma_0 \left( 1 + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \right) \quad (5)$$

durch ausführen der Summe über  $\vec{R} = 0, \vec{a}_1, \vec{a}_2$ .

Für die Berechnung des dritten dieser Skalarprodukte werden wir die Abkürzung  $\gamma_1$  für das Hüpfmatrixelement benötigen:

$$\begin{aligned} \langle \phi_1 | \Delta U_1 \psi_{\vec{k}} \rangle &= \sum_{\vec{R} \in G} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \int \phi_1^*(\vec{x}) \Delta U_1(\vec{x}) \left[ b_1 \phi_1(\vec{x} - \vec{R}) + b_2 \phi_2(\vec{x} - \vec{R}) \right] d^3x \\ &= b_1 \int |\phi_1(\vec{x})|^2 \Delta U_1(\vec{x}) d^3x + b_2 \underbrace{\int \phi_1^*(\vec{x}) \Delta U_1(\vec{x}) \phi_2(\vec{x}) d^3x}_{=:-\gamma_1} \quad \left. \vphantom{\int} \right\} \vec{R} = 0 \\ &+ e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} \left[ \underbrace{b_1 \int \phi_1^*(\vec{x}) \Delta U_1(\vec{x}) \phi_1(\vec{x} + \vec{a}_1) d^3x}_{\approx 0 \text{ (keine n. N.)}} + b_2 \underbrace{\int \phi_1^*(\vec{x}) \Delta U_1(\vec{x}) \phi_2(\vec{x} + \vec{a}_1) d^3x}_{=-\gamma_1 \text{ (Symmetrie)}} \right] \left. \vphantom{\int} \right\} \vec{R} = -\vec{a}_1 \\ &+ e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \left[ \underbrace{b_1 \int \phi_1^*(\vec{x}) \Delta U_1(\vec{x}) \phi_1(\vec{x} + \vec{a}_2) d^3x}_{\approx 0 \text{ (keine n. N.)}} + b_2 \underbrace{\int \phi_1^*(\vec{x}) \Delta U_1(\vec{x}) \phi_2(\vec{x} + \vec{a}_2) d^3x}_{=-\gamma_1 \text{ (Symmetrie)}} \right] \left. \vphantom{\int} \right\} \vec{R} = -\vec{a}_2 \end{aligned}$$

+ übernächste Nachbarn

Und man erhält unter Nichtberücksichtigung der übernächsten Nachbarn folgende Näherung:

$$\langle \phi_1 | \Delta U_1 \psi_{\vec{k}} \rangle \approx -b_2 \gamma_1 \left( 1 + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \right) \quad (6)$$

Analog dazu erhält man

$$\langle \phi_2 | \Delta U_2 \psi_{\vec{k}} \rangle \approx -b_1 \gamma_1 \left( 1 + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \right) \quad (7)$$

durch ausführen der Summe über  $\vec{R} = 0, \vec{a}_1, \vec{a}_2$ .

### 3.4 Dispersionsrelation

Als nächstes werden wir die Ergebnisse der Skalarprodukte in die Gleichung 2 einsetzen und erhalten folgendes Gleichungssystem:

$$\begin{aligned}(E_{\vec{k}} - \varepsilon_1) \langle \phi_1 | \psi_{\vec{k}} \rangle - \langle \phi_1 | \Delta_{U_1} | \psi_{\vec{k}} \rangle &= 0 \\ (E_{\vec{k}} - \varepsilon_2) \langle \phi_2 | \psi_{\vec{k}} \rangle - \langle \phi_2 | \Delta_{U_2} | \psi_{\vec{k}} \rangle &= 0\end{aligned}$$

Als nächstes definieren wir uns die Abkürzung  $\alpha_{\vec{k}}$  wie folgt

$$\begin{aligned}(E_{\vec{k}} - \varepsilon_1) \left[ b_1 + b_2 \gamma_0 \underbrace{\left( 1 + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \right)}_{=: \alpha_{\vec{k}}} \right] + b_2 \gamma_1 \underbrace{\left( 1 + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \right)}_{=: \alpha_{\vec{k}}} &= 0 \\ (E_{\vec{k}} - \varepsilon_2) \left[ b_2 + b_1 \gamma_0 \underbrace{\left( 1 + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \right)}_{=: \alpha_{\vec{k}}^*} \right] + b_1 \gamma_1 \underbrace{\left( 1 + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_2} \right)}_{=: \alpha_{\vec{k}}^*} &= 0\end{aligned}$$

und erhalten damit die folgende vereinfachte Schreibweise:

$$\begin{aligned}(E_{\vec{k}} - \varepsilon_1) [b_1 + b_2 \gamma_0 \alpha_{\vec{k}}] + b_2 \gamma_1 \alpha_{\vec{k}} &= 0 \\ (E_{\vec{k}} - \varepsilon_2) [b_2 + b_1 \gamma_0 \alpha_{\vec{k}}^*] + b_1 \gamma_1 \alpha_{\vec{k}}^* &= 0\end{aligned}$$

Wir können den Nullpunkt der Energieskala festlegen, und werden im Folgenden davon ausgehen, dass

$$\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 0$$

gilt. Das bedeutet, dass wir davon ausgehen, dass beide Untergitter gleich sind, und nicht durch eine Unterlage, die aus zwei verschiedenen Elementen besteht, energetisch verschoben sind.

Wir schreiben das Gleichungssystem nun als Matrix

$$\begin{pmatrix} E_{\vec{k}} & \alpha_{\vec{k}} (E_{\vec{k}} \gamma_0 + \gamma_1) \\ \alpha_{\vec{k}}^* (E_{\vec{k}} \gamma_0 + \gamma_1) & E_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (8)$$

und suchen die Eigenwerte über das charakteristische Polynom:

$$\begin{aligned}E_{\vec{k}}^2 - |\alpha_{\vec{k}}|^2 (E_{\vec{k}} \gamma_0 + \gamma_1)^2 &= 0 \\ E_{\vec{k}}^2 - \underbrace{|\alpha_{\vec{k}}|^2 E_{\vec{k}}^2 \gamma_0^2}_{\approx 0} - \underbrace{2|\alpha_{\vec{k}}|^2 E_{\vec{k}} \gamma_0 \gamma_1}_{\approx 0} - |\alpha_{\vec{k}}|^2 \gamma_1^2 &= 0 \quad (\gamma_0 \ll 1)\end{aligned}$$

Es ergibt sich für die Dispersionsrelation vorläufig folgendes Ergebnis:

$$E_{\vec{k}} = \pm \gamma_1 |\alpha_{\vec{k}}|$$

Deshalb berechnen wir nun das Betragsquadrat von  $\alpha_{\vec{k}}$ :

$$\begin{aligned} |\alpha_{\vec{k}}|^2 &= \alpha_{\vec{k}} \alpha_{\vec{k}}^* = \left(1 + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{a}_2}\right) \left(1 + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}_2}\right) \\ &= 3 + 2 \cos(\vec{k} \cdot \vec{a}_1) + 2 \cos(\vec{k} \cdot \vec{a}_2) + 2 \cos(\vec{k} \cdot (\vec{a}_2 - \vec{a}_1)) \end{aligned}$$

Damit erhält man also für die Dispersionsrelation

$$E(\vec{k}) = \pm \gamma_1 \sqrt{3 + 2 \cos(\vec{k} \cdot \vec{a}_1) + 2 \cos(\vec{k} \cdot \vec{a}_2) + 2 \cos(\vec{k} \cdot (\vec{a}_2 - \vec{a}_1))}$$

Um dieses Ergebnis in Abhängigkeit von  $k_x, k_y$  schreiben zu können, setzen wir die Skalarprodukte  $\vec{k} \cdot \vec{a}_{1,2}$  ein:

$$E(k_x, k_y) = \pm \gamma_1 \sqrt{3 + 2 \cos\left(\frac{1}{2}ak_x + \frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) + 2 \cos\left(-\frac{1}{2}ak_x + \frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) + 2 \cos(ak_x)}$$

Mit den Additionstheoremen für den Cosinus vereinfacht sich dieser Ausdruck zu

$$E(k_x, k_y) = \pm \gamma_1 \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{1}{2}ak_x\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y\right) + 4 \cos^2\left(\frac{1}{2}ak_x\right)} \quad (9)$$

Dieses Ergebnis ist in Abbildung 3 graphisch dargestellt. Man kann sich durch Einset-

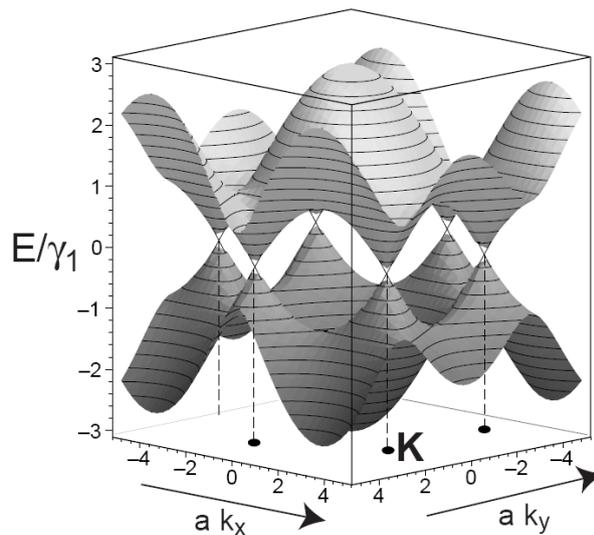


Abbildung 3: Bandstruktur von GraphenQuelle:[1]

zen von Gleichung 1 vergewissern, dass die Eckpunkte der ersten Brioullinzone gerade die Punkte sind, in denen  $E_{\vec{k}} = 0$  gilt. Diese Punkte, in denen also Valenz- und Leitungsband aufeinandertreffen, werden **Dirac-Punkte** genannt. Es ist plausibel, dass nur

in diesen Punkten eine Anregung stattfinden kann, da überall sonst die Bandlücke zu groß ist, und so diese Punkte physikalisch besonders interessant sind. Im nächsten Abschnitt wird daher eine Entwicklung um einen solchen Punkt gemacht werden. Aus 8 kann man aber nicht nur die Eigenwerte  $E_{\vec{k}}$ , sondern auch die Eigenvektoren  $\vec{b}_{\vec{k}}^{(\tau)}$  bestimmen. Dabei sei  $\tau$  im Folgenden immer  $\tau = +1$  für den oberen und  $\tau = -1$  für den untern Zweig der Dispersionsrelation.

Mit  $\gamma_0 = 0$  erhält man aus der oberen Zeile von (8):

$$E_{\vec{k}} b_1 + \gamma_1 \alpha_{\vec{k}} b_2 = 0$$

Daraus ergibt sich für das Verhältnis von  $b_1$  zu  $b_2$

$$\frac{b_2}{b_1} = -\frac{|E_{\vec{k}}|}{\alpha_{\vec{k}} \gamma_1} = -\tau \frac{|\alpha_{\vec{k}}|}{\alpha_{\vec{k}} \gamma_1} = -\tau e^{-i\beta(\vec{k})}$$

, wobei wir für  $\alpha_{\vec{k}}$  ebene Polarkoordinaten eingeführt haben:  $\alpha_{\vec{k}} = |\alpha_{\vec{k}}| e^{i\beta_{\vec{k}}}$ .

Mit der Normierungsbedingung  $|b_1|^2 + |b_2|^2 = 1$  erhält man also

$$\vec{b}_{\vec{k}}^{(\tau)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{i\frac{1}{2}\beta_{\vec{k}}} \\ -\tau e^{-i\frac{1}{2}\beta_{\vec{k}}} \end{pmatrix}$$

$$\text{mit } \beta_{\vec{k}} = \arctan \frac{\text{Im}(\alpha_{\vec{k}})}{\text{Re}(\alpha_{\vec{k}})} = -\arctan \frac{2 \cos(\frac{1}{2}k_x) \sin(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y)}{1 + 2 \cos(\frac{1}{2}k_x) \cos(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y)}$$

## 4 Diskussion

### 4.1 Diskussion

Wir betrachten die Dispersionsrelation für  $k_y = 0$  :

$$\begin{aligned} E(k_x, 0) &= \pm \gamma_1 \sqrt{1 + 4 \cos(\frac{1}{2}ak_x) + 4 \cos^2(\frac{1}{2}ak_x)} \\ &= \pm \gamma_1 \left| 1 + 2 \cos\left(\frac{ak_x}{2}\right) \right| \end{aligned}$$

### 4.2 Entwicklung um den Dirac-Punkt

Wir beginnen mit folgender Entwicklung in  $K$

$$\vec{k} = \vec{K} + \vec{q} = \begin{pmatrix} K + q_x \\ q_y \end{pmatrix} \quad |q| \ll K \quad (10)$$

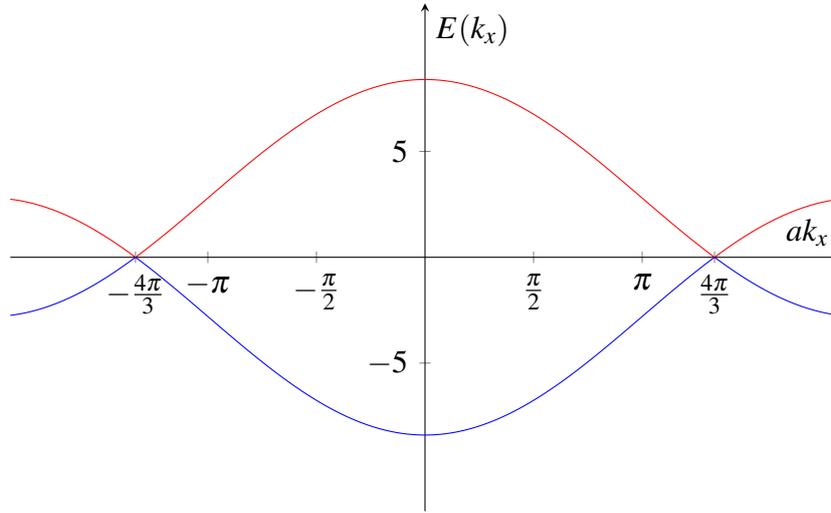


Abbildung 4: Bandstruktur von Graphen für  $k_y = 0$

$$\begin{aligned}\alpha_{\vec{k}} &= 1 + e^{-i(\frac{1}{2}ak_x + \frac{\sqrt{3}}{2}ak_y)} + e^{-i(-\frac{1}{2}ak_x + \frac{\sqrt{3}}{2}ak_y)} \\ &= 1 + 2 \cos(\frac{1}{2}ak_x) e^{-i\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y}\end{aligned}$$

$$\text{Re}(\alpha_{\vec{k}}) = 1 + 2 \cos(\frac{1}{2}ak_x) \cos(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y)$$

$$\text{Im}(\alpha_{\vec{k}}) = -2 \cos(\frac{1}{2}ak_x) \sin(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y)$$

und entwickeln den Realteil und Imaginärteil von  $\alpha_{\vec{k}}$  nach Taylor:

$$\begin{aligned}\text{Re}(\alpha_{\vec{k}}) &= 1 + 2 \cos(\frac{a}{2}K + \frac{a}{2}q_x) \cos(\frac{\sqrt{3}a}{2}q_y) \\ &= 1 + 2 \left[ \cos(\frac{a}{2}K) - \sin(\frac{a}{2}K) \frac{a}{2}q_x + \mathcal{O}(q^2) \right] (1 + \mathcal{O}(q^2)) \\ &= 1 + 2 \left( -\frac{1}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} \frac{a}{2}q_x \right) \\ &= -\frac{\sqrt{3}}{2} aq_x\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\text{Im}(\alpha_{\vec{k}}) &= -2 \cos(\frac{a}{2}K + \frac{a}{2}q_x) \sin(\frac{\sqrt{3}a}{2}q_y) \\ &= -2 \left[ \cos(\frac{a}{2}K) - \sin(\frac{a}{2}K) \frac{a}{2}q_x + \mathcal{O}(q^2) \right] \left( \frac{\sqrt{3}a}{2}q_y + \mathcal{O}(q^3) \right) \\ &= \frac{\sqrt{3}}{2} aq_y\end{aligned}$$

Daraus erhalten wir folgendes Ergebnis für die Dispersionsrelation im Dirac-Punkt

$$E(\vec{q}) = \tau \gamma_1 |\alpha_{\vec{q}}| = \tau \gamma_1 \frac{\sqrt{3}}{2} a |\vec{q}| = \tau \hbar v_F |\vec{q}|$$

Die Dispersionrelation ist in diesem Punkt also linear. Wir können also ihre Steigung berechnen, die als **Fermi-Geschwindigkeit** bezeichnet wird.

$$v_F^{(\vec{q})} = \frac{\gamma_1 \sqrt{3}}{\hbar} a \approx 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$

Entsprechend der Lichtgeschwindigkeit für Photonen, ist diese Geschwindigkeit die Grenzgeschwindigkeit der Bandelektronen im Graphen.

### 4.3 Die Helizität des Pseudospins

Wir rechnen nun die Eigenvektoren im Diracpunkt aus:

$$\begin{aligned} \frac{b_2}{b_1} &= -\frac{E(\vec{k})}{\gamma_1 \alpha_{\vec{q}}} = -\tau \frac{|\alpha_{\vec{q}}|}{\alpha_{\vec{q}}} = -\tau \frac{|\alpha_{\vec{q}}| \alpha_{\vec{q}}^*}{|\alpha_{\vec{q}}|^2} = -\tau \frac{\alpha_{\vec{q}}^*}{|\alpha_{\vec{q}}|} \\ &= -\tau \left[ \frac{-\frac{\sqrt{3}}{2} a q_x - i \frac{\sqrt{3}}{2} a q_y}{\frac{\sqrt{3}}{2} a |\vec{q}|} \right] = \tau \frac{q_x + i q_y}{|\vec{q}|} \\ &= \tau (\cos \theta_{\vec{q}} + i \sin \theta_{\vec{q}}) = \tau e^{i \theta_{\vec{q}}} \end{aligned}$$

Dies sind planare Spinoren:

$$\vec{b}_{\vec{q}}^{(\tau)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i \frac{\theta_{\vec{q}}}{2}} \\ \tau e^{i \frac{\theta_{\vec{q}}}{2}} \end{pmatrix}$$

Die dazugehörige Observable ist der Pseudo-Spin  $\hat{f} = \frac{1}{2} \hat{\sigma}$ . In der folgenden Rechnung soll gezeigt werden, dass die Spinoren Eigen-spinoren des Helizitätsoperators  $\hat{h}$  sind.

$$\begin{aligned} \hat{h} &:= \frac{1}{2} \hat{\sigma} \cdot \frac{\vec{q}}{|\vec{q}|} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \cos \theta_{\vec{q}} - i \sin \theta_{\vec{q}} \\ \cos \theta_{\vec{q}} + i \sin \theta_{\vec{q}} & 0 \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i \theta_{\vec{q}}} \\ e^{i \theta_{\vec{q}}} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{h}\vec{b}_{\vec{q}}^{(\tau)} &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\theta_{\vec{q}}} \\ e^{i\theta_{\vec{q}}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\theta_{\vec{q}}}{2}} \\ \tau e^{i\frac{\theta_{\vec{q}}}{2}} \end{pmatrix} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \tau e^{-i\frac{\theta_{\vec{q}}}{2}} \\ e^{i\frac{\theta_{\vec{q}}}{2}} \end{pmatrix} \\ &= \frac{\tau}{2} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\theta_{\vec{q}}}{2}} \\ \tau e^{i\frac{\theta_{\vec{q}}}{2}} \end{pmatrix} = \frac{\tau}{2} \vec{b}_{\vec{q}}^{(\tau)}\end{aligned}$$

Die  $\vec{b}_{\vec{q}}^{(\tau)}$  sind also Eigenspinoren der Helizität mit Eigenwert  $+\frac{1}{2}$  im Leitungsband und  $-\frac{1}{2}$  im Valenzband. Diese Eigenschaften der Bandelektronen sind nicht invariant unter einer Raumspiegelung. Daher sind die Bandelektronen in Graphen chirale Teilchen.

## 5 Zusammenfassung

Man kann die vier wesentlichen Botschaften dieses Vortrags wie folgt zusammenfassen:

- Leitungs- und Valenzband treffen im Diracpunkt  $\vec{K}$  aufeinander.
- Die Dispersionsrelation ist in diesem Punkt **linear**.
- Die Bandelektronen verhalten sich wie **masselose, relativistische** Teilchen.
- Die Bandelektronen sind **chiral**.

## 6 Literatur

### Literatur

- [1] Schönenberger, C. *Bandstructure of Graphene and Carbon Nanotubes*
- [2] Castro Neto, A. H. et al. *The electronic properties of graphene*, Reviews of Modern Physics **81** (2009) S109
- [3] Geim, A. K. und MacDonald, A.H. *Graphene: Exploring carbon flatland*, Physics Today, August 2007
- [4] Beenakker, C. W. J. *Andreev reflection and Klein tunneling in graphene*, Reviews of Modern Physics, October 2007