

5.5 Graphén

[Nobel-Preis 2010 Geim - Novoselov]

Kapitel 5.1-4: Bosonen (z.B. Phononen), mit  $n_j = 0, 1, 2, 3, \dots$   
 Jetzt: Fermionen (z.B. Elektronen). Das Pauli-Prinzip:  $n_j = 0, 1$  !

Fock-Raum für Fermionen: [Schwabl 1.4]

Zustände:  $|n_1, \dots, n_j, \dots\rangle$

Orthonormierung und Vollständigkeit wie bei Bosonen (Seite 91).

Erzeugungsoperator:  $\hat{a}_j^\dagger | \dots, 0, \dots \rangle = (-1)^{\sum_{i < j} n_i} | \dots, 1, \dots \rangle$ ;  
 $\hat{a}_j^\dagger | \dots, 1, \dots \rangle = 0$   
 $\Rightarrow \hat{a}_j^\dagger | \dots, n_j, \dots \rangle = (-1)^{\sum_{i < j} n_i} \delta_{n_j, 0} | \dots, n_j+1, \dots \rangle$

Vernichtungsoperator:  $\hat{a}_j | \dots, 0, \dots \rangle = 0$ ;  
 $\hat{a}_j | \dots, 1, \dots \rangle = (-1)^{\sum_{i < j} n_i} | \dots, 0, \dots \rangle$   
 $\Rightarrow \hat{a}_j | \dots, n_j, \dots \rangle = (-1)^{\sum_{i < j} n_i} \delta_{n_j, 1} | \dots, n_j-1, \dots \rangle$

Antikommutatoren:  $\{\hat{a}_j, \hat{a}_k\} = \{\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_k^\dagger\} = 0$ ,  $\{\hat{a}_j, \hat{a}_k^\dagger\} = \delta_{jk}$   
 ( $\{\hat{a}_{\vec{k}}, \hat{a}_{\vec{q}}^\dagger\} = \delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{q})$  im thermodynamischen Limes)

Beweis:  
 (3. Behauptung)  
 $\hat{a}_j \hat{a}_k^\dagger | \dots, n_j, n_k, \dots \rangle = (-1)^{\sum_{i < k} n_i} \delta_{n_k, 0} \hat{a}_j | \dots, n_j, n_k+1, \dots \rangle$   
 $= \begin{cases} (-1)^{\sum_{i < k} n_i + \sum_{i < j} n_i} \delta_{n_k, 0} \delta_{n_j, 1} | \dots, n_j-1, n_k+1, \dots \rangle, & j \neq k \\ \delta_{n_k, 0} | \dots, n_j, n_k, \dots \rangle, & j = k \end{cases}$

$\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_j | \dots, n_j, n_k, \dots \rangle = (-1)^{\sum_{i < j} n_i} \delta_{n_j, 1} \hat{a}_k^\dagger | \dots, n_j-1, n_k, \dots \rangle$   
 $= \begin{cases} -(-1)^{\sum_{i < j} n_i + \sum_{i < k} n_i} \delta_{n_j, 1} \delta_{n_k, 0} | \dots, n_j-1, n_k+1, \dots \rangle, & j \neq k \\ \delta_{n_j, 1} | \dots, n_j, n_k, \dots \rangle, & j = k \end{cases}$

Summiere & benutze  $\delta_{n_k, 0} + \delta_{n_k, 1} \stackrel{!}{=} 1 \Rightarrow \blacksquare$

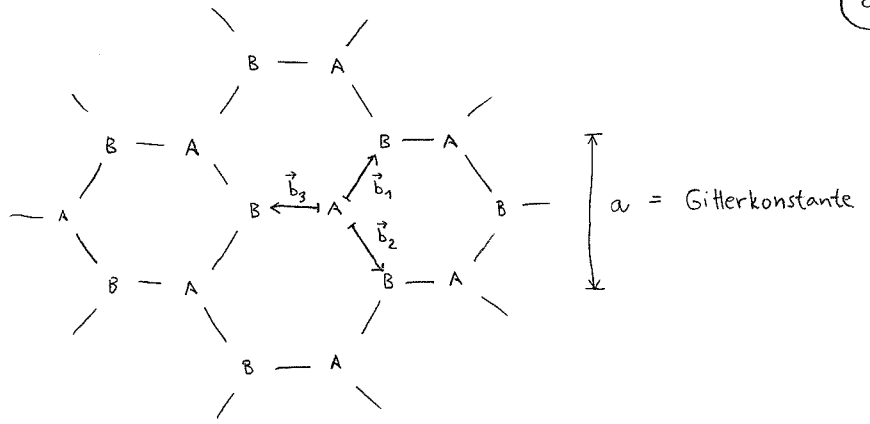
Unterschiedliche Basen: (vgl. Seite 73)

Fermionen haben Spin:  $s = \pm \frac{1}{2} = \uparrow \downarrow$

Impulsraum:  $j \rightarrow \vec{k}, s$ ;  
 $\delta_{jk} \rightarrow \delta^{(3)}(\vec{k}-\vec{q}) \delta_{ss'}$

Ortsraum:  $j \rightarrow \vec{r}, s$   
 $\hat{\Psi}^\dagger(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \hat{a}_{\vec{r}, \uparrow}^\dagger \\ \hat{a}_{\vec{r}, \downarrow}^\dagger \end{pmatrix} = \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \begin{pmatrix} \hat{a}_{\vec{k}, \uparrow}^\dagger \\ \hat{a}_{\vec{k}, \downarrow}^\dagger \end{pmatrix} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}}$ ;  
 $\hat{\Psi}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \hat{a}_{\vec{r}, \uparrow} \\ \hat{a}_{\vec{r}, \downarrow} \end{pmatrix} = \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \begin{pmatrix} \hat{a}_{\vec{k}, \uparrow} \\ \hat{a}_{\vec{k}, \downarrow} \end{pmatrix} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}}$

Bienenwabengitter:



Das Gitter sei unendlich ausgedehnt (thermodynamischer Limes).

Vektoren:

$$\vec{b}_1 = \left( \frac{a}{\sqrt{3}}, \frac{a}{2} \right), \quad \left( \text{vgl. } \begin{matrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{matrix} \right)$$

$$\vec{b}_2 = \left( \frac{a}{\sqrt{3}}, -\frac{a}{2} \right),$$

$$\vec{b}_3 = \left( -\frac{a}{\sqrt{3}}, 0 \right).$$

Elektronen auf dem Gitter:

[G. Semenoff,  
Phys. Rev. Lett. 53 (1984) 2449]

Die Elektronen seien eng an Kohlenstoffatomen verbunden („Tight-Binding-Modell“); die einzige mögliche Bewegung sei ein Sprung (Tunneleffekt) in den benachbarten Gitterpunkt (A → B bzw. B → A).

Wenn Spins der Einfachheit halber vernachlässigt und die Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren bei A durch  $\hat{u}^\dagger, \hat{u}$  und bei B durch  $\hat{v}^\dagger, \hat{v}$  bezeichnet werden, ergibt sich der Fock-Raum-Hamilton-Operator

$$\hat{H} := a \sum_{\vec{x}} \sum_{j \in \{1,2,3\}} \left\{ \hat{u}^\dagger(\vec{x}) \hat{v}(\vec{x} + \vec{b}_j) + \hat{v}^\dagger(\vec{x} + \vec{b}_j) \hat{u}(\vec{x}) \right\}.$$

„Überlappintegral“  
Ortsvektoren von A's  
 $j \in \{1,2,3\}$

(vgl. Einteilchenoperator auf Seite 73)

(Es geht um einen besonderen Limes des „Hubbard-Modells“.)

Fourier-Analyse:

(hier mit der Normierungskonvention von Semenoff; wir hatten ja stets  $\frac{1}{\sqrt{\text{Vol}}}$ , vgl. Seite 79.)

$$\hat{u}(\vec{x}) = \int_{\Omega_B} \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \hat{u}(\vec{k}); \quad \hat{u}^\dagger(\vec{x}) = \int_{\Omega_B} \frac{d^2 \vec{k}}{(2\pi)^2} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \hat{u}^\dagger(\vec{k})$$

$$\hat{v}(\vec{x}) = \int_{\Omega_B} \frac{d^2 \vec{q}}{(2\pi)^2} e^{i\vec{q} \cdot \vec{x}} \hat{v}(\vec{q}); \quad \hat{v}^\dagger(\vec{x}) = \int_{\Omega_B} \frac{d^2 \vec{q}}{(2\pi)^2} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{x}} \hat{v}^\dagger(\vec{q})$$

Brillouin-Zone

Es gilt\*:  $\sum_{\vec{x}} a^2 e^{i(\vec{k}-\vec{q}) \cdot \vec{x}} = (2\pi)^2 \delta^{(2)}(\vec{k}-\vec{q} \text{ „mod } \Omega_B)$

\* In einer Dimension:  $\sum_n a e^{ikna} = a \left\{ 1 + \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \sum_{n=1}^{\infty} \left[ (e^{ika-\epsilon})^n + (e^{-ika-\epsilon})^n \right] \right\}$   
 (Zwei Dimensionen: Seite 82)  
 $= a \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{1-e^{ika-\epsilon}} - \frac{1}{1-e^{ika+\epsilon}} \right\} = 0$  für  $ka \neq 0 \text{ mod } 2\pi$ .  
 Für  $ka=0$ :  $i a \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{ka+i\epsilon} - \frac{1}{ka-i\epsilon} \right\} = 2\pi a \delta(ka) = 2\pi \delta(k)$

Hamilton-Operator in Impulsdarstellung:

$$\hat{H} = \alpha \int_{\Omega_B} \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \left\{ \hat{u}^+(\vec{k}) \hat{v}(\vec{k}) \left( e^{i\vec{k} \cdot \vec{b}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{b}_2} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{b}_3} \right) + \hat{v}^+(\vec{k}) \hat{u}(\vec{k}) \left( e^{-i\vec{k} \cdot \vec{b}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{b}_2} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{b}_3} \right) \right\}$$

$$= \alpha \int_{\Omega_B} \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \begin{pmatrix} \hat{u}^+(\vec{k}) & \hat{v}^+(\vec{k}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & e^{i\vec{k} \cdot \vec{b}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{b}_2} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{b}_3} \\ e^{-i\vec{k} \cdot \vec{b}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{b}_2} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{b}_3} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{u}(\vec{k}) \\ \hat{v}(\vec{k}) \end{pmatrix}$$

Sei  $z := e^{i\vec{k} \cdot \vec{b}_1} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{b}_2} + e^{i\vec{k} \cdot \vec{b}_3}$

Eigenwerte und Diagonalisierung von  $\begin{pmatrix} 0 & z \\ z^* & 0 \end{pmatrix}$ :

\*  $\det \begin{pmatrix} -\lambda & z \\ z^* & -\lambda \end{pmatrix} = \lambda^2 - |z|^2 = 0 \Rightarrow \lambda = \pm |z|$

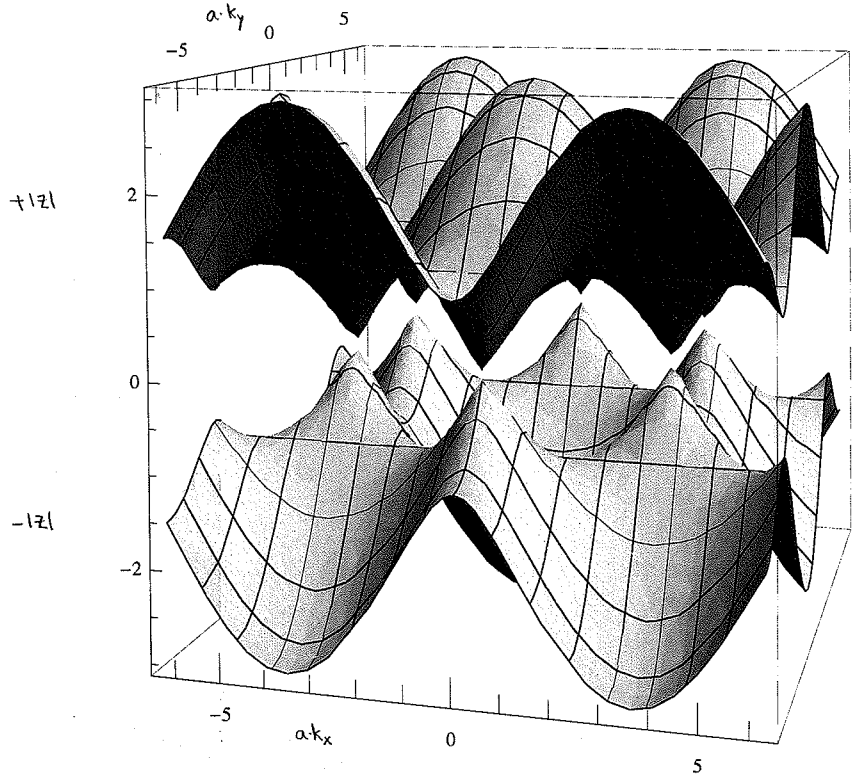
\*  $\begin{pmatrix} 0 & z \\ z^* & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \pm |z| \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \Leftrightarrow \begin{cases} bz = \pm a|z| \\ az^* = \pm b|z| \end{cases} \Rightarrow b = \pm \frac{z^*}{|z|} a$

$\Rightarrow \begin{pmatrix} 0 & z \\ z^* & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2|z|^2} \begin{pmatrix} |z| & |z| \\ z^* & -z^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |z| & 0 \\ 0 & -|z| \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |z| & z \\ |z| & -z \end{pmatrix}$   
 $\begin{pmatrix} |z|^2 & z|z| \\ -z|z| & z|z| \end{pmatrix}$

Bemerkung:  $\left\{ \begin{aligned} \hat{u}' &:= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{u} + \frac{z}{|z|} \hat{v} \right) \\ \hat{v}' &:= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{u} - \frac{z}{|z|} \hat{v} \right) \\ \hat{u}'^\dagger &:= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{u}^\dagger + \frac{z^*}{|z|} \hat{v}^\dagger \right) \\ \hat{v}'^\dagger &:= \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \hat{u}^\dagger - \frac{z^*}{|z|} \hat{v}^\dagger \right) \end{aligned} \right\}$

erfüllen die normale Algebra:  
 $\{ \hat{u}', \hat{u}'^\dagger \} = \frac{1}{2} \left[ \{ \hat{u}, \hat{u}^\dagger \} + \frac{|z|^2}{|z|^2} \{ \hat{v}, \hat{v}^\dagger \} \right]$   
 $\{ \hat{u}', \hat{v}'^\dagger \} = \frac{1}{2} \left[ \{ \hat{u}, \hat{u}^\dagger \} - \frac{|z|^2}{|z|^2} \{ \hat{v}, \hat{v}^\dagger \} \right]$

Energie - Eigenwerte ( $\pm |z|$ ):



← "Leitungsband"

← "Valenzband"

Kontaktpunkte: Bei besonderen Werten (ohne Beweis: genau zwei sind unabhängig, d.h. innerhalb einer einzigen Brillouin-Zone) verschwindet  $|\zeta|$ . Beispiel:  $\vec{k} = \pm \vec{q}$ ;  $\vec{q} := \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3a}\right)$ .

In der Nähe von  $-\vec{q}$ :  $\vec{k} =: -\vec{q} + \vec{k}'$ ;

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{b}_1} = e^{i(-\vec{q} + \vec{k}') \cdot \left(\frac{a}{2\sqrt{3}}, \frac{a}{2}\right)} \approx \underbrace{e^{-2\pi i \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{6}\right)}}_{e^{-\frac{2\pi i}{3}} = -\frac{1}{2} - \frac{i\sqrt{3}}{2}} \left(1 + ia \left[\frac{k'_x}{2\sqrt{3}} + \frac{k'_y}{2}\right] + O(a^2 k'^2)\right)$$

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{b}_2} = e^{i(-\vec{q} + \vec{k}') \cdot \left(\frac{a}{2\sqrt{3}}, -\frac{a}{2}\right)} \approx \underbrace{e^{-2\pi i \left(\frac{1}{6} - \frac{1}{6}\right)}}_1 \left(1 + ia \left[\frac{k'_x}{2\sqrt{3}} - \frac{k'_y}{2}\right] + O(a^2 k'^2)\right)$$

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{b}_3} = e^{i(-\vec{q} + \vec{k}') \cdot \left(-\frac{a}{\sqrt{3}}, 0\right)} \approx \underbrace{e^{-2\pi i \left(-\frac{1}{3}\right)}}_{e^{+\frac{2\pi i}{3}} = -\frac{1}{2} + \frac{i\sqrt{3}}{2}} \left(1 + ia \left[\frac{k'_x}{\sqrt{3}}\right] + O(a^2 k'^2)\right)$$

Die führenden Terme kürzen sich, und übrig bleibt

$$\zeta \approx ia \left\{ \frac{k'_x}{\sqrt{3}} \left[ \underbrace{-\frac{1}{4} + \frac{1}{2} + \frac{1}{2}}_{3/4} \right] + \frac{ik'_x}{2} \left[ \underbrace{-\frac{1}{2} - 1}_{-3/2} \right] + \frac{k'_y}{2} \left[ \underbrace{-\frac{1}{2} - 1 - \frac{i\sqrt{3}}{2}}_{-\frac{3}{2} - i\frac{\sqrt{3}}{2}} \right] \right\}$$

$$= \frac{ia}{4} \cdot (\sqrt{3} - 3i) (k'_x - ik'_y) = \frac{ia\sqrt{3}}{2} e^{-\frac{i\pi}{3}} (k'_x - ik'_y)$$

$$\Rightarrow \hat{H} \approx \frac{\alpha a \sqrt{3}}{2} \int_{|\vec{k}'| \ll 1} \frac{d^2 k'}{(2\pi)^2} \begin{pmatrix} \hat{u}^+(-\vec{q} + \vec{k}') & \hat{v}^+(-\vec{q} + \vec{k}') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & e^{-\frac{i\pi}{3}} (ik'_x + k'_y) \\ e^{i\frac{\pi}{3}} (-ik'_x + k'_y) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{u}(-\vec{q} + \vec{k}') \\ \hat{v}(-\vec{q} + \vec{k}') \end{pmatrix} + \dots$$

Die Pauli-Matrizen:  $\tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ ,  $\tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ ,  $\tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$   
 $\tau_3 \tau_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$ ,  $\tau_3 \tau_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix}$ ,  $\tau_3 \tau_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$

$$\Rightarrow \hat{H} \approx \frac{\alpha a \sqrt{3}}{2} \int_{|\vec{k}'| \ll 1} \frac{d^2 k'}{(2\pi)^2} \begin{pmatrix} \hat{u}^+ & \hat{v}^+ e^{i\frac{\pi}{3}} \end{pmatrix} \tau_3 \left( k'_x \cdot i\tau_3 \tau_1 + k'_y \cdot i\tau_3 \tau_2 \right) \begin{pmatrix} \hat{u} \\ \hat{v} e^{-i\frac{\pi}{3}} \end{pmatrix} + \dots$$

„ $k'_x y^2 + k'_y y^2$ “, vgl. Kapitel 7.

Fazit: Die Anregungen in der Nähe der Kontaktpunkte „erfüllen eine Dirac-Gleichung in zwei räumlichen Dimensionen“.

Appendix: Über Fourier-Analyse auf einem nicht-kartesischen Gitter.

Seite 80  $\Rightarrow$  die A-Gitterpunkte liegen bei  $\vec{x} = m(\vec{b}_1 - \vec{b}_2) + n(\vec{b}_2 - \vec{b}_3) = a \left(\frac{n\sqrt{3}}{2}, m - \frac{n}{2}\right)$ ,  $m, n \in \mathbb{Z}$ .

Sei  $\vec{e}_1 := \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right)$ ;  $\vec{e}_2 := (0, 1) \Rightarrow \vec{x} = a \{n \vec{e}_1 + m \vec{e}_2\}$ .

„Reziprokes Gitter“:  $\{\vec{k}\} = \{s \vec{r}_1 + t \vec{r}_2\}$  mit  $\vec{k} \cdot \vec{x} \in \mathbb{Z}$  für  $s, t \in \mathbb{Z}$ .  
 (oft:  $\frac{\vec{k} \cdot \vec{x}}{2\pi} \in \mathbb{Z}$ )

Brauche also  $\vec{r}_i \cdot \vec{e}_j = \delta_{ij}$ .

$\Rightarrow \vec{r}_1 = \left(\frac{2}{\sqrt{3}}, 0\right)$ ;  $\vec{r}_2 = \left(\frac{1}{\sqrt{3}}, 1\right)$ ;  $\vec{k} := k_1 \vec{r}_1 + k_2 \vec{r}_2$ .

Die Exponentialfunktion faktorisiert sich:  $e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} = e^{ik_1 n a} e^{ik_2 m a} \Rightarrow$  Fußnote auf Seite 80.

Eine Brillouin-Zone kann gewählt werden, z.B.  $\int_{\Omega_B} d^2 k := \int_{-n/a}^{n/a} dk_1 \int_{-n/a}^{n/a} dk_2$ .

In den neuen Koordinaten:  $\vec{q} = \frac{\pi}{a} \left(\frac{2}{3} \vec{r}_1 + \frac{2}{3} \vec{r}_2\right)$ , d.h.  $\pm \vec{q} \in \Omega_B$ .

↑  
Kontaktpunkt