

9. Übung zu FKP WS 2021/22

Ausgabe: 06.12.2021

Prof. D. Suter

Abgabe: 13.12.2021

Aufgabe 1: Plasmafrequenz

(5 Punkte)

Aus der Bewegungsgleichung des freien Elektronengases ergibt sich eine Gleichung für die relative Permittivität dieses Elektronenplasmas:

$$\epsilon_r(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2}$$

$$\omega_p^2 = \frac{Ne^2}{\epsilon_0 m_0}$$

wobei N die Anzahl der Elektronen pro Volumeneinheit und ω_p die Plasmafrequenz ist – Eigenfrequenz des Elektronengases in Abhängigkeit von der Elektronendichte.

a) Bestimmen Sie ϵ_r für $\omega = \omega_p$

b) Bestimmen und skizzieren Sie die Reflektivität $R(\omega)$ bei senkrechtem Einfall der Wellen für $\omega < \omega_p$ und $\omega > \omega_p$ (*Hinweis: $\tilde{n} = \sqrt{\epsilon_r}$*)

In Metallen kann das Elektronengas Longitudinalschwingungen mit der Plasmafrequenz $\omega = \omega_p$ unterstützen. Diese Plasmaschwingungen werden Plasmonen genannt. Die longitudinale Plasmonendispersionsbeziehung $\omega(k)$ für kleine k (lange Wellenlängen) lautet wie folgt:

$$\omega(k) \approx \omega_p \left(1 + \frac{3v_F^2 k^2}{10\omega_p^2} \right)$$

wobei v_F die Fermi-Geschwindigkeit der Elektronen und ω_p die Plasmafrequenz sind. Betrachten wir ein Metall mit der Elektronendichte $N = 10^{29} \text{m}^{-3}$ und der Gitterkonstante $a = 4 \text{Å}$.

c) Berechnen Sie die relative Größe des Terms in k^2 für $k = \frac{0.1\pi}{a}$, d. h. 10 % der Größe der Brillouin-Zone. Ist dieser Term relevant? Was bedeutet das?

Aufgabe 2: Tight-Binding in 3D**(7 Punkte)**

Die Tight-Binding Methode (engl. enge Bindung; abgekürzt TB oder TBM) dient zum Berechnen der elektronischen Bandstruktur von Festkörpern oder Molekülen. Sie ist deutlich weniger rechenintensiv als die Dichtefunktionaltheorie (DFT), da hier meist nur die Valenzelektronen berechnet, die Wechselwirkungen der ersten N Nachbaratome in Form von Parametern berücksichtigt und Ein-Elektron-Betrachtungen durchgeführt werden. Es wird eine atomzentrierte Basis angenommen.

Die Energie ist gegeben durch

$$E(\vec{k}) = E_0 - t \sum_j \exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_j)$$

wobei die Summe über solche Vektoren \vec{R}_j des Bravais-Gitters läuft, die den Ursprung mit seinen nächsten Nachbarn verbinden. Die Größe t ist das für alle nächsten Nachbarn als gleich angenommene Überlappungsintegral.

- a) Berechnen Sie $E(\vec{k})$ für ein fcc-Gitter.
- b) Führen Sie für $E(\vec{k})$ in der Nähe des Γ -Punktes (Zentrum der Brillouinzone) eine Taylor-Entwicklung durch. Vergleichen Sie das Ergebnis mit der Dispersionsrelation freier Elektronen ($E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_e}$) und ermitteln Sie einen Ausdruck für die effektive Masse m^* . Nehmen Sie an für die Gitterkonstante gilt $a = 3\text{\AA}$. Wie groß muss t sein, damit $m^* = m_e$ gilt?

(Die effektive Masse m^* des Elektrons im Kristall beträgt $m^* = \hbar^2 \left[\frac{d^2 E}{dk^2} \right]^{-1}$)

- c) Für ein orthorombisches Gitter ergebe eine Tight-Binding Rechnung die Bandstruktur

$$E(\vec{k}) = E_0 - 2(t_{a1} \cos(k_x a_1) + t_{a2} \cos(k_y a_2) + t_{a3} \cos(k_z a_3)),$$

wobei a_1, a_2 und a_3 die Abmessungen der Einheitszelle darstellen. Berechnen Sie die Komponenten des Vektors der Gruppengeschwindigkeit

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial \vec{k}}$$

und zeigen Sie, dass der Tensor der effektiven Masse

$$\{M^{-1}(\vec{k})\}_{\mu\nu} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_\mu \partial k_\nu}$$

für alle Vektoren \vec{k} diagonal ist.

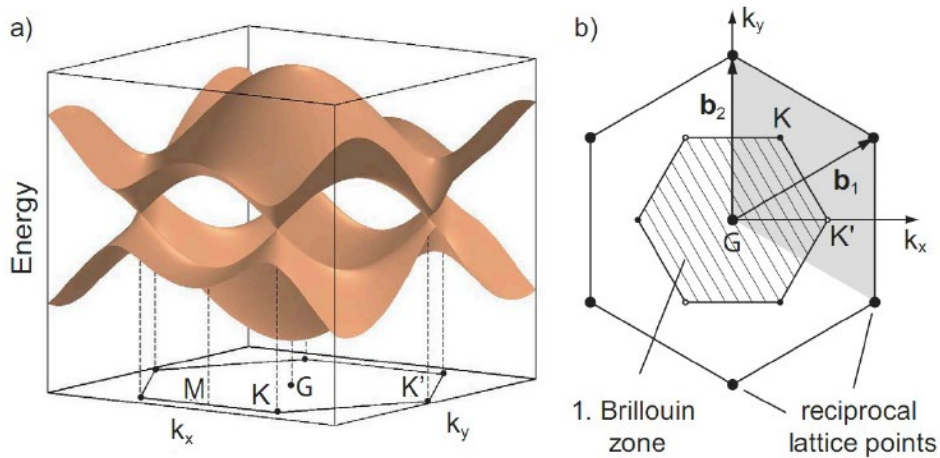
Aufgabe 3: 2-D Bandstrukturmodell für Graphen

(7 Punkte)

Graphen ist eine 2-D Monolage von Kohlenstoffatomen in einer hexagonalen Anordnung von Atomen. Die elektronische Bandstruktur lässt sich gut durch ein Tight Binding-Modell beschreiben. Das Ergebnis einer solchen Berechnung sind Energie Dispersionsrelationen der Form:

$$E^{\pm}(\vec{k}) = \pm \gamma \sqrt{1 + 4 \cdot \cos^2\left(\frac{k_x a}{2}\right) + 4 \cdot \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cdot \cos\left(\frac{\sqrt{3} k_y a}{2}\right)}$$

Hierbei ist $a = 0,246 \text{ nm}$ die Gitterkonstante und $\gamma = 2,9 \text{ eV}$. Wie in der Abbildung gezeigt, berühren sich die beiden Bänder an den sechs Ecken der ersten Brillouinzone. Diese sechs Ecken zerfallen in zwei Klassen nicht äquivalenter Punkte, die sogenannten K – und K' – Punkte. Die Lage dieser Punkte in der ersten Brillouinzone ist $\vec{K} = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{1}{3}, \frac{1}{\sqrt{3}}\right)$ und $\vec{K}' = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{2}{3}, 0\right)$.



- a) Wie groß ist die energetische Bandbreite dieser Bänder, also die Differenz zwischen dem energetischen Maximum und Minimum von, z.B. E^+ ?
- b) Die Fermi-Energie ist null ($E_F = 0$) bei K' . Führen Sie eine Taylorentwicklung der Dispersionsrelation in der Nähe der Fermi-Energie durch. Schreiben Sie dazu den Elektronenwellenvektor $\vec{k} = \vec{K}' + \vec{q}$ ($\vec{K}' = \frac{2\pi}{a} \left(\frac{2}{3}, 0\right)$) und führen Sie eine Taylorentwicklung in der ersten nichtverschwindenden Ordnung in \vec{q} durch. Wie groß ist die Gruppengeschwindigkeit der Ladungsträger in diesem Bereich?
(Tipp: die Geschwindigkeit ist in der Nähe der K – und K' – Punkte isotrop, d.h., nur abhängig von $|\vec{q}|$; sie lässt sich z.B. dadurch bestimmen, dass Sie ausgehend vom K' – Punkt nach q_y entwickeln.)