

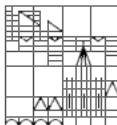
Das Tight-Binding-Modell für einlagiges Graphen

Vortrag im Seminar
Elektronische Eigenschaften von Graphen

Greta Huber

27. April 2009

Universität
Konstanz



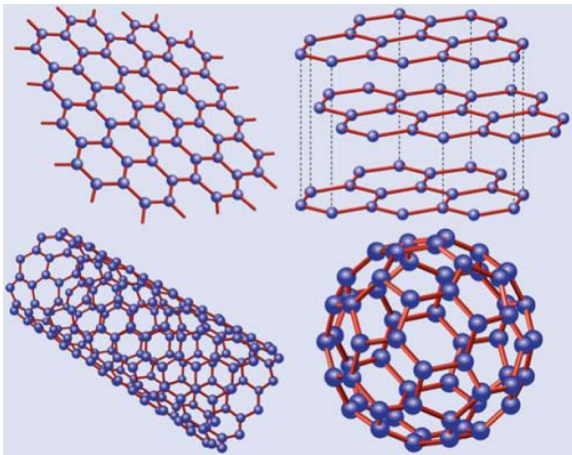
Gliederung

- 1 Einleitung
 - Einleitung
 - Das Sechseckgitter und seine Bravaisstruktur
 - Reziprokes Gitter und Brillouin-Zone
- 2 Die LCAO-Methode
 - Die LCAO-Methode
- 3 Berechnung der Bandstruktur von Graphen
 - Die LCAO-Methode für Graphen
 - Benötigte Skalarprodukte
 - Dispersionsrelation
- 4 Diskussion
 - Diskussion
 - Entwicklung um den Dirac-Punkt
 - Die Helizität des Pseudospins
- 5 Zusammenfassung
 - Zusammenfassung

Gliederung

- 1 Einleitung
 - Einleitung
 - Das Sechseckgitter und seine Bravaisstruktur
 - Reziprokes Gitter und Brillouin-Zone
- 2 Die LCAO-Methode
 - Die LCAO-Methode
- 3 Berechnung der Bandstruktur von Graphen
 - Die LCAO-Methode für Graphen
 - Benötigte Skalarprodukte
 - Dispersionsrelation
- 4 Diskussion
 - Diskussion
 - Entwicklung um den Dirac-Punkt
 - Die Helizität des Pseudospins
- 5 Zusammenfassung
 - Zusammenfassung

Was ist Graphen?



**Zweidimensionaler
Festkörper**

Nanotubes und
Fullerene
(Bucky-Ball)

Abbildung: Graphen, Graphit, Nanotubes und
Fullerene Quelle:[2]

Struktur von Graphen

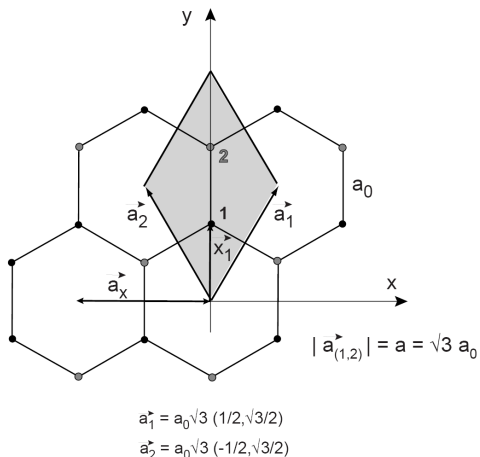
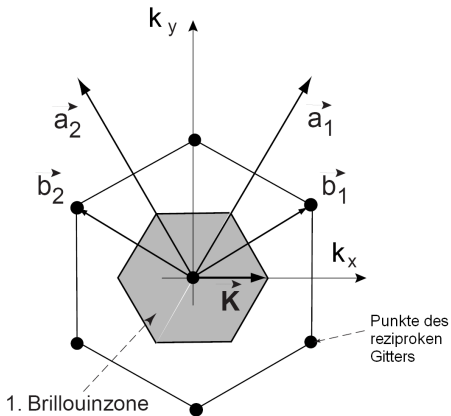


Abbildung: Die Wabenstruktur von Graphen; Untergitter 1 und 2 Quelle:[1]

Reziprokes Gitter



$$|\vec{K}| = \frac{4\pi}{3a} = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a_0}$$

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

Gliederung

- 1 Einleitung
 - Einleitung
 - Das Sechseckgitter und seine Bravaisstruktur
 - Reziprokes Gitter und Brillouin-Zone
- 2 Die LCAO-Methode
 - Die LCAO-Methode
- 3 Berechnung der Bandstruktur von Graphen
 - Die LCAO-Methode für Graphen
 - Benötigte Skalarprodukte
 - Dispersionsrelation
- 4 Diskussion
 - Diskussion
 - Entwicklung um den Dirac-Punkt
 - Die Helizität des Pseudospins
- 5 Zusammenfassung
 - Zusammenfassung

LCAO-Methode oder Tight-binding-Näherung:

- Wannier-Funktion ϕ setzt sich als Linearkombination aus den Funktionen der einzelnen Orbitale zusammen:

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

- Zu jeder solchen Wannier-Funktion gibt es eine Blochfunktion:

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

- Übernächste Nachbarn werden vernachlässigt

Gliederung

- 1 Einleitung
 - Einleitung
 - Das Sechseckgitter und seine Bravaisstruktur
 - Reziprokes Gitter und Brillouin-Zone
- 2 Die LCAO-Methode
 - Die LCAO-Methode
- 3 Berechnung der Bandstruktur von Graphen**
 - Die LCAO-Methode für Graphen
 - Benötigte Skalarprodukte
 - Dispersionsrelation
- 4 Diskussion
 - Diskussion
 - Entwicklung um den Dirac-Punkt
 - Die Helizität des Pseudospins
- 5 Zusammenfassung
 - Zusammenfassung

Hamiltonoperator des Gitters (ohne Elektron-Elektron Wechselwirkung):

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

Schrödingergleichung

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

Im LCAO-Modell wird das $\psi_{\vec{k}}$ durch ϕ_1 und ϕ_2 ausgedrückt. Wie wirkt der Hamiltonoperator auf $\phi_{1,2}$?

$$\begin{aligned}
 H_{\text{Kristall}}\phi_1 &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi_1 + V_{\text{Kristall}}\phi_1 \\
 &= \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\phi_1 + V_{\text{atomar},1}\phi_1}_{H_{\text{atomar},1}\phi_1} + \underbrace{V_{\text{Kristall}}\phi_1 - V_{\text{atomar},1}\phi_1}_{\Delta U_1\phi_1} \\
 &= \epsilon_1\phi_1 + \Delta U_1\phi_1
 \end{aligned}$$

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

Andererseits:

$$\langle \phi_1 | H \psi_{\vec{k}} \rangle = \langle H \phi_1 | \psi_{\vec{k}} \rangle = \epsilon_1 \langle \phi_1 | \psi_{\vec{k}} \rangle + \langle \phi_1 | \Delta U_1 \psi_{\vec{k}} \rangle$$

$$(E_{\vec{k}} - \epsilon_1) \langle \phi_1 | \psi_{\vec{k}} \rangle - \langle \phi_1 | \Delta U_1 \psi_{\vec{k}} \rangle = 0 \quad (1)$$

LCAO-Ansatz für Graphen

Im Fall von Graphen:

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

LCAO-Ansatz:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{x}) = \sum_{\vec{R} \in G} e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}} \left[b_1 \phi_1(\vec{x} - \vec{R}) + b_2 \phi_2(\vec{x} - \vec{R}) \right] \quad (2)$$

Benötigte Skalarprodukte:

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

Benötigte Skalarprodukte

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

+ übernächste Nachbarn

$$\approx b_1 + b_2 \gamma_0 \left(1 + e^{-i \vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{-i \vec{k} \cdot \vec{a}_2} \right)$$

$$\langle \phi_1 | \psi_{\vec{k}} \rangle \approx b_1 + b_2 \gamma_0 \left(1 + e^{-i \vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{-i \vec{k} \cdot \vec{a}_2} \right) \quad (3)$$

Analog dazu erhält man

$$\langle \phi_2 | \psi_{\vec{k}} \rangle \approx b_2 + b_1 \gamma_0 \left(1 + e^{i \vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{i \vec{k} \cdot \vec{a}_2} \right) \quad (4)$$

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

Benötigte Skalarprodukte

$$\begin{aligned}
\langle \phi_1 | \Delta U_1 \psi_{\vec{k}} \rangle &= \sum_{\vec{R} \in G} e^{i \vec{k} \cdot \vec{R}} \int \phi_1^*(\vec{x}) \Delta U_1(\vec{x}) \left[b_1 \phi_1(\vec{x} - \vec{R}) + b_2 \phi_2(\vec{x} - \vec{R}) \right] d^3 x \\
&= b_1 \int |\phi_1(\vec{x})|^2 \Delta U_1(\vec{x}) d^3 x + b_2 \underbrace{\int \phi_1^*(\vec{x}) \Delta U_1(\vec{x}) \phi_2(\vec{x}) d^3 x}_{=:-\gamma_1} \quad \left. \vphantom{\int} \right\} \vec{R} = 0 \\
&\quad + e^{-i \vec{k} \cdot \vec{a}_1} \left[b_1 \underbrace{\int \phi_1^*(\vec{x}) \Delta U_1(\vec{x}) \phi_1(\vec{x} + \vec{a}_1) d^3 x}_{\approx 0 \text{ (keine n. N.)}} + b_2 \underbrace{\int \phi_1^*(\vec{x}) \Delta U_1(\vec{x}) \phi_2(\vec{x} + \vec{a}_1) d^3 x}_{=-\gamma_1 \text{ (Symmetrie)}} \right] \left. \vphantom{\int} \right\} \vec{R} = -\vec{a}_1 \\
&\quad + e^{-i \vec{k} \cdot \vec{a}_2} \left[b_1 \underbrace{\int \phi_1^*(\vec{x}) \Delta U_1(\vec{x}) \phi_1(\vec{x} + \vec{a}_2) d^3 x}_{\approx 0 \text{ (keine n. N.)}} + b_2 \underbrace{\int \phi_1^*(\vec{x}) \Delta U_1(\vec{x}) \phi_2(\vec{x} + \vec{a}_2) d^3 x}_{=-\gamma_1 \text{ (Symmetrie)}} \right] \left. \vphantom{\int} \right\} \vec{R} = -\vec{a}_2 \\
&\quad + \text{übernächste Nachbarn} \\
&\approx -b_2 \gamma_1 \left(1 + e^{-i \vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{-i \vec{k} \cdot \vec{a}_2} \right)
\end{aligned}$$

$$\langle \phi_1 | \Delta U_1 \psi_{\vec{k}} \rangle \approx -b_2 \gamma_1 \left(1 + e^{-i \vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{-i \vec{k} \cdot \vec{a}_2} \right) \quad (5)$$

Analog dazu erhält man

$$\langle \phi_2 | \Delta U_2 \psi_{\vec{k}} \rangle \approx -b_1 \gamma_1 \left(1 + e^{i \vec{k} \cdot \vec{a}_1} + e^{i \vec{k} \cdot \vec{a}_2} \right) \quad (6)$$

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

$$(E_{\vec{k}} - \epsilon_1) \langle \phi_1 | \psi_{\vec{k}} \rangle - \langle \phi_1 | \Delta_{U_1} | \psi_{\vec{k}} \rangle = 0$$

$$(E_{\vec{k}} - \epsilon_2) \langle \phi_2 | \psi_{\vec{k}} \rangle - \langle \phi_2 | \Delta_{U_2} | \psi_{\vec{k}} \rangle = 0$$

$$(E_{\vec{k}} - \epsilon_1) \left[b_1 + b_2 \gamma_0 \underbrace{\left(1 + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} \right)}_{=:\alpha_{\vec{k}}} \right] + b_2 \gamma_1 \underbrace{\left(1 + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{-i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} \right)}_{=\alpha_{\vec{k}}} = 0$$

$$(E_{\vec{k}} - \epsilon_2) \left[b_2 + b_1 \gamma_0 \underbrace{\left(1 + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} \right)}_{=\alpha_{\vec{k}}^*} \right] + b_1 \gamma_1 \underbrace{\left(1 + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_1} + e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}_2} \right)}_{=\alpha_{\vec{k}}^*} = 0$$

$$(E_{\vec{k}} - \epsilon_1) [b_1 + b_2 \gamma_0 \alpha_{\vec{k}}] + b_2 \gamma_1 \alpha_{\vec{k}} = 0$$

$$(E_{\vec{k}} - \epsilon_2) [b_2 + b_1 \gamma_0 \alpha_{\vec{k}}^*] + b_1 \gamma_1 \alpha_{\vec{k}}^* = 0$$

Untergitter gleich, nicht durch Unterlage energetisch verschoben

$$\epsilon_1 = \epsilon_2 = 0$$

$$\begin{pmatrix} E_{\vec{k}} & \alpha_{\vec{k}} (E_{\vec{k}} \gamma_0 + \gamma_1) \\ \alpha_{\vec{k}}^* (E_{\vec{k}} \gamma_0 + \gamma_1) & E_{\vec{k}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (7)$$

Suchen der Eigenwerte über das charakteristische Polynom:

$$E_{\vec{k}}^2 - |\alpha_{\vec{k}}|^2 (E_{\vec{k}} \gamma_0 + \gamma_1)^2 = 0$$

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

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

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

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

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

Dispersionsrelation

$$E(k_x, k_y) = \pm\gamma_1 \sqrt{1 + 4 \cos(\frac{1}{2}ak_x) \cos(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y) + 4 \cos^2(\frac{1}{2}ak_x)} \quad (8)$$

Dispersionsrelation

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

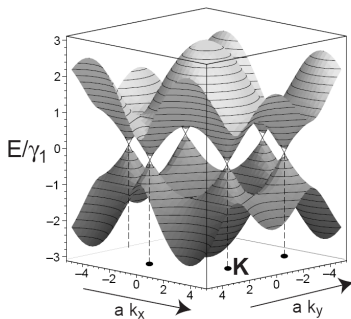


Abbildung: Bandstruktur von Graphen Quelle:[1]

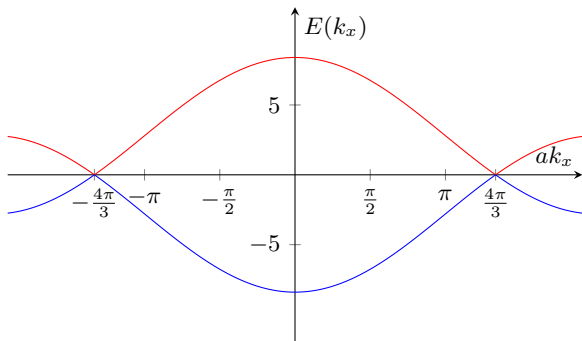
Gliederung

- 1 Einleitung
 - Einleitung
 - Das Sechseckgitter und seine Bravaisstruktur
 - Reziprokes Gitter und Brillouin-Zone
- 2 Die LCAO-Methode
 - Die LCAO-Methode
- 3 Berechnung der Bandstruktur von Graphen
 - Die LCAO-Methode für Graphen
 - Benötigte Skalarprodukte
 - Dispersionsrelation
- 4 Diskussion**
 - Diskussion
 - Entwicklung um den Dirac-Punkt
 - Die Helizität des Pseudospins
- 5 Zusammenfassung
 - Zusammenfassung

Diskussion

Wir betrachten die Dispersionsrelation für $k_y = 0$:

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



Entwicklung um den Dirac-Punkt

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

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

$$\begin{aligned} \Rightarrow \operatorname{Re}(\alpha_{\vec{k}}) &= 1 + 2 \cos(\frac{1}{2}ak_x) \cos(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y) \\ \operatorname{Im}(\alpha_{\vec{k}}) &= -2 \cos(\frac{1}{2}ak_x) \sin(\frac{\sqrt{3}}{2}ak_y) \end{aligned}$$

Entwicklung um den Dirac-Punkt

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

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

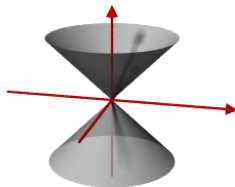
Entwicklung um den Dirac-Punkt

Dispersionsrelation im Dirac-Punkt

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

Fermi-Geschwindigkeit

$$v_F^{(\vec{q})} = \frac{\gamma_1}{\hbar} \frac{\sqrt{3}}{2} a \approx 10^6 \frac{\text{m}}{\text{s}}$$



Die Helizität des Pseudospins

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

Dies sind planare Spinoren:

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

Pseudo-Spin $\hat{f} = \frac{1}{2} \hat{\sigma}$

Die Helizität des Pseudospins

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

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

Die Helizität des Pseudospins

Die $\vec{b}_{\vec{q}}^{(\tau)}$ sind also Eigenspinoren der Helizität mit Eigenwert $+\frac{1}{2}$ (LB) und $-\frac{1}{2}$ (VB):

$$\hat{h}\vec{b}_{\vec{q}}^{(\tau)} = \frac{\tau}{2}\vec{b}_{\vec{q}}^{(\tau)}$$

Daher sind die Bandelektronen chirale Teilchen.

Gliederung

- 1 Einleitung
 - Einleitung
 - Das Sechseckgitter und seine Bravaisstruktur
 - Reziprokes Gitter und Brillouin-Zone
- 2 Die LCAO-Methode
 - Die LCAO-Methode
- 3 Berechnung der Bandstruktur von Graphen
 - Die LCAO-Methode für Graphen
 - Benötigte Skalarprodukte
 - Dispersionsrelation
- 4 Diskussion
 - Diskussion
 - Entwicklung um den Dirac-Punkt
 - Die Helizität des Pseudospins
- 5 Zusammenfassung
 - Zusammenfassung

Zusammenfassung

- 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**.

