

Übungen zu Integrierter Kurs II - Festkörper und Statistische Physik  
Blatt 13

Übungsleiter:

Dr. Andrea Donarini (3.1.24, phone 2040)  
Dr. Christoph Lange (2.0.07, phone 5704)

(Theorie, Do 8:30h - 12h, Phy 2.1.29)  
(Experiment, Fr 12h - 14h c.t., Phy 2.1.29)

Part I: Theory

13.1 Band structure of a square lattice

Consider a two-dimensional square crystal with lattice constant  $a$ . The ions have coordinates  $\vec{R} = n\vec{a}_1 + m\vec{a}_2$ , where  $\vec{a}_1 = a\vec{e}_x$ ,  $\vec{a}_2 = a\vec{e}_y$ , with  $\vec{e}_{x,y}$  the unity vector in the  $x, y$  direction and  $n, m$  integers. Let us assume one atomic orbital per atom. The Hamilton operator in the atomic basis is given by

$$\hat{h} = t \sum_{\vec{R}\vec{R}' \in \text{n.n.}} |\vec{R}\rangle \langle \vec{R}'|,$$

where for the tunnelling amplitude we assume  $t < 0$ . What is the first Brillouin zone of the system? Calculate the band structure associated with this crystal. **(1 Point)**

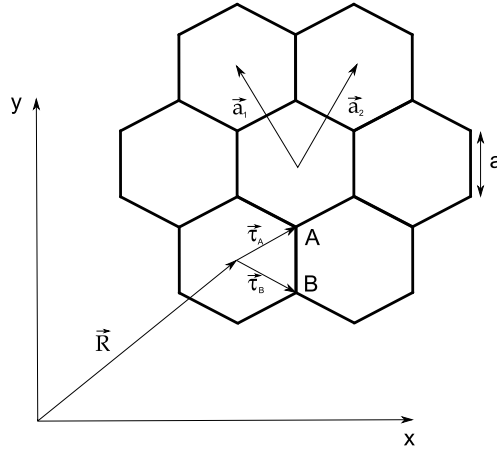
13.2 Electronic structure of non-interacting graphene

A graphene sheet is a honeycomb lattice of carbon atoms, as shown below. Let the distance between carbon atoms be  $a = 1.42 \text{ \AA}$ . A good model for graphene is to consider it a planar structure with one valence electron per carbon atom. To calculate the electronic bands of the non-interacting problem we will use the LCAO method with a single  $p_z$  orbital at each carbon site. Let  $\vec{R}$  denote the centers of the hexagons in the honeycomb: these form the underlying Bravais lattice. (Note that it is different from the graphene hexagonal lattice.) The unit cell spanned by  $\vec{a}_1$  and  $\vec{a}_2$  contains two carbon atoms conventionally labelled as A and B atoms, located at  $\vec{R} + \vec{\tau}_A$ ,  $\vec{R} + \vec{\tau}_B$  as shown in the figure. The tight-binding amplitude connecting these sites is denoted by  $t$ . We can choose the zero of energy so that the energy of an isolated  $p_z$  orbital is zero. Then the entire Hamiltonian consists only of the nearest-neighbour hopping.

1. Find the reciprocal lattice and construct the first Brillouin zone. **(1 Point)**

2. Write the Hamiltonian in the basis of the extended states

$$\begin{aligned} |\phi_{A\vec{k}}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N_{\text{cell}}}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} |p_z, \vec{R} + \vec{\tau}_A\rangle \\ |\phi_{B\vec{k}}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{N_{\text{cell}}}} \sum_{\vec{R}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}} |p_z, \vec{R} + \vec{\tau}_B\rangle, \end{aligned}$$



where  $N_{cell}$  is the number of the unit cells of the crystal and  $|p_z, \vec{S}\rangle$  is the state of the  $p_z$  orbital localized in the position  $\vec{S}$ . Hint: make use of the relation

$$\frac{1}{N_{cell}} \sum_{\vec{R}} \exp \left\{ i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{R} \right\} = \delta_{\vec{k}\vec{k}'},$$

where the sum is intended over the Bravais lattice and  $\vec{k}$  and  $\vec{k}'$  belong to the reciprocal lattice. **(2 points)**

3. The generic extended states of the graphene sheet have the form:  $|\psi\rangle = \sum_{\vec{k}} c_{A\vec{k}} |\phi_{A\vec{k}}\rangle + c_{B\vec{k}} |\phi_{B\vec{k}}\rangle$ , where  $c_{A\vec{k}}$  and  $c_{B\vec{k}}$  are complex numbers. Look for the eigenstates of the system and find also the corresponding eigenvalues. How many bands do you find? What are the energy-wavevector relations? Hint: You will need to solve a  $2 \times 2$  matrix eigenvalue problem - the time-independent Schrödinger equation written in the basis of extended states. **(2 Points)**
4. Show that the Fermi energy is equal to zero by verifying that this gives the correct electron density (*i.e.* one ( $\pi$ )-electron per carbon atom). Find the set of  $\vec{k}$  points for which  $\epsilon(\vec{k}) = 0$ . Show that these correspond to the corners of the first Brillouin zone. **(2 Points)**
5. Plot the complete dispersion relation of graphene. **(1 Point)**
6. Show that near to a (first) Brillouin zone corner with wavevector  $\vec{K}$  (note that  $\vec{K}$  is the location of a BZ corner, not a reciprocal lattice vector), the spectrum is approximately

$$\epsilon(\vec{k}) \approx \pm \hbar v \sqrt{(k_x - K_x)^2 + (k_y - K_y)^2}.$$

Determine the velocity  $v$  in terms of  $t$  and  $a$ . This behaviour is intermediate between that of a metal (with a Fermi surface instead of Fermi points  $\vec{K}$ ) and an insulator (with a band gap). Indeed, graphene behaves like a semi-metal, with poor conductivity yet significantly higher than in an insulator. **(2 Points)**

## Part II: Experiment

### 13.3 Ladungsträgerdichte von Halbleitern

Betrachten Sie einen Halbleiter mit einer Donatorkonzentration von  $10^{19} \text{ m}^{-3}$ . Die Ionisationsenergie der Donatoren soll  $E_I = 1 \text{ meV}$  und die effektive Masse der Elektronen im Leitungsband  $m_e = 0.01 m$  betragen, wobei  $m$  die freie Elektronenmasse bezeichnet. Schätzen Sie die Konzentration der Leitungselektronen bei 4 und 300 K ab. Welchen Wert hat der Hall-Koeffizient? Nehmen Sie bei der Rechnung an, dass keine Akzeptoratomer vorhanden sind und dass  $E_g \gg k_B T$  gilt.

### 13.4 Quantum Confinement und Halbleiterlaser

Der III-V-Halbleiter GaAs weist bei Raumtemperatur eine direkte Energielücke von 1.43 eV auf und kommt oft als hocheffizienter Halbleiterlaser zum Einsatz. AlAs und die Legierung  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  mit dem Mischparameter  $0 < x < 1$  sind mit GaAs epitaktisch kompatible Materialien, d.h., sie kristallisieren in der gleichen Struktur und weisen hinreichend ähnliche Gitterkonstanten auf, um beispielsweise als dünne Schichtfolgen aufeinander aufgebracht zu werden. Die Energielücken von AlAs und (für typische Werte von  $x \approx 30\%$ ) die von  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  sind dabei deutlich höher als die von GaAs. Schließt man mit diesen Materialien eine dünne GaAs-Schicht ein, so ergibt sich daher für die Ladungsträger in GaAs sowohl im Valenz- als auch im Leitungsband die Situation eines eindimensionalen Potentialtopfes, was man als Quantum Confinement bezeichnet.

Nehmen Sie an, dass das Quantum Confinement in einer solchen Struktur in  $z$ -Richtung durch zwei unendlich hohe Potenzialbarrieren mit Abstand  $L$  erfolgt. Bestimmen Sie die Breite des Topfes, bei der sich in der GaAs-Schicht ein Laser-Übergang aus einem Elektronenzustand im Leitungsband ( $m_e^* = 0.07 m$ ) in einen schweren Lochzustand im Valenzband ( $m_{\text{hh}}^* = 0.68 m$ ) bei einer Energie von 1.62 eV ergibt, wobei  $m$  die freie Elektronenmasse bezeichnet.

### 13.5 Wasserstoff-Atommodell des Exzitons

Berechnen Sie die Bindungsenergie der Wannier-Mott-Exzitonen in GaAs. Verwenden Sie effektive Massen von  $m_e^* = 0.07 m$  für das Elektron und  $m_{\text{hh}}^* = 0.68 m$  für das schwere Loch, wobei  $m$  die freie Elektronenmasse bezeichnet. Die Dielektrizitätskonstante von GaAs beträgt  $\epsilon_{\text{GaAs}} = 12.9$ .