Monte-Carlo-Simulationen der elektronischen Eigenschaften von Graphen



Researchers
Dominik Smith

Principal Investigator
Prof. Dr. Lorenz von Smekal

Project Term
2012 - 2015

Project Areas
Chemical Solid State and Surface Research, Optics, Quantum Optics and Physics of Atoms, Molecules and Plasmas

Clusters
Lichtenberg Cluster Darmstadt

Institute
Theoriezentrum Institut für Kernphysik

University
Technische Universität Darmstadt

Introduction

Das Projekt befasst sich mit der ab-initio Simulation der elektronischen Eigenschaften von Graphen (einem zweidimensionalen Allotrop von Kohlenstoff, dessen Atome ein hexagonales Gitter bilden) auf Grafikprozessoren (GPUs). Hierbei kommt ein Hybrid-Monte-Carlo Algorithmus zum Einsatz, welcher ein etabliertes Verfahren der Hochenergiephysik zur Simulation stark gekoppelter Fermionensysteme ist. Genutzt werden die GPU-Knoten des Lichtenberg-Clusters in Darmstadt.

Erster Schwerpunkt des Projekts war eine Untersuchung des Halbleiter-Nichtleiter Übergangs, welcher durch die starke Zweikörper-Wechselwirkung der freien Valenzelektronen im Graphengitter hervorgerufen wird. Dabei war insbesondere eine genaue Lokalisation der kritischen Kopplungsstärke für die Bildung der Nichtleiter-Phase, bei realistischer Modellierung des Zweikörper-Potentials, das Ziel.

Motiviert wurde diese Arbeit durch die Diskrepanz zwischen existierenden theoretischen Rechnungen und Simulationen, welche die Nichtleiter-Phase für freistehendes Graphen (ohne Substrat) vorhersagten und experimentellen Resultaten welche diese Phase nicht vorfanden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde gezeigt, dass diese Diskrepanz verschwindet wenn die Abschirmung der Zweikörper-Wechselwirkung durch Elektronen in tieferliegenden Orbitalen („Sigma-Band“) berücksichtigt wird.

JUSTUS-LIEBIG-UNIVERSITÄT GIESSEN
TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT
UNIKASSEL VERSITÄT
Philipps Universität Marburg

Methods

Basierend auf theoretischen Arbeiten von Katsnelson et al., welche mittels einer dynamischen Hartree-Fock-Näherung exakte Werte des abgeschirmten Coulomb Potentials auf kurzen Distanzen im Graphengitter berechneten, wurde ein „teileweise-abgeschirmtes Potential“ (partially screened Potential) konstruiert welches im Grenzfall großer Abstände in ein reguläres Coulomb-Potential uebergeht. Simulationen unter Verwendung dieses Potentials zeigten, dass die kritische Kopplungsstärke nunmer außerhalb des physikalisch realisierbaren Bereichs liegt.[1-3]

Discussion

Aktuell beschäftigt sich dieses Projekt mit der Untersuchung des topologischen Lifshitz-Übergangs, welcher bekanntermaßen in einer reinen Tight-Binding Beschreibung (nicht-wechselwirkender Grenzfall) von Graphen auftritt, wenn ein äußeres chemisches Potential (hervorgerufen im Experiment z.B. durch Dotierung) berücksichtigt wird.[2] Dieser Übergang ist charakterisiert durch eine Änderung der Topologie der Fermi-Fläche, sowie durch eine Veränderung der Dispersionsrelation niederenergetischer Anregungen. Dabei soll durch die Simulation vor allem geklärt werden in welcher Weise Zweikörper-Wechselwirkungen diesen Übergang beeinflussen. Dieses Teilprojekt ist unter anderem im Zusammenhang mit Hochtemperatur-Supraleitung interessant.

Outlook

Weiterhin wird aktuell eine Studie zum Effekt eines externen Magnetfeldes, senkrecht zur Ebene des Gitters, auf die elektronischen Eigenschaften von Graphen vorbereitet. Insbesondere ist dabei von großem Interesse (sowohl aus theoretischer Sicht als auch im Bezug auf technologische Anwendung) ob sich eine Nichtleiter- Phase durch ein externes Feld, mittels magnetischer Katalyse erzeugen lässt. Eine entsprechende Simulation ist bereits implementiert und befindet sich aktuell in der Testphase.

Reference

[1] D. Smith and L. von Smekal (2014), Monte-Carlo simulation of the tight-binding model of graphene with partially screened Coulomb interactions, Phys. Rev. B89, 195429. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.195429

[2] D. Smith, M. Körner, and L. v. Smekal (2014), On the semimetal-insulator transition and Lifshitz transition in simulations of mono-layer graphene, Proceedings of Science, LATTICE2014, 055. https://doi.org/10.48550/arXiv.1410.7601

[3] D. Smith and L. v. Smekal (2013), Hybrid Monte-Carlo simulation of interacting tight-binding model of graphene, Proceedings of Science LATTICE 2013, 048. https://doi.org/10.48550/arXiv.1311.1130

JUSTUS-LIEBIG-UNIVERSITÄT GIESSEN
TECHNISCHE UNIVERSITÄT DARMSTADT
UNIKASSEL VERSITÄT
Philipps Universität Marburg

Last Update: 2022-09-02 00:12